

## 15. ATOMI U ELEKTRIČNOM POLJU

### 15.1 Opažanje Štarkovog efekta

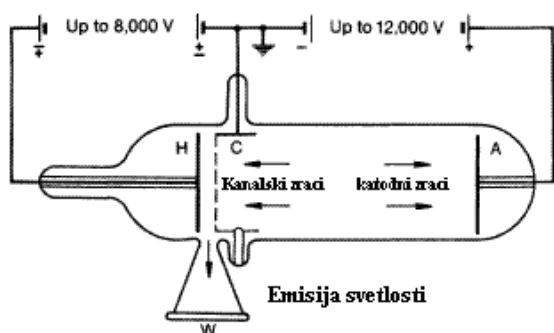
1913 Štark je opazio cepanje linija Balmerove serije vodonika (8.2) u električnom polju. On je proučavao emisiju svetlosti H atoma u polju kondenzatora (Slike 15.1,2). Od tada, pomeraj frekvencije u optičkim spektrima u prisustvu električnog polja naziva se Štarkov efekat.

Ovaj efekat je teže opaziti od Zeemanovog efekta, jer je potrebno generisati jako električno polje, ali bez varničenja. Takođe, znatno je manje važnosti za eksperimentalnu atomsku fiziku od Zeemanovog efekta.

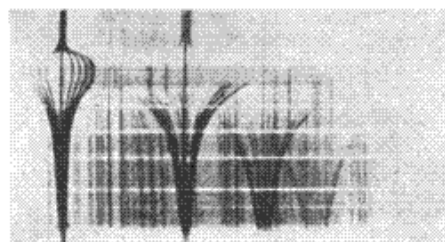
Opaženo je:

-Sa vodonikom i sličnim atomima kao što su  $\text{He}^+$ ,  $\text{L}^{++}$  i sl. cepanje terma sa  $l \neq 0$  i spektralnih linija povezanih sa tim termom. Cepanje je proporcionalno jačini polja  $F$ . Ovaj takozvani linearni Štarkov efekat je prisutan kada je degeneracija po  $l$ - degeneracija stanja sa istim glavnim kvantnim brojem  $n$  i različitim kvantnim brojem orbitalnog angularnog momenta  $l$  - ukinuta spoljašnjim električnim poljem, ako već nije ranije ukinuta unutarjim atomskim poljem;

- Pomeraj i cepanje termova u svim atomima proporcionalno sa  $F^2$ . Ovo je kvadratični Štarkov efekat.



Slika 15.1. Cev sa kanalskim zracima za proučavanje emisije atoma u električnom polju: Starkov efekat. Napon između katode C i elektrode H može biti i do 8000 V. Rezultujuće cepanje spektralnih linija se opaža kroz prozor W. Da bi se proučavao neutralni H atomi, pozitivni joni iz kanalskih zraka se moraju neutralisati. Ovo nije prikazano na slici.



Slika 15.2. Cepanje linija atoma vodonika u električnom polju. Jačina polja se menja duž izvora svetlosti čija se slika pokazuje posle prolaska kroz spektrografski prorez. Polje je  $10^5$  V/cm u oblasti malog cepanja pri dnu slike i raste do vrednosti od  $1.14 \cdot 10^6$  V/cm u delu najvećeg cepanja. Iz K.H. Helwege, *Einführung in die Physik der Atome*, Heidelberger Taschenbucher, Vol 2, 4<sup>th</sup> Izdanje (Springer, Berlin 1974) Slika 45.

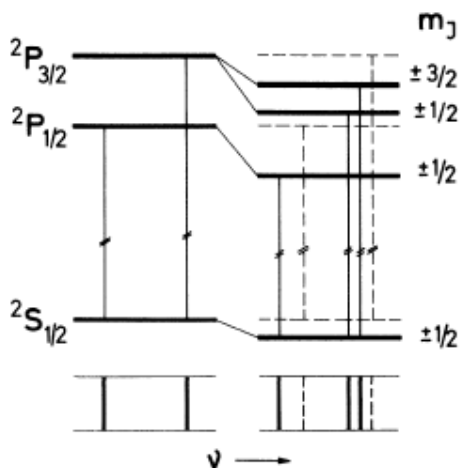
Kvadratični Štarkov efekat se intuitivno može razumeti na sledeći način. Ukidanje  $l$  degeneracije spoljašnjih elektrona u atomu uvek dovodi do stanja koja nemaju električni dipolni momenat usrednjeno u toku vremena. Ovo se može demonstrirati egzaktno preko kvantne mehanike. Primenjeno električno polje indukuje električni dipolni momenat  $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{F}$  u atomu, gde je  $\alpha$  polarizibilnost atoma. Ona je prirodno funkcija kvantnih brojeva atomskog stanja i razlikuje se za svaku elektronsku konfiguraciju.

Električno polje deluje na ovaj indukovani dipolni momenat. Energija interakcije je data sa

$$V_{el} = \frac{1}{2} \vec{p} \cdot \vec{F} = \frac{1}{2} \alpha F^2 \quad (15.1)$$

Na ovaj način smo kvalitativno objasnili proporcionalnost između pomeraja termova i kvadrata jačine električnog polja.

Linearni Štarkov efekat, koji se opaža kod vodonikovog atoma se ne može tako lako razumeti na intuitivnoj osnovi. Ovaj efekat se može razumeti samo na osnovu kvantne mehanike. Originalno prisutna degeneracija po  $l$  u odsustvu polja  $\mathbf{F}$ , se ukida električnim poljem jer se Kulonov potencijal jezgra perturbira poljem  $\mathbf{F}$ . Ovaj efekat će se detaljnije tretirati u sekciji 15.2.



Slika 15.3. Dijagram energetske nivoa Starkovog efekta za natrijumov dublet  $3^2P_{3/2,1/2} - 3^2S_{1/2}$  i slika cepanja D linija.

Fundamentalna razlika između Štarkovog efekta i cepanja spektralnih linija u magnetnom polju je činjenica da se u električnom polju stanja sa istom apsolutnom vrednošću magnetnog kvantnog broja  $m_J$  tj.  $m_J$  i  $-m_J$ , ponašaju na identičan način. Ovo se može lako razumeti: efekat električnog polja na elektrone koji rotiraju u pravcu kazaljke časovnika i obrnuto je usrednjeno u vremenu ista. Broj komponenti cepanja je zato manji u Štarkovom efektu nego u Zeemanovom efektu: broj različitih termova nije  $2j+1$  već  $j+1$  za celobrojno  $j$ , i  $j+1/2$  za polucelobrojno  $j$ .

Primer Štarkovog efekta za Na D liniju je prikazan na slici 15.3. Veličina Štarkovog pomeraja je oko  $0.05 \text{ \AA}$  za Na D linije u polju od oko  $10^7 \text{ V/m}$  ( $10^5 \text{ V/cm}$ ). Ono raste sa glavnim kvantnim brojem  $n$ , pošto orbite sa većim glavnim kvantnim brojem imaju veću polarizibilnost. Zato je Štarkov efekat ekstremno važan u proučavanju Rydbergovih atoma (Seksija 8.12).

Štarkov efekat koji je izazvan jakim električnim poljima, koja potiču od hemijskih veza između atoma, je krajnje važan za razumevanje molekularskih spektara. Takođe je važan, za objašnjenje uticaja električnih polja u kristalnim čvrstim telima na dijagrame termova komponentnih atoma, kao i u gasovima velikih gustina. U ovim zadnjim, Štarkov efekat je glavni izvor širenja spektralnih linija.

## 15.2. Kvantna teorija linearnog i kvadratičnog Štarkovog efekta

### 15.2.1. Hamiltonijan

Tretiraćemo kvantno teorijsko objašnjenje Štarkovog efekta u nekim detaljima, i u toku procesa objašnjenja uvešćemo važan metod teorije perturbacije.

Želimo da proučimo kako se talasne funkcije i energetske nivoi elektrona menjaju, kada, dodatno privlačnom nuklearnom potencijalu  $V(r)$ , deluje i konstanto električno polje. Pišemo Hamiltonijan kompletnog problema u obliku

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}^P \quad (15.2)$$

gde je

$$\mathfrak{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(r) \quad (15.3)$$

originalni Hamiltonijan bez primenjenog polja. U (15.2) kao i na dalje indeks  $P$  indicira “perturbaciju” (mali poremećaj- malo remećenje).

Ako je jačina električnog polja  $\mathbf{F}$ , na elektron deluje sila

$$-e\vec{F} \quad (15.4)$$

(U cilju izbegavanja konfuzije izmedju energije  $E$  i jačine električnog polja, ono je označeno sa  $\mathbf{F}$ ). Odgovarajuća potencijalna energija, koja rezultuje iz “force time distance” je onda

$$V^P = e\vec{F} \cdot \vec{r} \quad (15.5)$$

pod uslovom da je  $\mathbf{F}$  homogeno.

Kako je formalizam koji će ovde biti razvijen, primenljiv na perturbacije generalniji nego (15.5), pisaćemo  $\mathfrak{H}^P$  umesto  $V^P$ . U mnogim slučajevima, primenjeno električno polje produkuje samo male promene u talasnim funkcijama i energijama elektrona, tj., deluje kao mala perturbacija. U cilju izražavanja malosti ove perturbacije eksplicitno, pisaćemo  $\mathfrak{H}^P$  u obliku

$$\mathfrak{H}^P = \lambda \mathfrak{H}^1 \quad (15.6)$$

gde je  $\lambda$  mali parametar. Na dalje, takodje pretpostavljamo da je vremenski nezavisna Šredingerova jednačina bez spoljašnje perturbacije već rešena,

$$\mathfrak{H}_0 \Phi_\nu = E_\nu^0 \Phi_\nu \quad (15.7)$$

Indeksi 0 indiciraju da se ove veličine odnose na neperturbovan problem. U prvom momentu pretpostavićemo da su sve energije  $E_\nu^0$  različite međjusobom.

### 15.2.2. Kvadratični Štarkov efekat. Teorija perturbacije bez degeneracije<sup>1</sup>.

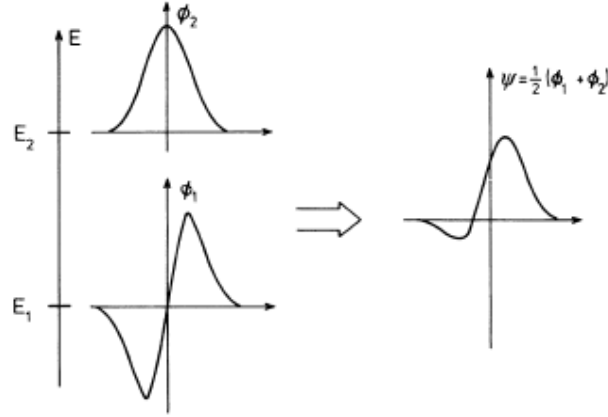
Da bi smo bili u mogućnosti da rešimo Šredingerovu jednačinu koja takodje sadrži i perturbacioni potencijal, naime

$$\mathfrak{H} \psi = E \psi \quad (15.8)$$

predstavićemo traženo rešenje,  $\psi$  kao superpoziciju neperturbovanih rešenja  $\phi_\nu$ . Očekujemo, da električno polje izvrši pomeraj, a možda i promeni talasne funkcije. Ove modifikovane talasne funkcije se mogu konstruisati iz neperturbovanih dodavajući ih talasnim funkcijama koje pripadaju drugim energetskim nivoima (Sl 15.4). Na osnovu ovakvih razmatranja, koja se takodje mogu opravdati i matematički na strožiji način, dolazimo do sledećeg probnog rešenja talasne funkcije koje i tražimo

<sup>1</sup> U ovoj knjizi tretiramo vremenski nezavisnu teoriju perturbacija. Vremenski zavisna teorija perturbacija koja je takodje vrlo značajna, je opisana u detaljima u Vol 2, H. Haken and H.C. Wolf. Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry.

$$\psi(r) = \sum_{v=1}^{\infty} c_v \phi_v(r) \quad (15.9)$$



Slika 15.4 Primer kako superpozicija dve talasne funkcije  $\Phi_1$  i  $\Phi_2$  (levo) može da dovede do nove talasne funkcije sa pomerenim centrom (centar naelektrisanja), (desno).

Ovde je važno zapaziti da talasne funkcije  $\Phi_v$  zavise od koordinate položaja,  $\mathbf{r}$ , ali ne i koeficijenti  $c_v$ . Umetnimo (15.9) u (15.8) i dobija se neposredno

$$\mathfrak{N}_0 \sum_v c_v \phi_v(r) + \mathfrak{N}^P \sum_v c_v \phi_v(r) = E \sum_v c_v \phi_v(r) \quad (15.10)$$

U prvom članu na levoj strani, koristićemo činjenicu da talasne funkcije  $\Phi_v$  poseduju svojstvo (15.7) i tako može se zameniti  $\mathfrak{N}_0 \phi_v$  sa  $E_v^0 \phi_v$ . U cilju oslobadjanja zavisnosti od  $r$  u (15.10), množimo sa leva sa  $\Phi_\mu^*$  i integralimo preko celog prostora. Kao što je pokazano u Apendiksu, talasne funkcije su ortonormalne, tj. zadovoljena je relacija

$$\int \phi_\mu^* \phi_\nu dV = \delta_{\mu\nu} \quad (15.11)$$

Uvodi se sledeća oznaka

$$\mathfrak{N}_{\mu\nu}^P = \int \phi_\mu^* \mathfrak{N}^P \phi_\nu dV \quad (15.12)$$

Kako parametar  $\mathfrak{N}_{\mu\nu}^P$  ima dva donja indeksa,  $\mu$  i  $\nu$  može se urediti u obliku kvadratnog niza. Takav niz se u matematici naziva matrica, te se  $\mathfrak{N}_{\mu\nu}^P$  naziva i matrični elemenat, ili preciznije, matrični elemenat perturbacionog operatora  $\mathfrak{N}^P$ . Pomoću (15.11) i (15.12) dojammo sledeću jednačinu iz (15.10).

$$\left(E_\mu^0 - E\right)c_\mu + \sum_\nu H_{\mu\nu}^P c_\nu = 0 \quad (15.13)$$

koji se naravno može raspisati za sve indekse  $\mu$ . Ova procedura je potpuno generalno ispravna, i nema nikakve pretpostavke o maloj veličini perturbacije. Sada međjutim pretpostavljamo da je perturbacija mala, ali veća od nule. Ako je perturbacija tačno jednaka nuli, traženo rešenje (15.9) mora prirodno biti isto kao i ono polazno rešenje  $\phi_\nu$ . Koeficijenti koji rezultuju za  $\lambda = 0$  su označeni gornjim indeksima 0. Inicijalno stanje se označava donjim indeksom  $\kappa$ . Tako dobijamo relaciju

$$c_\nu^0 = \begin{cases} 1 & \text{za } \nu = \kappa \\ 0 & \text{za } \nu \neq \kappa \end{cases} \quad (15.14)$$

ili u kraćoj formi

$$c_\nu^0 = \delta_{\nu\kappa} \quad (15.15)$$

Ako sada dozvolimo da  $\lambda$  raste, koeficijenti  $c_\nu$  će se svakako menjati. U prvoj aproksimaciji može se očekivati da koeficijenti  $c_\nu$  rastu proporcionalno sa  $\lambda$ . U sledećoj aproksimaciji mora se uzeti u obzir da je promena proporcionalna sa  $\lambda^2$  i tako dalje. Isto važi i za novu vrednost energije. Tako dolazimo do

$$c_\nu = \delta_{\nu\kappa} + \lambda c_\nu^{(1)} + \lambda^2 c_\nu^{(2)} + \dots \quad (15.6)$$

i

$$E = E_\kappa^0 + \lambda \varepsilon^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon^{(2)} + \dots \quad (15.7)$$

Zamenjujući ove izraze u (15.13) dobija se

$$(E_\mu^0 - E_\kappa^0 - \lambda \varepsilon^{(1)} - \lambda^2 \varepsilon^{(2)} - \dots)(\delta_{\mu\kappa} + \lambda c_\mu^{(1)} + \dots) + \sum_\nu \lambda H_{\mu\nu}^1 (\delta_{\nu\kappa} + \lambda c_\nu^{(1)} + \dots) = 0 \quad (15.18)$$

Izrazi (15.16) i (15.17) definišu red veličine, čemu se može čitalac sam ubediti stavljajući  $\lambda=0.1$ . U ovom slučaju  $\lambda^2=0.01$  što je samo 10% od  $\lambda$ . Potrebno je izmnožiti sve izraze u (15.18) i urediti ih prema stepenu od  $\lambda$ . Posle toga nameće se uslov na koeficijente uz pojedine stepene od  $\lambda$ .

Za nulti stepen

$$(E_\mu^0 - E_\kappa^0) \delta_{\mu\kappa} = 0 \quad (15.19)$$

je identički zadovoljeno. Za prvi stepen od  $\lambda$

$$-\varepsilon^{(1)} \delta_{\mu\kappa} + (E_\mu^0 - E_\kappa^0) c_\mu^{(1)} + H_{\mu\kappa}^1 = 0 \quad (15.20)$$

U daljoj diskusiji ove jednačine pravićemo razliku između slučajeva  $\mu = \kappa$  i  $\mu \neq \kappa$ . Za prvi slučaj  $\mu = \kappa$  (15.20) se reducira na

$$\varepsilon^{(1)} = H_{\kappa,\kappa}^1 \equiv \int \phi_\kappa^* \mathcal{H}^1 \phi_\kappa dV \quad (15.21).$$

Za perturbovanu energiju, ovo znači da se u skladu sa (15.17) primenjuje perturbacija prvog reda

$$E = E_k^0 + H_{k,k}^p \quad (15.22)$$

Ako izaberemo  $\mu \neq \kappa$  koeficijenti perturbacije prvog reda se mogu izračunati iz (15.20):

$$c_\mu^{(1)} = \frac{H_{\mu,\kappa}^1}{E_\kappa^0 - E_\mu^0} \quad \mu \neq \kappa \quad (15.23)$$

Medjutim koeficijent  $c_\kappa^{(1)}$  nije bio određen do sada. Kao što se može pokazati iz koeficijenta normalizacije, on mora biti jednak nuli:

$$c_\kappa^{(1)} = 0 \quad (15.24)$$

Ako sada zamenimo koeficijente koji su već izračunati u (15.9) perturbovana talasna funkcija u aproksimaciji prvog reda je

$$\psi(r) = \phi_\kappa(r) + \sum_{\mu \neq \kappa} \frac{H_{\mu,\kappa}^p}{E_\kappa^0 - E_\mu^0} \phi_\mu(r) \quad (15.25)$$

Sada se može uzeti u obzir i član drugo reda, tj.  $\lambda^2$ . Kratko računanje daje

$$\varepsilon^{(2)} = \sum_{v \neq \kappa} \frac{|H_{\kappa,v}^1|^2}{E_\kappa^0 - E_v^0} \quad (15.26)$$

Sa ovim, energija u aproksimaciji perturbacije drugog reda se može izraziti kao

$$E = E_\kappa^0 + H_{\kappa,\kappa}^p + \sum_{v \neq \kappa} \frac{|H_{\kappa,v}^p|^2}{E_\kappa^0 - E_v^0} \quad (15.27)$$

Sada ćemo proučiti značenje formula (15.25) i (15.27) u slučaju kada je primenjeno spoljašnje električno polje  $\vec{F}$ . Može se pokazati (vidi 16.13) u delu o selekcionim pravilima) da na primer za vodonikov atom je  $H_{\kappa,\kappa}^p = 0$  Matrični elementi koji nisu jednaki nuli, prema (15.5) i (15.12) proporcionalni su jačini polja  $F$ . Tako je energija,  $E$ , pomerena od neperturbovane energije  $E_\kappa^0$  za iznos, koji je prema (15.27) proporcionalan sa  $F^2$ . Zbog toga se može govoriti o kvadratičnim Štarkovom efektu.

### 15.2.3. Linearni Štarkov efekat. Teorija perturbacije u prisustvu degeneracije

Pored kvadratičnog Štarkovog efekta opažen je i linearni Štarkov efekat. Postupamo na sledeći način. Na čisto formalni način, možemo videti iz formula (15.23-27) da metod opisan prethodno ne funkcioniše ako se članovi u imeniocu potiru, tj ako je  $E_\kappa^0 - E_v^0$  jednak nuli, a ako brojilac nije jednak nuli. Ovo se može desiti u slučaju degenerisanih stanja, što smo videli u slučaju vodonikovog atoma. Ovde imamo celokupan set različitih talasnih funkcija sa istim glavnim kvantnim brojem,  $n$ , ali sa različitim  $l$  i  $m$ , koje pripadaju datoj energiji. Da bi se tretirao ovaj slučaj u prisustvu perturbacije, moramo se vratiti natrag na teoriju perturbacije u prisustvu degeneracije.

Podsetimo se ukratko šta je učinjeno kao prvi korak u teoriji perturbacije u odsustvu degeneracije. Primenimo uslov (15.14). U slučaju degeneracije, kao što znamo, to nije samo jednostavno degeneracija talasnih funkcija koje mogu biti rešenje Šredingerove jednačine za energiju  $E_{\kappa, \nu}^0$  već je to i za sve linearne kombinacije ovih talasnih funkcija. Tako, ako želimo da ukinemo degeneraciju, perturbovano rešenje može biti transformisano u linearnu kombinaciju neperturbovanih rešenja čiji su koeficijenti poznati. Osnovna ideja teorije perturbacije u prisustvu degeneracije je naći ove koeficijente, u aproksimaciju nultog reda, nekom sistemskom procedurom. Tako pišemo

$$\psi(r) = \sum_{\substack{\nu \text{ samo preko} \\ \text{degenerisanih} \\ \text{stanja}}} c_{\nu}^{(0)} \phi_{\nu}(r) + \text{korekcije} \quad (15.28)$$

gde se sumacija obavlja samo preko degenerisanih stanja. Zanimarimo korekciju. Jednačina (15.28) je formalno ista kao prethodna (15.9) ali se sada ne sumira preko svih stanja. Medjutim koeficijenti  $c_{\nu}^{(0)}$  se mogu formalno odrediti ako se vratimo u sistem jednačina oblika (15.13) i dozvolimo da skup koeficijenata  $c_{\nu}^{(0)}$  bude zamenjen koeficijentima  $c_{\nu}$ . Ako imamo N degenerisanih stanja, imamo N jednačina sa N nepoznatih koeficijenata. Da bi homogeni sistem jednačina bio rešiv, determinanta koeficijenata treba da je jednaka nuli.

$$\begin{vmatrix} (E_k^0 - E + H_{1,1}^P) & H_{1,2}^P & \dots & H_{1,N}^P \\ H_{2,1}^P & (E_k^0 - E + H_{2,2}^P) & \dots & H_{2,N}^P \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{N,1}^P & \dots & \dots & (E_k^0 - E + H_{N,N}^P) \end{vmatrix} = 0 \quad (15.29)$$

Ova determinanta se takodje naziva *sekularna* determinanta. Ako se reši, ona daje polinom N tog stepena po energiji E. Kada se ovo izjednači sa nulom to postaje algebarska jednačina koja ima N korena, od kojih neki mogu biti međjusobno jednaki.

Kao konkretan primer, tretirajmo prvo pobudjeno stanje atoma vodonika sa glavnim kvantnim brojem  $n=2$ . Talasne funkcije atoma vodonika su određene kvantnim brojevima  $n$ ,  $l$  i  $m$ . Da bi se povezali sa razmatranim sistemom pišemo

$$\Phi_{\underbrace{n,l,m}_{\nu}}, \quad n = 2 \quad (15.30)$$

pri čemu koristimo tabelu

$$\nu = \begin{cases} 1 & \text{za } l = 0, \quad m = 0 \\ 2 & \text{za } l = 1, \quad m = 0 \\ 3 & \text{za } l = 1, \quad m = 1 \\ 4 & \text{za } l = 1, \quad m = -1 \end{cases} \quad (15.31)$$

Probno rešenje (15.28) postaje

$$\psi(r) = c_1^{(0)} \phi_1(r) + c_2^{(0)} \phi_2(r) + c_3^{(0)} \phi_3(r) + c_4^{(0)} \phi_4(r) \quad (15.32)$$

gde su,  $\Phi_i$ , ponovimo još jednom, talasne funkcije vodonikovog atoma u  $n=2$  stanju, koja su sva degenerisana. Matrični elementi (15.12) su obliku

$$H_{\mu\nu}^P = \int \phi_{n,l,m}^*(r) eFz \phi_{n,l',m'}(r) dV, \quad (15.33)$$

pretpostavlja se da se polje primenjuje u z pravcu. Koristeći selekciona pravila, može se pokazati, kao i u Sekciji 16.1, da su svi matrični elementi jednaki nuli osim, za

$$H_{1,2}^P = H_{2,1}^P \quad (15.34)$$

Ovo se može zapisati u obliku

$$H_{1,2}^P = H_{2,1}^P = eFd \quad (15.35)$$

jer su talasne funkcije realne. U tretiranom slučaju, kada je  $N=4$  i kada svi matrični elementi nestaju, osim (15.35), onda se (15.13) svodi na

$$(E_2^0 - E)c_1 + eFdc_2 = 0 \quad (15.36)$$

$$eFdc_1 + (E_2^0 - E)c_2 = 0 \quad (15.37)$$

$$(E_2^0 - E)c_3 = 0 \quad (15.38)$$

$$(E_2^0 - E)c_4 = 0 \quad (15.39)$$

Očigledno je da se prethodni sistem jednačina cepa u dva grupe od po dve jednačine: (15.36) i (15.37) je jedna grupa i (15.38) i (15.39) je druga grupa. Determinanta (15.36) i (15.37) je

$$\begin{vmatrix} E_2^0 - E & eFd \\ eFd & E_2^0 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (15.40)$$

Ovo postaje jednako nuli kada E uzme vrednosti

$$E_{\pm} = E_2^0 \pm eFd \quad (15.41)$$

Može se pokazati da je pozitivni znak pridružen  $c_1 = c_2$  a da je negativni znak sa  $c_1 = -c_2$ . Energija E se povećava ili smanjuje u odnosu na energiju neperturbovanog stanja za iznos koji je proporcionalan jačini električnog polja F. Jednačine (15.38) ili (15.39) pak zahtevaju da je energija perturbovanog sistema ista kao i energija neperturbovanog. Talasne funkcije  $\Phi_3(r)$  i  $\Phi_4(r)$  su u svakom slučaju "prava linearna kombinacija".

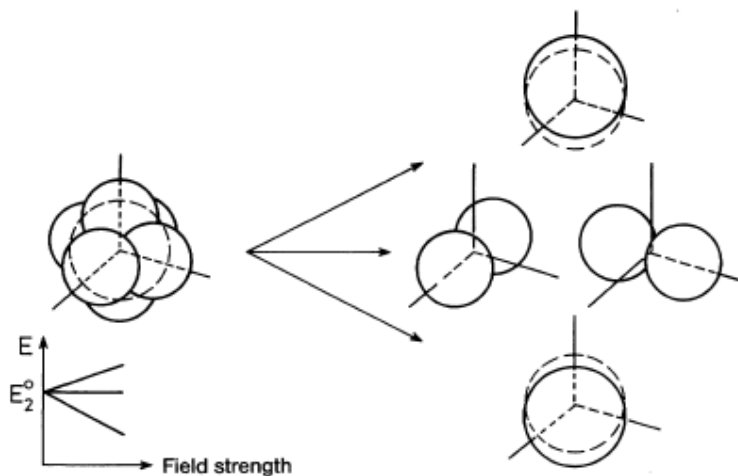
Tako dobijamo celokupnu šemu cepanja energija kao što je pokazano na slici 15.5. Na istoj slici pokazane su i talasne funkcije u prisustvu polja.

Linearni Štarkov efekat, diskutovan ovde je specijalni slučaj koji se opaža samo kod vodonikovog atoma. Razlog za ovo je lako razumeti: matrični element (15.33) se razlikuje od nule samo kada je  $l \neq l'$ . Za razliku od vodonika, degeneracija po l se ukida u drugim atomima, tj,

$$E_{n,l,m}^0 \neq E_{n,l',m'}^0$$

kao što je pokazano u Glavi 11.





Slika 15.5. Linearni Štarkov efekat. Dole levo: porastom jačine polja  $F$ , energetski nivo  $E_2^0$  s cepa u tri podnivoa. Gore levo: predstava četiri degenerisane talasne funkcije u jednoj slici. Tačkasta linija je s funkcija, neprekidna linije je p funkcija  
Desno gore: Superpozicija s funkcije  $i$  p uz pravcu izaziva pomeraj centra naelektrisanja elektrona. Srednje desno: Dumbells u  $x$  i  $y$  pravcu ne osećaju uticaj. Dole desno. Superpozicija s funkcije  $I$  p dumbell a (sa amplitudom u suprotnim pravcima u poredjenju sa prethodnim slučajem) dovodi do pomeraja centra naelektrisanja u negativnom  $z$  pravcu.

### 15.3. Interakcija Two Level atoma sa koherentnim poljem zračenja.

U prethodnim poglavljima o interakciji spina sa promenljivim magnetskim poljem, objasnili smo interesantan fenomen preokretanja spina, koji je našao mnogobrojne primene u fizici i hemiji. U ovom poglavlju, pokazaćemo da two level atom interaguje sa koherentnim poljem zračenja na sličan način koji je tačno analogan preokretanju spina. Iako je spin, sistem sa tačno dva nivo (stanja), ova pretpostavka je samo približna za atom. Prosto pretpostavljamo da polje zračenja indukuje prelaze izmedju dva susedna nivoa, i da su svi ostali nivoi atoma energetski tako daleko od ova dva koja se razmatraju da se može zanemariti efekat tih ostalih stanja. Ovo je shvatljivo u svetlosti teorije perturbacija u odsustvu degeneracije koja je tretirana ranije, jer kombinacije talasnih funkcija koje su pridružene dalekim nivoima sa talasnim funkcijam koje pripadaju dvama bliskim nivoima će imati veliku razliku energije u u imeniocu i tako će njihov doprinos biti veoma mali (15.25).

U kvantno mehaničkom tretmanu, počecemo sa Šredingerovom jednačinom za elektron koji se kreće u polju potencijala  $V$  jezgra i u dodatnom potencijalu polja zračenja  $V_a$ . Ova jednačina ima oblik

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V + V_a \right) \psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} \quad (15.42)$$

Da bi našli eksplicitni oblik potencijala  $V_a$ , uzmimo da je polje zračenja u obliku ravanskog talasa

$$\vec{F} = \vec{F}_0 \cos(kx - \omega t) \quad (15.43)$$

U cilju izbegavanja konfuzije izmedju energije i jačine električnog polja, ovo zadnje ćemo označavati sa  $F$ . Pretpostavićemo, štaviše, da je atom lokalizovan u  $r=0$ . Pošto je talasna dužina svetlosti  $\lambda = 2\pi/k$ , generalno mnogo veća nego oblast prostiranja talasne funkcije atoma, možemo, sa vrlo dobro aproksimacijom uzeti  $x=0$  u (15.43) Tako, praktično imamo homogeno polje zračenja u oblasti atoma,

$$\vec{F} = \vec{F}_0 \cos(\omega t) \quad (15.44)$$

Takodje pretpostavljamo da je polje zračenja polarizovano u  $z$  pravcu

$$\vec{F}_0 = (0,0,F_0) \quad (15.45)$$

Sila kojom polje  $\mathbf{F}$  deluje na elektron je  $-\mathbf{eF}$ . Rezultujuća potencijalna energija je

$$V_a = eF_0 z \cos \omega t \quad (15.46)$$

Ovaj izraz za  $V_0$  će se koristiti u (15.42). Pretpostavimo da je Šredingerova jednačina rešena za slučaj odsustva spoljašnjeg polja:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V \right) \phi_j = E_j \phi_j \quad j=1,2,\dots \quad (15.47)$$

tj. pretpostavimo da su energije i talasne funkcije poznate, bar za indekse  $j=1,2$ .

Kako očekujemo prelaze samo između nivoa 1 i nivoa 2, možemo pisati talasne funkcije (15.42) u obliku superpozicije neperturbovanih talasnih funkcija (15.47)

$$\psi(r,t) = c_1(t)\phi_1(r) + c_2(t)\phi_2(r), \quad (15.48)$$

Da bi smo odredili, još uvek nepoznate, koeficijente  $c_1$  i  $c_2$  zamenimo (15.48) u (15.42), pomnožimo sa leva sa  $\phi_1^*$  ili  $\phi_2^*$ , tačno kao i u Sekciji 15.2, i integralimo preko celog prostora. Uvedemo skraćenice

$$H_{ij}^P = \int \phi_i^*(r) eF_0 z \phi_j(r) dV \cos \omega t \quad (15.49)$$

i dobijamo jednačine

$$\dot{c}_1 = \frac{1}{i\hbar} [(E_1 + H_{11}^P)c_1 + H_{12}^P c_2] \quad (15.50)$$

i

$$\dot{c}_2 = \frac{1}{i\hbar} [(E_2 + H_{22}^P)c_2 + H_{21}^P c_1] \quad (15.51)$$

analogno sa Sekcijom 15.2.

U mnogim slučajevima, možemo pretpostaviti da  $H_{11}^P$  i  $H_{22}^P$  nestaju (uporedi sa Glavom 16 o simetrijama i selekcionim pravilima). Za rešavanje (15.50 i 51) probaćemo probnu funkciju

$$c_j = d_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \quad (15.52)$$

Uz ovu jednačinu (15.50) i (15.51) se svode na

$$\dot{d}_1 = \frac{1}{i\hbar} [H_{12}^P c_2 d_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar}] \quad (15.53)$$

i

$$\dot{d}_2 = \frac{1}{i\hbar} [H_{21}^P c_2 d_1 e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}] \quad (15.54)$$

U medjuvremenu, pretpostavimo, u skladu sa (15.43) da je polje zračenja monohromatsko. Sada uvodimo dalju pretpostavku da je polje zračenja u rezonanci sa elektronskim prelazom. Ovo znači da je ispravna sledeća jednačina

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega \quad (15.55)$$

Ako sada izvučemo faktor

$$\cos\omega t = \frac{1}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (15.56)$$

iz (15.49) i pomnožimo eksponencijalnom funkcijom u (15.53) dobijamo celokupan faktor

$$\frac{1}{2}(1 + e^{-2i\omega t}). \quad (15.57)$$

Kao što ćemo videti na dalje,  $d_1$  i  $d_2$  se menjaju vrlo sporo sa vremenom u poredjenju sa frekvencijom  $\omega$ , sve dok jačina polja nije previše velika. Ovo nam omogućuje da usrednjimo (15.53) i (15.54) u vremenu koje je dugo u poredjenju sa  $1/\omega$ , ali je još uvek kratko u poredjenju sa vremenskom konstantnom koja određuje promenu  $d_j$  (vidi 15.61).

Rezultat ovog usrednjavanja je da je doprinos brzo promenljivog člana  $e^{-2i\omega t}$  mnogo manji od 1, i da se može zanemariti u poredjenju sa 1. Ovo se u literaturi naziva “rotating wave approximation” tj. aproksimacija rotirajućeg talasa. Izraz dolazi iz oblasti spin rezonance. U sekciji 14.4 term  $e^{-2i\omega t}$  se nije pojavljivao jer je primenjeno rotaciono magnetsko polje. U 15.54 javlja se term  $e^{2i\omega t}$  koji odgovara (15.57) i u ovom slučaju je takodje zanemarljivo mali. Ako pokratimo integral u (15.49) zamenjujući matrični element dipolnog momenta  $(\theta_z)_{ij} = \int \phi_i^*(r) e z \phi_j(r) dV$ , (15.53) i (15.54) se svode na

$$\dot{d}_1 = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2} F_0(\theta_z)_{12} d_2 \quad (15.58)$$

i

$$\dot{d}_2 = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2} F_0(\theta_z)_{21} d_1 \quad (15.59)$$

Ove jednačine su upadljivo slične sa jednačinama spina (14.94) i (14.95) koje smo sreli u Sekciji 14.4. Može se pokazati da se  $(\theta_z)_{12} = (\theta_z)_{21}^*$  može izabrati da bude realno. Uvodeći sledeće smenu

$$\Omega = \frac{1}{2\hbar} F_0(\theta_z)_{12} \quad (15.60)$$

gde se  $\Omega$  može shvatiti kao frekvencija, onda se kao rešenje (15.58,59) dobija

$$d_1 = \cos\Omega t \quad (15.61)$$

$$d_2 = -i \sin \Omega t \quad (15.62)$$

Ovo je zasnovano na pretpostavci da je u  $t=0$  elektron za sigurno u nižem nivou. Tako je Šredingerova jednačina (15.42) za sistem sa dva nivoa koji interaguje sa spoljašnjim monohromatičnim poljem zračenja, konačno rešena. Koeficijenti  $c_1$  i  $c_2$  u (15.48) su sada u očigledno u obliku

$$c_1 = e^{-(i/\hbar)E_1 t} \cos \Omega t, \quad (15.63)$$

$$c_2 = -i e^{-(i/\hbar)E_2 t} \sin \Omega t \quad (15.64)$$

Kao što znamo, kvadrat apsolutne vrednosti  $c_j$  daje verovatnoću nalaženja sistema u stanju  $j$ .  $|c_j|^2$  se može shvatiti kao broj zauzeća stanja  $j$ ,  $N_j$ . Kao što je indicirano odgovarajućim formulama

$$N_1 \equiv |c_1|^2 = \cos^2 \Omega t \quad (15.65)$$

$$N_2 \equiv |c_2|^2 = \sin^2 \Omega t \quad (15.66)$$

elektron oscilira frekvencijom  $\Omega$  između stanja 1 i 2. Instrukтивно je izračunati matrične elemente dipola prema

$$\theta_z = \int \psi^* e z \psi dV = (\theta_z)_{12} c_1^* c_2 + (\theta_z)_{21} c_2^* c_1. \quad (15.67)$$

Konačni rezultat celog procesa je

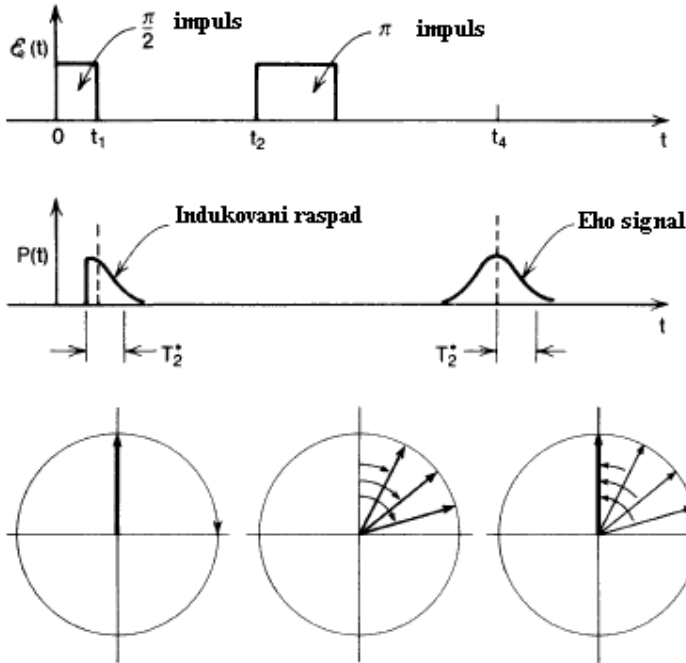
$$\theta_z = -(\theta_z)_{12} \sin(2\Omega t) \sin \omega t \quad (15.68)$$

Ovo znači da se dipolni momenat premešta napred nazad sa brzo oscilirajućom komponentom  $\sin \omega t$ , a da se njegova amplituda takodje modulira sa  $\sin 2\Omega t$ . Dipolni momenat je tako najveći kada elektron ima broj zauzeća  $N_1=N_2=1/2$ , tj. kada je verovatnoća zauzeća bilo kog nivoa jednaka. Rezultat (15.68) i formula (15.65) i (15.66) su vrlo blisko analogne rezultatima odbijen u spin rezonanci u sekciji 14.4. Istražićemo ovu analogiju detaljnije u sledećoj glavi. Ovo omogućuje proširenje niza spin eksperimenata na optičke prelaze između elektronskih stanja u atomima. Takvi eksperimenti zahtevaju koherentnu svetlost sa velikim jačinama polja. Ovo je potrebno da bi se prelaz dogodio u vremenu  $t_0 \propto 1/\Omega \propto 1/F_0$  (uporedi sa 15.60!) što je tako kratko da elektronsko kretanje nije značajno perturbovano od drugih efekata, tj. sudara između atoma u gasovima ili spontanom emisijom svetlosti od ekscitovanih stanja. Tipična vrednost za  $t_0$  leži između  $10^{-9}$  i  $10^{-11}$  s.

### 15.4 Spinski i fotonski eho-i

U ovoj sekciji tretiraćemo dva specijalno interesantna fenomena, spinski eho, i fotonski eho. Ako uporedimo rezultate sekcije 14.4 sa predviđanjima ove sekcije, videćemo vrlo blisku analogiju između ponašanja spina pod istovremenim uticajem konstantnog magnetskog polja i transverzalno oscilujućeg magnetnog polja i elektrona u atomu sa dva nivoa, koji je takodje pod uticajem oscilujućeg električnog polja. U oba slučaja, pretpostavljamo da je frekvencija primenjenog polja u rezonanci sa prelaznom frekvencijom spina ili sa elektronskim prelazom sa nižeg na više stanje. Prvo ćemo diskutovati ponašanje spina.

Kao što smo videli u sekciji 14.4 primena koherentog polja izaziva preokretanje spina. Da li će se spin elektrona zaista preokrenuti ili samo zaoscilovati, zavisi od vremena trajanja primene spoljašnjeg polja. Ako se dozvoli da polje deluje dovoljno dugo da se spin preokrene za  $\pi/2$  govori se o  $\pi/2$  ili  $90^\circ$  impulsu. Ako se polje ostavi dvostruko duže, spin će se preokrenuti kompletno. U ovom slučaju govori se o  $\pi$  ili  $180^\circ$  impulsu. Takozvani spinski eho, je primena ovih ideja. Neka prvo primenimo  $\pi/2$  impuls (slika 15.6). U mnogim praktičnim slušajevima, spin neće precesovati sa istom brzinom zbog prostorno promenljivog statičkog magnetskog polja. Zbog toga se oni šire u toku vremena (vidi sliku 15.7).

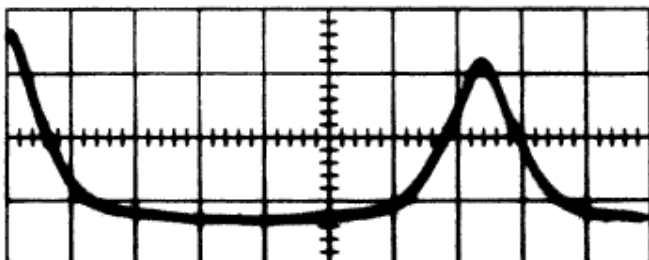


Slika 15.6. Spin eho (foton eho) eksperiment. Gore, primenjeni impulsi jačine električnog polja (fotonski eho) ili magnetskog polja (spinski eho) kao funkcija vremena. Dole: veličina dipolnog momenta (spin) atoma kao funkcija vremena.

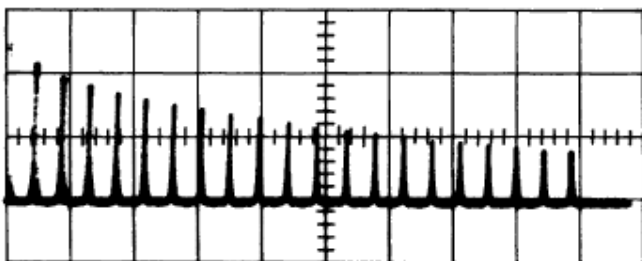
Slika 15.7. Širenje i zajedničko kretanje spinova. Levo: Polazni uslov, svi spinovi su paralelni. Srednje: širenje spinova. Desno: Vraćanje natrag posle impulsa od  $180^\circ$

Označavajući širinu intervala frekvencije precesije sa  $\Delta\omega^*$  možemo definisati srednje vreme  $T_2^*$  u kojem se spinovi šire,  $\Delta\omega = 2\pi/T_2^*$ .  $\Delta\omega^*$  se naziva “nehomogena širina”. Spin koji precesira može da emituje elektromagnetsko zračenje. Pošto su spinovi van faza jedan u odnosu na drugi, isti je slučaj i sa emitovanim elektromagnetskim zračenjem, što dovodi do smanjenja ukupnog intenziteta. Ako sada primenimo drugi impuls, ali ovaj put impuls od  $180^\circ$  (Slika 15.6), spinovi će se preokrenuti. Šta će se desiti najbolje se može razumeti poredjenjem sa trkačima na stazi. Na početku trke, svi takmičari su u istom položaju, na startnoj liniji. Posle startnog signala, pucanj iz pištolja ( $90^\circ$  impuls), oni prelaze različita rastojanja jer svi imaju različite brzine. Efekat impulsa od  $180^\circ$  je isti kao i drugi startni signal (drugi pucanj pištolja) posle koga se takmičari zaustavljaju, okreću i trče natrag ka startnoj liniji u toku intervala vremena jednakom između prva dva pucnja. Očigledno je da će svi dostići startnu liniju u istom trenutku jer svaki od trkača trči istom brzinom napred kao i nazad. Za spin ovo znači da će posle nekog vremena nakon impulsa od  $180^\circ$  svi ponovo biti u istoj fazi, i njihova zračenja će takodje biti u istoj fazi. Kao rezultat, ponovo se dostiže originalni intenzitet zračenja. Ova slika se može u izvesnoj meri modifikovati, jer, takodje postoji nepovratna promena faze spina, koja se karakteriše tzv. homogenom širinom linije što će biti diskutovano u Sekciji 16.2. Zbog ovoga, originalni početni intenzitet se ne može u potpunosti postići (vidi sl 15.8). Ako se ponovi impuls od  $180^\circ$  rezultat je onaj koji je prikazan na slici 15.9. Vreme  $T_2$  koje smo sreli ranije u sekciji 14.5 u Bloch ovoj jednačini se može izračunati iz raspada

pika. Homogena širina linije se onda može odrediti iz  $T_2$ :  $\Delta\omega=2\pi/T_2$ . Analogija između spina i atoma sa dva nivoa sada čini mogućim da se primeni celokupni proces spinskog ehoa na polje zračenja u slučaju fotonskog ehoa. Ostavljamo to čitaocu da ovu analogiju razvije na osnovu prethodnog.



Slika 15.8. Raspad spinske emisije i eho emisije protona u vodi. Iz A. Abragam: *The principles of Nuclear Magnetism* (Oxford 1962)



Slika 15.9. Serija spinskih ehoa dobijana iz protona u običnoj vodi. Ovom metodom,  $90^\circ$  impuls se primenjuje u  $t=0$ , i praćen je impulsima od  $180^\circ$  u vremenima  $\tau, 3\tau, 5\tau, \dots, (2n-1)\tau$ . Eho-i se opažaju u vremenu  $2\tau, 4\tau, \dots, 2n\tau$  ( $n$  ceo broj). Može se pokazati da visina pika opada prema formuli  $f(n)=e^{-2n\tau/T}$ . A. Abragam: *The principles of Nuclear Magnetism* (Oxford 1962)

Na kraju razmotrimo atomski sistem sa dva nivoa. Kao primer razmotrimo rubin, u kome su joni hroma uključeni kao nečistoća u osnovnoj rešetki aluminijum oksida. Do izvesne aproksimacije, ovi joni se mogu tretirati kao atomski sistem sa dva nivoa. Kao što smo videli u sekciji 15.4, broj zauzeća gornjeg stanja raste usled primene rezonantnog oscilujućeg električnog polja (15.66). Elektron atoma nečistoće se tako može naći sve češće u gornjem stanju, pri čemu zauzeće donjeg stanja opada. Moguće je postići stanje u kome su stanja podjednako zauzeta. Pošto je ovo tačna analogija sa stanjem u kome se spin zaokrene za  $90^\circ$ , ili drugim rečima broj stanja sa spin gore ili spin dole su jednaki, može se govoriti o  $\pi/2$  ili  $90^\circ$  impulsu. Ako se primeni spoljašnje električno polje na elektron dvostruko duže, on odlazi kompletno u gornje stanje, ponovo u analogiji sa spinom, koji se u ovom slučaju rotira za  $180^\circ$ , ili  $\pi$  impuls. Kako (15.66) i (15.60) pokazuju, preokretanje se odigrava brže kada je primenjeno polje jačine  $F_0$  ili više.

Zamislamo sada da je elektron ekscitovan  $\pi/2$  impulsom. Može se pokazati da dipolni momenat elektrona onda osciluje slobodno sa frekvencijom optičkog prelaza  $\omega$ . Ovo se može pokazati računanjem očekivane vrednosti dipola što je analogno (15.67) i (15.68), iako nema spoljašnjeg polja. Prema Maxwell ovoj teoriji, međutim, oscilujući dipol može emitovati elektromagnetske talasu, u ovom slučaju svetlosne talase. Ovo znači da skup atoma nečistoće emituje svetlost posle  $\pi/2$  impulsa. Medjuti, pošto su atomi pod uticajem različitih polja u kristalu, njihove frekvencije prelaza nisu iste i neki od oscilujućih dipola emituju svetlost koja je van faze. Tako je emitovani intenzitet redukovan.

Sada, kao i u slučaju spina, možemo primeniti  $\pi$  impuls koji vraća nazad skrenute faze oscilujućih dipola. Ovo predviđanje je opravdano zbog potpune matematičke korespondencije između ponašanja spina i atoma sa dva nivoa. Kada se oscilujući dipoli vrte natrag u fazu, oni emituju svetlosne impulse koji se mogu videti kao “eho” prethodno primenjenog  $\pi$  impulsa. U optičkoj oblasti faze dipola divergiraju vrlo brzo, tako je nužno u ovim eksperimentima koristiti vrlo kratke impulse oko  $10^{-10}$  s ili manje.

## 15.5. Pogled na kvantnu elektrodinamiku

### 15.5.1. Kvantizacija polja

U ovoj sekciji ocrtaćemo nerelativističku teoriju Lamb-ovog pomeraja. Prvo ćemo preko primera pokazati kako se polje svetlosti može kvantizirati. Počecemo sa Maxwell ovim jednačinama u vakuumu koje glase:

$$\text{curl } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (15.69)$$

$$\text{curl } \vec{B} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (15.70)$$

$$\text{div } \vec{E} = 0 \quad (15.71)$$

$$\text{div } \vec{B} = 0 \quad (15.72)$$

gde je

$$\varepsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2} \quad (15.73)$$

i  $c$  je brzina svetlosti u vakuumu. Razmotrimo sada stojeći električni talas sa talasnim vektorom  $k$  i sa električnim vektorom u  $z$  pravcu

$$\vec{E} = (0, 0, E_z), \quad E_z = p(t)N \sin(kx) \quad (15.74)$$

gde je  $p(t)$  još uvek nepoznata funkcija vremena. Da bi smo izveli odgovarajuću magnetsku indukciju zamenimo (15.74) u (15.69). Lako se može pokazati da se jedino  $y$  komponenta ove jednačine ne anulira

$$-\frac{\partial E_z}{\partial x} = -\frac{\partial B_y}{\partial t} \quad (15.75)$$

Pošto je leva strana ove jednačine proporcionalna sa  $\cos(kx)$  to sugerise da je  $B_y$  proporcionalno sa  $\cos(kx)$ . Ovo nas dovodi do

$$B_y = q(t) \frac{N \cos(kx)}{c} \quad (15.76)$$

gde smo uključili faktor  $1/c$  radi pogodnosti. Ovaj faktor daje veličinama  $p$  i  $q$  iste fizičke dimenzije. Umetajući (15.76) u (15.75) dobija se

$$\frac{dq}{dt} = \omega p \quad (15.77)$$

gde koristimo skraćenicu

$$\omega = ck \quad (15.78)$$

Kako je  $k$  talasni broj i  $c$  je brzina,  $\omega$  u (15.78) je kružna frekvencija. Zamenjujući  $E$  (15.74) i  $B$  (15.76) u (15.70) dobija se

$$\frac{dp}{dt} = -\omega q \quad (15.79)$$

Diferenciramo (15.77) po vremenu i eliminišemo  $p$  preko (15.79) dobijamo

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \omega^2 q = 0 \quad (15.80)$$

Ovo je dobro poznata jednačna harmonijskog oscilatora sa kružnom frekvencijom  $\omega$ . Jednačine (15.77) i (15.79) se mogu napisati u elegantnoj formi uvodeći hamiltonijan

$$\mathfrak{H} = \frac{1}{2} \omega(p^2 + q^2) \quad (15.81)$$

Onda se (15.77) i (15.79) mogu zapisati u obliku

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial p} \quad (15.82)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial q} \quad (15.83)$$

Jasno je da se radi sa Hamiltonovim jednačinama harmonijskog oscilatora. Ovo nam dozvoljava da identifikujemo  $p$  sa impulsom, i  $q$  sa koordinatama harmonijskog oscilatora. Uz ovu identifikaciju imamo ključ za kvantizaciju elektromagnetskog polja. Ovo se obavlja na čisto formalnoj analogiji. U sekciji 9.4 videli smo kako se kvantizira kretanje harmonijskog oscilatora. Ovde želimo da obavimo tačno istu stvar. Da bi smo analogiju između harmonijskog oscilatora i elektromagnetskog polja postavili na čvrstoj osnovi pokazaćemo da je  $\mathfrak{H}$  (15.81) identičan sa energijom elektromagnetskog polja. Prema elektrodinamici, energija u zapremini  $V \equiv L^3$  je data sa

$$\bar{U} = \int \frac{1}{2} (\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2) d^3x \quad (15.84)$$

Zamenjujući (15.74) i (15.76) u izraz za energiju (15.84) dobijamo



$$\bar{U} = \frac{1}{2} N^2 \varepsilon_0 L^2 \int_0^L [p^2 \sin^2(kx) + q^2 \cos^2(kx)] dx \quad (15.85)$$

Pod pretpostavkom periodičnih graničnih uslova, integracija po x se može lako obaviti i ovde je ispuštena.

$$\bar{U} = \frac{1}{4} V N^2 \varepsilon_0 (p^2 + q^2) \quad (15.86)$$

Našli smo istu funkciju od p i q kao i u (15.81). Ova identifikacija nam omogućuje nalaženje, još uvek nepoznatog faktora normalizacije, N. Poredeći (15.86) sa (15.81) dobijamo

$$N = \sqrt{\frac{\omega}{\varepsilon_0}} \sqrt{\frac{2}{V}} \quad (15.87)$$

Vratimo se sada na problem kvantizacije. Želimo da koristimo analogiju izmedju Hamiltonijana (15.81) i harmonijskog oscilatora. Pogodno je koristiti Hamiltonijan u obliku

$$\frac{1}{2} \hbar \omega (\Pi^2 + \xi^2). \quad (15.88)$$

Ekvivalencija izmedju (15.81) i (15.88) se postiže uzimajući

$$p = \Pi \sqrt{\hbar}, \quad q = \xi \sqrt{\hbar} \quad (15.89)$$

tako da Hamiltonijan (15.81) dobija istu formu (15.88). Ovde, medjutim, znamo kako izgleda kvantna verzija. Treba da zamenimo  $\Pi$  operatorom  $\partial/\partial\xi$  po analogiji sa Sekcijom 9.4. Koristeći tu analogiju dalje uvodimo operatore kreacije i anihilacije

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\frac{\partial}{\partial\xi} + \xi \right) = b^+ \quad (15.90)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial}{\partial\xi} + \xi \right) = b \quad (15.91)$$

ili rešavajući po p i q

$$p = i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (b^+ - b) \quad (15.92)$$

$$q = i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (b^+ + b) \quad (15.93)$$

Operatori kreacije i anihilacije zadovoljavaju komutacionu relaciju

$$bb^+ - b^+b = 1 \quad (15.94)$$

Koristeći (15.92) i (15.93) možemo izraziti polja  $\mathbf{E}$  i  $\mathbf{B}$  preko ovih operatora u obliku

$$E_z = i(b^+ - b)\sqrt{\frac{\hbar}{2}}N \sin(kx) \quad (15.95)$$

$$E_y = (b^+ + b)\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\frac{N}{c} \cos(kx) \quad (15.96)$$

Faktor normalizacije je dat sa

$$N = \sqrt{\frac{\omega}{\varepsilon_0}}\sqrt{\frac{2}{V}}, \quad \varepsilon_0\mu_0 = \frac{1}{c^2} \quad (15.97)$$

Uz transformacije (15.90) i (15.91) Hamiltonijan (15.88) se može izraziti preko operatora kreacije i anihilacije isto kao i Sekciji 9.4.

$$\mathfrak{H} = \hbar\omega(b^+b + \frac{1}{2}). \quad (15.98)$$

Ostavljamo čitaocu da dokaže da se ovaj Hamiltonijan može takodje izvesti zamenjujući (15.95) u (15.84). U brojnim problemima u kojima se radi sa interakcijom između elektrona i elektromagnetskog polja potreban je vektorski potencijal  $\mathbf{A}$ .  $\mathbf{A}$  je u vezi sa magnetnom indukcijom preko

$$\vec{B} = \text{curl}\vec{A} \quad (15.99)$$

U ovoj knjizi biramo “Kulonov gauge”

$$\text{div}\vec{A} = 0. \quad (15.100)$$

Za  $\mathbf{B}$  u obliku (15.96) relacije (15.99, 100) su ispunjene sa

$$A_x = 0, A_y = 0, A_z = -(b^+ + b)\sqrt{\frac{\hbar\omega\mu_0}{2}}\sqrt{\frac{2}{V}}\frac{1}{k} \sin(kx) \quad (15.101)$$

Sumirajmo prethodne rezultate. Kada kvantiziramo elektromagnetno polje, jačina električnog polja, magnetna indukcija i vektorski potencijal postaju operatori koji se mogu izraziti poznatim operatorima kreacije i anihilacije  $b^+$  i  $b$  harmonijskog oscilatora. Ukupna energija polja takodje postaje Hamiltonov operator u obliku (15.98).

Kako normalizacija talasa u beskonačnom prostoru pokazuje neke formalne teškoće (koje se mogu medjutim prevazići), iskoristićemo jedan dobro poznati trik. Izložimo talasnu funkciju

$$e^{i(\vec{k}_\lambda \cdot \vec{r})} \quad (15.102)$$

periodičnim graničnim uslovima. Da bi se gornji formalizam primenio na Lambov pomeraj, potrebne su dve izmene.

- 1) Umesto korišćenja jednog (stojećeg) talasa, elektromagnetsko polje se mora pisati kao superpozicija svih mogućih talasa.
- 2) Umesto stojećeg talasa korišćenje običnog progresujućeg talasa ima nekih prednosti.

Kako izvodjenje odgovarajućih relacija ne daje nikakav fizički uvid dalje od onog što je već dato ranije, ove relacije dajemo odmah.

$$\vec{E}(r) = \sum_{\lambda} \vec{e}_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\lambda}}{2 \epsilon_0 V}} \left[ i b_{\lambda} e^{i \vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r}} - i b_{\lambda}^{+} e^{-i \vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r}} \right] \quad (15.103)$$

$$\vec{B}(r) = \sum_{\lambda} \hat{k}_{\lambda} x \vec{e}_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\lambda} \mu_0}{2 V}} \left[ i b_{\lambda} e^{i \vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r}} - i b_{\lambda}^{+} e^{-i \vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r}} \right] \quad (15.104)$$

Pojedini delovi imaju sledeća značenja:

$\lambda$  indeks pojedinačnih talasa

$\mathbf{e}_{\lambda}$  vektorpolarizacije talasa

$\omega_{\lambda}$  kružna frekvencija

$\mathbf{k}_{\lambda}$  talasni vektor talasa.

$$\hat{k} = \vec{k} / |\vec{k}| \quad (15.105)$$

Vektor potencijala  $\vec{A}$  je

$$\vec{A} = \sum_{\lambda} \vec{e}_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \omega_{\lambda} \epsilon_0 V}} \left[ b_{\lambda} e^{i \vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r}} + b_{\lambda}^{+} e^{-i \vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r}} \right] \quad (15.106)$$

Operatori  $b_{\lambda}^{+}$  i  $b_{\lambda}$  zadovoljavaju komutacione relacije

$$b_{\lambda} b_{\lambda'}^{+} - b_{\lambda'}^{+} b_{\lambda} = \delta_{\lambda \lambda'} \quad (15.107)$$

$$b_{\lambda} b_{\lambda'} - b_{\lambda'} b_{\lambda} = 0 \quad (15.108)$$

$$b_{\lambda}^{+} b_{\lambda'}^{+} - b_{\lambda'}^{+} b_{\lambda}^{+} = 0 \quad (15.109)$$

Hamiltonov operator je

$$\mathfrak{H}_{polja} = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left( b_{\lambda}^{+} b_{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (15.110)$$

Kao i obično, Šredingerova jednačina se dobija primenom Hamiltonovog operatora na talasnu funkciju, koju ovom prilikom obeležavamo sa  $\Phi$ .

$$\mathfrak{H}_{polja} \Phi = E \Phi \quad (15.111)$$

Odredićemo talasne funkcije i energije u vežbama. Za ono što sledi potrebno nam je jedino osnovno stanje, definisano sa  $b_{\lambda} \Phi_0 = 0$ , za sve  $\lambda$  i stanja koja su zauzeta jednim kvantom svetlosti (fotonom).

$$\Phi_{\lambda} = b_{\lambda}^{+} \Phi_0 \quad (15.112)$$

sa kvantom energije

$$E_\lambda = \hbar\omega_\lambda (+E_0) \quad (15.113)$$

Ima nultu tačku energije

$$E_0 = \sum_\lambda \frac{1}{2} \hbar\omega_\lambda \quad (15.114)$$

Ovaj izraz je beskonačan, i nije observabla i zato se izbacuje.

### 15.5.2. Renormalizacija mase i Lambov pomeraj

Sada ćemo tretirati interakciju vodonikovog atoma sa poljem kvantovane svetlosti. Interakcija se odvija preko vektorskog potencijala  $\mathbf{A}$  koji se pojavljuje u (14.12). Kako je  $\mathbf{A}$  malo u ovom slučaju, zadržaćemo samo linearni deo od  $\mathbf{A}$  i pretpostavićemo da je  $\text{div}\mathbf{A}=0$ . Za razliku od prethodnog slučaja polje nije zadato spolja, već postaje varijabla sistema. Zato ne smemo samo da pišemo  $\mathbf{A}$  u formi (15.106) već se takodje mora dodati hamiltonijanu kvantovanog polja  $\mathfrak{H}_{polja}$  još i  $\mathfrak{H}_{el} + \mathfrak{H}_{int}$ . Tako Šredingerova jednačina koja treba da se reši je

$$(\mathfrak{H}_{polja} + \mathfrak{H}_{el} + \mathfrak{H}_{int})\psi = E\psi \quad (15.115)$$

gde su

$$\mathfrak{H}_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(r) \quad (15.116)$$

$$\mathfrak{H}_{polja} = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda b_\lambda^+ b_\lambda \quad (15.117)$$

$$\mathfrak{H}_{int} = \frac{e}{m_0} \vec{A} \cdot \hat{\vec{p}} = \frac{e}{m_0} \sum_\lambda \vec{e}_\lambda \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda \epsilon_0 V}} [b_\lambda e^{i\vec{k}_\lambda \cdot \vec{r}} + b_\lambda^+ e^{i\vec{k}_\lambda \cdot \vec{r}}] \cdot \hat{\vec{p}}$$

gde je

$$\hat{\vec{p}} \equiv \frac{\hbar}{i} \text{grad} \quad (15.118)$$

Da bi smo rešili Šredingerovu jednačinu (15.115) primenićemo teoriju perturbacija gde

$$\mathfrak{H}_0 = \mathfrak{H}_{el} + \mathfrak{H}_{polja} \quad (15.119)$$

služi kao neperturbovani Hamiltonijan a  $\mathfrak{H}_{int}$  kao perturbacija. Svojsvene funkcije  $\Phi_\nu$  operatora  $\mathfrak{H}_0$  su proizvod svojsvenih funkcija operatora  $\mathfrak{H}_{el}$  i operatora  $\mathfrak{H}_{polja}$  tj.  $\Phi$ . Skraćeno ćemo skup kvantnih brojeva  $n, l, m$ , funkcije  $\psi$  označiti sa  $n$ . Na dalje ćemo obratiti pažnju na vakumsko stanje  $\Phi_0$  i jedno fotonsko stanje  $\Phi_\lambda \equiv b_\lambda^+ \Phi_0$ . Identifikujući indeks  $\nu$ , funkcije  $\Phi_\nu$  sa  $(n,0)$  ili  $(n,\lambda)$  možemo napisati neperturbovane talasne funkcije kao

$$\Phi_v = \psi_n(r)\Phi_k \quad \text{gde} \quad (15.120)$$

$$k=0 \text{ ili } \lambda. \quad (15.121)$$

Odgovarajući energetska nivoi su

$$E_{v,tot}^0 = E_n^0 \quad (k=0) \quad i \quad E_{v,tot}^0 = E_n^0 + \hbar\omega_\lambda \quad (15.122)$$

Za perturbacionu teoriju potrebni su nam matrični elementi operatora  $\mathfrak{S}_{int}$  koji su u bra i ket notaciji

$$H_{\mu\nu}^1 = \left\langle \psi_n \Phi_k \left| \frac{e}{m_0} \sum_{\lambda} \vec{e}_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}\epsilon_0 V}} \left[ b_{\lambda} e^{i\vec{k}_{\lambda}\cdot\vec{r}} + b_{\lambda}^+ e^{-i\vec{k}_{\lambda}\cdot\vec{r}} \right] \cdot \vec{p} \right| \psi_{n'} \Phi_{k'} \right\rangle \quad (15.123)$$

koji se može preurediti kao

$$H_{\mu\nu}^1 = \frac{e}{m_0} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}\epsilon_0 V}} \left[ \left\langle n \left| e^{i\vec{k}_{\lambda}\cdot\vec{r}} \vec{e}_{\lambda} \cdot \hat{\vec{p}} \right| n' \right\rangle \langle \Phi_k | b_{\lambda} | \Phi_{k'} \rangle + \left\langle n \left| e^{-i\vec{k}_{\lambda}\cdot\vec{r}} \vec{e}_{\lambda} \cdot \hat{\vec{p}} \right| n' \right\rangle \langle \Phi_k | b_{\lambda}^+ | \Phi_{k'} \rangle \right] \quad (15.124)$$

Kao što znamo iz kvantizacije harmonijskog oscilatora

$$\langle \Phi_k | b_{\lambda}^+ | \Phi_k \rangle = \langle \Phi_k | b_{\lambda} | \Phi_k \rangle = 0 \quad (15.125)$$

Zbog toga energija perturbacije se anulira u prvoj aproksimaciji. Polazeći od vakuma kao neperturbovanog stanja, tj.  $k^2=0$ , dalje imamo

$$\langle \Phi_k | b_{\lambda} | \Phi_0 \rangle = 0 \quad , \quad \langle \Phi_k | b_{\lambda}^+ | \Phi_0 \rangle = \delta_{\lambda k} \quad (15.126)$$

Drugim rečima može se generisati jedan foton  $\lambda$ . Pretpostavimo da se atom nalazi u koordinatnom početku i da je prostiranje elektronskih talasnih funkcija malo u poredjenju sa talasnom dužinom svetlosnog talasa  $e^{i\vec{k}_{\lambda}\cdot\vec{r}}$ . Ovo nam dozvoljava da ignorišemo ovaj faktor u matričnim elementima. Na ovaj način  $H_{\mu\nu}^1$  se svodi na (sa  $k=\lambda$ !).

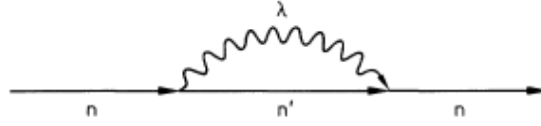
$$H_{\mu\nu}^1 \equiv H_{n,\lambda;n',0}^1 \frac{e}{m_0} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\lambda}\epsilon_0 V}} \left\langle n \left| \vec{e} \cdot \hat{\vec{p}} \right| n' \right\rangle \quad (15.27)$$

Izraz za penergiju perturbacije u drugom redu je

$$\epsilon^{(2)} = \sum_{n',\lambda} \frac{|H_{n',\lambda;n,0}^1|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0 - \hbar\omega_{\lambda}} \quad (15.128)$$

U kvantnoj elektrodinamici, procesi koji dovode do  $\varepsilon^{(2)}$  se obično vizuelizuju na sledeći način:

Elektron je u inicijalnom stanju  $n$ , i nema fotona. Onda se emituje foton, vrste  $\lambda$ . (operator kreacije  $b_\lambda^+$  u (15.124 i 15.128) i elektron odlazi u finalno stanje  $n'$ . Konačno se foton reabsorbuje (operator anihilacije  $b_\lambda$  u 15.124) i (15.128) i elektron se vraća u svoje stanje  $n$ . Ovaj proces je opisan sledećim Feynman ovim dijagramom (Slika 15.10).



Slika 15.10 Primer Feynman ovog dijagrama. Virtuelna emisija i reapsorpcija fotona.

Na dalje je potrebno da razlikujemo razne mode polja malo detaljnije. U ovom delu, zamenićemo indeks  $\lambda$  sa talasnim vektorom  $\mathbf{k}$ , a indeks  $j$  indicira jednu od dva pravca polarizacije. Pored toga, koristimo vezu frekvencije i talasnog broja

$$\omega_\lambda \equiv \omega_k = ck \quad (15.129)$$

Dalje koristimo pravilo

$$\frac{1}{V} \sum_\lambda = \sum_{j=1,2} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \quad (15.130)$$

Koristeći (15.127, 129 i 15.130) možemo (15.128) napisati u formi

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^2 \hbar}{2m_0^2 \varepsilon_0} \int d^3 \vec{k} \frac{1}{\omega_k} \sum_{n',j} \frac{\left| \langle n | \vec{e}_j \cdot \hat{\vec{p}} | n' \rangle \right|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0 - \hbar \omega_k}. \quad (15.131)$$

Radi dalje procene, podelićemo integral preko prostora  $\mathbf{k}$  u dva, jedan po prostornom uglu  $\Omega$  a drugi po intenzitetu  $\mathbf{k}$ .

$$\int d^3 \vec{k} = \int k^2 dk \int d\Omega \quad (15.132)$$

Prvo se obavlja integracija preko prostornog ugla i sumira po dva pravca polarizacije. Kako je izračunavanje čisto formalno, dobijeni rezultat se piše neposredno

$$\int d\Omega \sum_j \left| \langle n | \vec{e}_j \cdot \hat{\vec{p}} | n' \rangle \right|^2 = 4\pi \frac{2}{3} \left| \langle n | \hat{\vec{p}} | n' \rangle \right|^2 \quad (15.133)$$

Ovo vodi do sledećeg rezultata za self-energiju (samoenergiju)

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2e^2\hbar}{3m_0^2\varepsilon_0c^3} \int_0^\infty \omega d\omega \sum_{n'} \frac{\left| \left\langle n \left| \hat{p} \right| n' \right\rangle \right|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0 - \hbar\omega} \quad (15.134)$$

Detaljnija diskusija sume po  $n'$  otkriva da se ova suma sigurno ne anulira brže od  $1/\omega$ . Tako, neposredno zaključujemo da je integral po  $\omega$  u (15.134) divergentan što znači da je energetski pomeraj beskonačno veliki. Ovaj, čini se apsurdan rezultat, je predstavljao veliku teškoću teorijskim fizičarima. Ovo je prevaziđeno idejom *Bethe*-a, *Schwinger*-a i *Weisskopf*-a koju ćemo sada objasniti.

Kada radimo slično računanje za slobodne elektrone takodje nalazimo beskonačan rezultat koji se može videti na sledeći način. Ponovićemo celokupan račun ovde, ali umesto svojstvenih funkcija  $\psi_n$  atoma vodonika koristićemo talasne funkcije slobodnih elektrona

$$\psi_n(\mathbf{r}) \rightarrow \psi_p = N \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar) \quad (15.135)$$

Zapaziti da je  $\vec{p}$  u ovoj formuli običan vektor, dok je  $\hat{p}$  koje se pojavljivao ranije (npr 15.127) operator impulsa ( $\hbar/i$ )grad. Umesto matričnih elemenata, koji su bili između svojstvenih stanja vodonikovog atoma, sada računamo matrične elemente između ravanskih talasa. Neposredno se dobija

$$\left\langle \vec{p}' \left| \hat{p} \right| \vec{p} \right\rangle = N^2 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}' \cdot \vec{r}} \hat{p} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r} \quad (15.136)$$

i

$$\left\langle \vec{p}' \left| \hat{p} \right| \vec{p} \right\rangle = p \delta_{p,p'} \quad (15.137)$$

Potrebno je da se još načini zamena

$$E_n^0 - E_{n'}^0 \rightarrow E_p - E_{p'} \quad (15.138)$$

neposredno nalazimo

$$(E_p - E_{p'})\delta_{pp'} = 0 \quad (15.139)$$

na osnovu (15.137). Uzimajući sve rezultate zajedno dobijamo da je samo energija slobodnog elektrona u formi

$$\varepsilon^{(2)} = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2e^2}{3m_0^2\varepsilon_0c^3} p^2 \sum_0^\infty d\omega \quad (15.140)$$

Opazimo da je “samo energija” slobodnog elektrona sa impulsom  $p$  proporcionalna sa  $p^2$ . Jednačina (15.140) se može interpretirati kao da daje pomeraj mase mase elektrona, što se može videti kao: energija slobodnog elektrona bez interakcije sa elektromagnetsnim poljem (go elektron) je

$$E_p = p^2 / 2\bar{m}_0 \quad (15.141)$$

Ovde je  $\bar{m}_0$  masa “golog” elektrona. Pomeraj energije se računa kao

$$\Delta E_p = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2e^2}{3m_0^2 \epsilon_0 c^3} p^2 \int_0^\infty d\omega \quad (15.142)$$

Tako da je ukupna energija

$$E_p + \Delta E_p = \frac{p^2}{2m_0} \quad (15.143)$$

Masa golog elektrona, pri zanemarivanju elektromagnetne interakcije je  $\bar{m}_0$ , ali pri uzimanju ove interakcije u obzir ona je  $m_0$ . Zapaziti da je u ovoj vrsti razmatranja korišćena masa  $m_0$  a ne  $\bar{m}_0$  u (15.142). Ovo sledi iz procedure renormalizacije koja će biti opisana u daljem tekstu.

Kako slobodni elektron opažamo sa prisutnom elektromagnetnom interakcijom (15.243) mora biti izraz koji normalno pišemo za energiju slobodnog elektrona gde se opaža masa  $m_0$ . Tako možemo da identifikiramo

$$\frac{1}{m_0} = \frac{1}{\bar{m}_0} - \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4e^2}{3m_0^2 \epsilon_0 c^3} \int_0^\infty d\omega = \frac{1}{\bar{m}_0} - 2\bar{a} \quad (15.144)$$

gde je  $2\bar{a}$  jedino skraćénica zadnjeg člana srednjeg dela (15.144). Elektromagnetska “samo energija” se može interpretirati kao pomeraj mase elektrona od njegove “gole” vrednosti do opažene  $m_0$ . Ovaj shift (pomeraj) se naziva renormalizacija mase.

Argumenti korišćeni u teoriji renormalizacije su kao što dalje sledi. Razlog da je rezultat (15.134) beskonačan leži u činjenici da on uključuje beskonačnu promenu energije koja je već uračunata u Hamiltonijanu. Drugim rečima treba početi sa Hamiltonijanom za vodonikov atom uz prisustvo radijacionog polja koji je dat kao

$$\mathfrak{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\bar{m}_0} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \mathfrak{H}_{\text{int}} \quad (15.145)$$

Zatim, koristeći (15.144) možemo pisati Hamiltonijan kao

$$\mathfrak{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\bar{m}_0} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \{\mathfrak{H}_{\text{int}} + \bar{a} \hat{p}^2\} \quad (15.146)$$

Tako, ako koristimo opaženu masu slobodne čestice u izrazu za kinetičku energiju (što inače uvek činimo) ne treba ubrajati deo  $\mathfrak{H}_{\text{int}}$  koji stvara shift mase, tj. treba razmatrati

$$\mathfrak{H}_{\text{int}} + \bar{a} \hat{p}^2 \quad (15.147)$$



kao efektivnu interakciju elektrona renormalizovane mase  $m_0$  sa poljem zračenja.

Vratimo se sada na proračun Lambeovog pomeraja i vidimo da u prvom redu (aproksimaciji)  $e^2/\hbar c$  moramo dodati očekivanu vrednost drugog terma u (15.147) u (15.143) u cilju izbegavanja uračunavanja elektromagnetne interakcije dva puta, jednom u  $m_0$  i jednom u  $\mathcal{N}_{\text{int}}$ . Tako, mnogo korektnije šift nivoa  $n$  je dat sa

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2e^2\hbar}{3m_0^2\varepsilon_0c^3} \int_0^\infty d\omega \left[ \sum_{n'} \frac{|\langle n' | \hat{p} | n \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0 - \hbar\omega} + \frac{|\langle n' | \hat{p}^2 | n \rangle|}{\hbar\omega} \right] \quad (15.148)$$

Drugi term u integralu u (15.148) se može podeliti u oblik sličan prvom članu preko relacije

$$\langle n' | \hat{p}^2 | n \rangle = \sum_{n''} \langle n' | \hat{p} | n'' \rangle \langle n'' | \hat{p} | n \rangle \quad (15.149)$$

S ciljem da ne prekinemo glavnu diskusiju, odložićemo dokaz ove relacije za vežbanja. Koristeći (15.149) i (15.148) nalazimo nakon lakih preuredjivanja izraza

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2e^2}{3m_0^2\varepsilon_0c^3} \sum_{n'} |\langle n' | \hat{p} | n \rangle|^2 \int_0^\infty d\omega \frac{E_n^0 - E_{n'}^0}{E_n^0 - E_{n'}^0 - \hbar\omega} \quad (15.150)$$

Zapazimo da je integral po  $\omega$  još uvek divergentan, ali ovaj put logaritamski. Ova divergencija nije više prisutna u sofisticiranim relativističkim proračunima.

Takvi računi daju rezultat sasvim sličan (15.150) ali sa integrantom koji opada mnogo brže na velikim vrekvencijama  $\hbar\omega \gg m_0c^2$ . Možemo da “imitiramo” rezultat takvog računa sekući integral na  $\omega = m_0c^2/\hbar$ . Integral se može odmah izračunati i daje

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2e^2}{3m_0\varepsilon_0\hbar c^3} \sum_{n'} |\langle n' | \hat{p} | n \rangle|^2 (E_n^0 - E_{n'}^0) \ln \left| \frac{m_0c^2}{E_{n'}^0 - E_n^0} \right| \quad (15.151)$$

gde smo zanemarili  $(E_n^0 - E_{n'}^0)$  u poredjenju sa  $m_0c^2$ . Dalja procena (15.151) zahteva neke formalne matematičke “trikove”. Naime

$$\ln \left| \frac{m_0c^2}{E_{n'}^0 - E_n^0} \right|$$

se zamenjuje sa

$$\ln \frac{|m_0c^2|}{\langle E_{n'}^0 - E_n^0 \rangle}$$

Jasno, sada se (15.151) može zapisati u obliku

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2e^2}{3m_0^2 \varepsilon_0 \hbar c^3} \ln \frac{|m_0 c^2|}{\langle E_n^0 - E_n^0 \rangle} \sum_n |\langle n' | \hat{p} | n \rangle|^2 (E_n^0 - E_n^0) \quad (15.152)$$

Da bi smo uprostiti (15.152) dalje koristimo relaciju

$$\sum_n |\langle n' | \hat{p} | n \rangle|^2 (E_n^0 - E_n^0) = -\frac{1}{2} \langle n | [\hat{p}, [\hat{p}, \mathfrak{S}_{el}] ] n \rangle \quad (15.153)$$

koju ćemo dokazati u vežbanjima. Dvostruki komutator na desnoj strani jednačine se lako dobija.

Pretpostavimo da je  $\mathfrak{S}_{el}$  u obliku

$$\mathfrak{S}_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} + V(r) \quad (15.154)$$

Lako se dobija

$$[\hat{p}, \mathfrak{S}_{el}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V(r)}{\partial x} \quad (15.155)$$

i na sličan način

$$[\hat{p}, [\hat{p}, \mathfrak{S}_{el}]] = -\hbar^2 \Delta V(r) \quad (15.156)$$

Koristeći Kulonov potencijal  $V$  elektrona u vodonikovom atomu,  $V = -e^2 / (4\pi\varepsilon_0 |r|)$  možemo lako proceniti desnu stranu jednačine (15.156). Koristeći dobro poznate formule iz elektrostatičke (potencijal tačkastog naelektrisanja!) nalazimo

$$\Delta \frac{1}{|r|} = -4\pi\delta(\vec{r}) \quad (15.157)$$

gde je  $\delta(r)$  Dirakova funkcija u tri dimenzije. Koristeći ovaj rezultat i definicije bra i ket nalazimo

$$(15.153) = \frac{\hbar^2}{2} \left\langle n \left| \Delta \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 |r|} \right| n \right\rangle = \frac{\hbar^2 e^2}{2\varepsilon_0} \int |\psi_n(r)|^2 \delta(r) d^3r \quad (15.158)$$

i koristeći osobine  $\delta$  fje.

$$(15.158) = \frac{\hbar^2 e^2}{2\varepsilon_0} |\psi_n(0)|^2 \quad (15.159)$$

Sada smo u situaciji da napišemo konačnu formulu renormalizacije samo-energetskog pomeraja zamenjujući rezultat (15.156) sa (15.153) i (15.159) u (15.152). Onda dobijamo

$$\varepsilon^{(2)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2e^2}{3m_0^2 \varepsilon_0 \hbar c^3} \ln \frac{|m_0 c^2|}{\langle |E_{n'}^0 - E_n^0| \rangle} \frac{\hbar^2 e}{2\varepsilon_0} |\psi_n(0)|^2 \quad (15.160)$$

Da bi dobili konačan numerički rezultat potrebno je da se izračuna srednja vrednost kao i  $|\psi_n(0)|^2$ . Za vodonikov atom  $|\psi_n(0)|^2$  je dobro poznato i nije jednako nuli samo za s- stanja. Srednja vrednost je izračunata od strane Bethea za 2 S nivo. Zamenjujući sve numeričke vrednosti nalazimo  $\varepsilon^{(2)} / \hbar = \text{megaciklusa}$ . Prema ovim razmatranjima, treba očekivati shift izmedju S i P nivoa. Takav pomeraj je prvo otkriven izmedju  $2S_{1/2}$  i  $2P_{1/2}$  nivoa od strane *Lamb-a* i *Retherford-a*.

Na prvi pogled može se činiti čudnim da je moguće dobiti razumno prihvatljiv rezultat procedurom oduzimanja dve beskonačno velike veličine. Medjutim, ovo se “preokrenulo” u divnu teoriju nazvanu renormalizacija i takve procedure su sada legitimni deo teorijske fizike koje daju odlično slaganje izmedju eksperimenta i teorije. Nažalost izvan opsega uvodne knjige je detaljan opis renormalizacionih tehnika.

## 15.6. Atom u jakom električnom polju

### Problemi

15.1. Harmonijski oscilator mase  $m$ , naelektrisanja  $e$  i svojstvene frekvencije  $\omega$  je pod dejstvom konstantnog električnog polja. Izračunati talasne funkcije u prvoj i drugoj aproksimaciji teorije perturbacija, i uporedi rezultate sa tačnim rešenjem i vrednostima energije (videti Problem 9.13).

Kao primer može se izabrati perturbacija na nivoima  $n=1$  i  $n=2$ .

*Uputstvo:* Koristiti  $b^+$  i  $b$  formalizam u teoriji perturbacija i rezultate odgovarajućeg problema iz Glave 9.

15.2. Rotaciono kretanje dvoatomskog molekula ili rotacija atomskog jezgra se može aproksimativno opisati Schrodingerovom jednačinom

$$-\frac{\hbar^2}{Mr_0^2} \frac{d^2}{d\theta^2} \phi(\theta) = E\phi(\theta)$$

gde je  $M$  masa i  $r_0$  je efektivno rastojanje. Neka je talasna funkcija  $\phi(\theta)$  periodična po ugaoj koordinati  $\theta$ :  $\phi(\theta + 2\pi) = \phi(\theta)$ . Koje su talasne funkcije i energije ovog sistema? Zatim pretpostavi da se sistem perturbira dodatnim potencijalom  $a \cdot \cos(2\theta)$ . Izračunati  $E$  i  $\Phi$  u ovom slučaju koristeći teoriju perturbacija sa degeneracijom.

15.3. Pokazati da (15.112) zadovoljava (15.111) i proveriti (15.113)

*Uputstvo:* Umetnuti (15.112) u (15.111) koristi relacije komutacije (15.107) i (15.109) i  $b_\lambda \Phi_0 = 0$  za sve  $\lambda$ .

15.4 Pokazati da talasne funkcija

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_N!}} (b_1^+)^{n_1} (b_2^+)^{n_2} \dots (b_N^+)^{n_N} \phi_0 \quad (*)$$

ispunjava (15.111) i odrediti  $E$ .

*Uputstvo:* Umetnuti (\*) u (15.111), koristi veze

$$b_\lambda (b_k^+)^n - b_k^+ b_\lambda = n b_k^{n-1} \delta_{\lambda,k}$$

(15.109) i  $b_\lambda \Phi_0 = 0$  za sve  $\lambda$ .

15.4. Dokazati  $\langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = \sum_{n'} \langle n | \hat{p}^2 | n' \rangle \langle n' | \hat{p}^2 | n \rangle$ .

Uputstvo: Napisati bra-ket kao integral  $\int \psi_n^* \hat{p} \psi_n dx dy dz$  i koristiti relaciju

$$\sum_{n'} \psi_{n'}(\vec{r}) \psi_{n'}^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (**)$$

gde je  $\delta$  Diracova funkcija