Univerzitet u Novom Sadu
Prirodno-matematički fakultet
Departman za matematiku i informatiku

# Šredingerova jednačina

Master rad

Mentor:
**Prof. dr Marko Nedeljkov**

Autor:
**Nataša Tešić**

Novi Sad, 2019.

# Sadržaj

# 1 Uvod

Početkom dvadesetog vijeka, eksperimentalni dokazi su ukazivali da su atomske čestice takođe talasne prirode. Otkriveno je da elektroni daju difrakcione obrasce kada prolaze kroz dupli prorez na sličan način kao i svjetlosni talasi. Stoga je bilo razumno pretpostaviti da talasna jednačina može objasniti ponašanje atomskih čestica.

Ervin Šredinger[1] je prva osoba koja je napisala takvu talasnu jednačinu. Mnogo se diskutovalo o tome šta znači ta jednačina. Pokazano je da su karakteristični korjeni talasne jednačine jednaki energetskim nivoima kvantnog mehaničkog sistema, i najbolji test jednačine je bio kada je korišćena da riješi energetske nivoe atoma vodonika.

Ovaj master rad se bavi rješavanjem linearne Šredingerove jednačine, koju ćemo zvati samo Šredingerova jednačina. Međutim prvo moramo da se upoznamo sa konceptom kvantne mehanike, talasa materije, fizičke interpretacije talasne funkcije. Dokazujemo i Hajzenbergov princip neodređenosti koji nam govori da je nemoguće odrediti istovremeno tačan položaj i brzinu neke čestice. Problem kojim se bavimo je pronalaženje položaja čestice. Prema klasičnoj mehanici svaka čestica ima dobro definisanu poziciju u svakom trenutku. Ali prema kvantnoj mehanici to nije slučaj. Najbolje što možemo u određivanju položaja čestice je da za njeno određivanje koristimo raspodjelu vjerovatnoće. Kako bismo to uradili koristimo talasnu funkciju. Zašto sve to važi razmotrićemo u nastavku ovog rada.

Dva najveća otkrića u kvantnoj mehanici su se dogodila istovremeno: Verner Hajzenbergova formulacija, koja uključuje matrice i Ervin Šredingerova, koja koristi talasnu funkciju. Mi ćemo se baviti Šredingerovom jednačinom, diferencijalnom jednačinom talasne funkcije.

[1]Ervin Rudolf Žozef Aleksander Šrodinger je rođen 12. avgusta 1887. godine u Beču, Austrija. Bio je fizičar a njegovi najznačaniji radovi su iz oblasti kvantne mehanike. Objavio je niz radova u oblasti mehanike talasa. U djelu "Quantisierung als Eigenwertproblem" 1926. godine razvio je jednačinu koja je predviđala gdje će se elektron nalaziti u atomu. Šredinger je utvrdio ispravnost jednačine primjenjujući je na vodonikov atom, predviđajući mnoge njegove osobine sa izuzetnom tačnošću. Šrodinger 1933. godine je dobio Nobelovu nagradu za to, zajedno sa fizičarem Polom Dirakom. Šrodinger je preminuo od tuberkuloze 4.januara 1961. godine u Beču.

# 2 Talasna mehanika

Za većinu sadržaja ovog poglavlja i druge pojmove i tvrđenja vezana za talasnu mehaniku čitaoca upućujemo na [1].

**Definicija 1.** Elementarne čestice su subatomske (sve čestice koje su manje od atoma) čestice koje se ne mogu podjeliti na manje.

**Definicija 2.** Spin je osnovna osobina elementarne čestice i predstavlja unutrašnji moment impulsa.

**Definicija 3.** Ugaoni impuls (moment impulsa) je fizička veličina kojom se mjeri nastojanje materijalnog tijela da nastavi da rotira. To je proizvod momenta inercije i ugaone brzine.

Njime se izražava kretanje tijela po orbiti ili rotacija tijela sopstvenog centra mase. Magnetni moment imaju elementarne čestice, atomska jezgra, elektronske ljuske atoma i molekula. Magnetni momenat elementarnih čestica se javlja zbog spina.

Postoje dvije vrste elementarnih čestica: čestice materije i čestice prenosioci sila. Elementarne čestice obuhvataju fermione (kvarkovi, leptoni, antikvarkovi i antileptoni) i bozone. Fermioni su čestice materije i antimaterijske čestice a bozoni su čestice prenisioci sila. Čestica koja sadrži dvije ili više elementarnih čestica se zove kompozitna čestica.

Čestice materije su kvarkovi i leptoni. Kvarkovi čine protone, neutrone i sve ostale složene čestice (barione i mezone). Kao i ostale čestice materije, kvarkovi imaju spin 1/2 ali im je električni naboj 1/3s. Postoji 6 vrsta kvarkova, podjeljenih u 3 para: u-up, d-down, t-top, b-bottom, c-charm, s-strange. Up i down čine cijeli kosmos a ostali su dobijeni u akceleratorima čestica. Leptoni ne sačinjavaju druge složene čestice kao kvarkovi. Imaju spin 1/2, naelektrisanje 1s, a masa im je znatno manja od mase kvarkova. Leptoni se za razliku od kvarkova mogu naći slobodni. Postoji 6 vrsta leptona: elektron, mion, tau, elektronski neutrino, mionski neutrino i tau neutrino.

Čestice prenosioci sile prenose interakcije između čestica materije a nekad i između samih sebe. One su nosioci polja osnovnih fizičkih sila: elektromagnetne, jake, slabe i gravitacione sile. Fotoni prenose elektromagnetnu silu između čestica sa naelektrisanjem. Spin mu je 1, i sam je sebi antičestica. Slabu silu prenose $W^+, W^-, Z^0$ bozoni. Oni prenose interakciju između kvarkova i leptona. Prenosioci jake sile su gluoni, a prenose je između kvarkova i između sebe samih.

**Talasi**

**Definicija 4.** Talas je periodična deformacija koja se širi u prostoru i vremenu. Karakteriše ga amplituda, frekvencija i talasna dužina.

Amplituda je najveće odstupanje brijega talasa od ravnotežnog položaja (kada talasa nema), frekvencija je broj brjegova koji se jave u posmatranoj tački u jedinici vremena. Talasna dužina je rastojanje između dvije tačke u istoj fazi.

Osobine talasa su: refleksija (odbijanje), refrakcija (prelamanje), difrakcija (rasijanje), interferencija (uzajamni uticaj) i disperzija (raspršivanje).

Talas dakle predstavlja prenošenje poremećaja (energije i impulsa) u prostoru na rastojanjima koja su mnogo veća od amplitude oscilovanja čestica sredine koja prenose talas. Prilikom tog prenošenja čestice sredine se ne premještaju nego osciluju oko svojih ravnotežnih položaja. Postoje tri vrste talasa: mehanički, elektromagnetski i materijalni. Kod mehaničkih talasa čestice su djelići materije u gasovitom, tečnom i čvrstom stanju koji osciluju (sabijaju se i šire ili kreću) oko ravnotežnih položaja. Elektromagnetske talase u materijalnoj sredini prenose naelektrisanja. Elektromagnetski talasi se takođe prostiru i u vakuumu. Materijalni talasi se pridružuju subatomskim česticama da bi se opisao njihov položaj, impuls i slično.

Prema obliku talasa u prostoru razlikuju se prostoperiodični talasi (sinusne ili kosinusne funkcije) i impulsi. U prva dva slučaja čestice sredine su u neprekidnom periodičnom kretanju, jer izvor neprekidno generiše talase dok se kod impulsa kretanje čestica obavlja u periodu kretanja impulsa, prije i posle toga čestice sredine su u stanju mirovanja. Talas može biti i periodičan, zbir prostoperiodičnih talasa preko Furijeovih redova sa diskretnim vrijednostima frekvencije komponenti talasa. Kretanje talasnih impulsa se izučava koristeći Furijeovu transformaciju koja u suštini predstavlja Furijeov red sa kontinualnom promjenom frekvencije komponenti talasa.

Sredina kroz koju se prostire talas na razne načine utiče na njegovu amplitudu i brzinu. Ako se amplituda ravnog talasa smanjuje usljed apsorpcije energije (energija talasa se pretvara u toplotu), sredina je disipativna. Većina sredina je u manjoj ili većoj mjeri disipativna. Na primjer u vazduhu se najviše apsorbuju veće frekvencije tako da se na većoj udaljenosti čuju samo niske frekvencije izvora. Svjetlosni zraci na zalasku dobijaju crvenu boju (niža frekvencija), jer se veliki procenat viših frekvencija apsorbuje u vazduhu. Ako se u disipativnoj sredini prostire impuls onda njegova amplituda opada ali „oblik” impulsa ostaje očuvan. Kod disperzivnih sredina brzina prostiranja zavisi od frekvencije (talasne dužine) talasa. Razne frekvencije ili talasne dužine se prostiru različitim brzinama. Dobar primjer za disperziju prostoperiodičnih talasa je prelamanje (bijelih) svjetlosnih zraka pri prolasku kroz prizmu. Zrak crvene svjetlosti se kroz staklo kreće najvećom brzinom i pri prolasku kroz prizmu najmanje skreće u odnosu na prvobitni pravac. Ljubičasta svjetlost ima najmanju brzinu pa zrak maksimalno skreće. Zbog toga se na zaslonu iza prizme dobija spektar svih boja. Na sličan način se objašnjava pojava duge. Ako se u disperzivnoj sredini prostire impuls dolazi do pojave njegovog „rasplinjavanja”. Smanjuje se oštrina ivice signala, širina impulsa se povećava uz pad maksimuma, a pojam brzine talasa gubi smisao. Zbog toga se uvodi pojam grupne brzine talasa. Ponašanje impulsa u disperzivnoj sredini se objašnjava preko brzine prostiranja prostoperiodičnih talasa. Svaki impuls je moguće predstaviti kao beskonačan zbir prostoperiodičnih komponenti različite amplitude i početne faze, koristeči Furijeovu analizu. Svaka komponenta se kreće različitom brzinom tako da zbir njihovih amplituda duž pravca prostiranja u nekom trenutku ne daju istu vrijednost kao u početnom trenutku. Tako dolazi do izobličavanja signala. Detaljnije o razlikama između grupne i fazne brzine biće riječi u narednim poglavljima. U nedisperzivnoj sredini sve komponente se prostiru istom brzinom pa se u tom slučaju govori o brzini prostiranja impulsa kao cjeline. Ako brzina ili amplituda talasa zavise od pravca prostiranja (na primjer kod talasa koji se prostiru u kristalima) onda se takva sredina zove anizotropnom. Ako ne zavise onda je sredina izotropna. Rijetke su sredine koje ne izobličavaju impulse. Na primjer vakuum je nedisipativna, linearna, nedisperzivna i izotropna sredina kroz koju se prostiru elektromagnetni talasi. Zbog toga oblik impulsa ostaje nepromjenjen pri prostiranju, a amplituda opada sa udaljenošću samo kod cilindričnih i sfernih talasa dok kod ravnih ostaje konstantna.Više o talasima možete naći u knjizi [4].

**Čestično-talasni dualizam**

U optici je opšte poznato da za svjetlost postoji čestično-talasni dualizam, to jeste da svjetlost u nekim situacijama ima talasna svojstva (interferencija, difrakcija,..) a u drugim korpuskularna (fotoefekat, Komptonov efekat, ...). Godine 1924. Luj de Brolj je postavio hipotezu da dualizam nije svojstven samo za optičke pojave već da važi za sve materije (čestice, prije svega elektroni, imaju i talasne osobine). Po njegovoj ideji formula za impuls fotona $p_f = \frac{h}{\lambda}$ važi i za kretanje elektrona ili neke druge čestice $p = \frac{h}{\lambda}$, gdje sa $h$ označavamo Plankovu konstantu a sa $\lambda$ talasnu dužinu. Sada za svaku česticu koja ima impuls pridružuje joj se talas sa talasnom dužinom koja je data formulom

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv},$$

gdje $v$ predstavlja brzinu a $m$ masu. Ova formula se naziva De Broljeva relacija. Interpretacija ove formule je da svaka čestica koja se kreće mora imati i talasnu dužinu, a ona je jednaka količniku Plankove konstante i intenziteta impulsa čestice. Relacija takođe važi i za relativističke čestice, kao i za one koje se kreću brzinama manjih od brzine svjetlosti.

**Definicija 5.** Nerelativističke čestice su one čestice na koje mogu da se sa dovoljnom tačnošću primjene zakoni klasične mehanike. Relativističke čestice su one čestice za koje treba da se primjene zakoni relativističke fizike.

Talasna dužina za relativističke čestice je

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_k(E_k + 2E_0)}},$$

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_k(E_k + 2m_0c^2)}},$$

gdje je $E_k = \frac{mv^2}{2}$ kinetička energija, $E_0 = m_0c^2$ energija mirovanja, $m_0$ masa mirovanja i $c = 3 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$ brzina svjetlosti. Za nerelativističke čestice talasna dužina je

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{2mE_k}}.$$

Ono što je potrebno naglasiti je da De Broljevi talasi nisu elektromagnetni, za njih ne postoji analogija u prirodi. Njegova teorija nalaže da svako tijelo ima talasni paket koji se kreće istom brzinom kao i tijelo. Ne zrače se u prostoru i ne emituju ih čestice. De Broljevi talasi se nazivaju talasi materije i predstavljaju samu česticu. Međutim njihova brzina nije jednaka brzini svjetlosti, niti je konstantna.

Mana ove teorije je što De Brolj nije eksperimentalno potvrdio svoje hipoteze. Eksperimentalne potvrde su uslijedile tek posle. Dejvison i Džermer su u Americi 1927. godine opazili talasna svojstva elektrona, jer su elektroni rasijavanjem kroz kristalnu ploču dali difrakcionu sliku. U Engleskoj 1927. godine Tomson i Tartakovskij dobili su isto difrakcionu sliku pri prolasku elektronskog snopa kroz metalnu foliju.

**Hajzenbergova relacija neodređenosti**

Glavna odlika Klasične fizike je precizno određivanje i mjerenje veličina, to jeste možemo istovremeno odrediti položaj i brzinu čestice nezavisno jedno od drugog. Greška mjerenja će zavisiti samo od instrumenata i samog načina mjerenja, ali greška mjerenja jedne veličine nije povezana sa drugom. Dakle jedina neodređenost u klasičnoj fizici je vezana za tačnost mjerenja.

Kako po De Broljevoj teoriji čestica ima i talasne i korpuskularne osobine ne možemo u potpunosti primjeniti pojmove iz klasične fizike koji su vezani za čestice. Sada više nismo u mogućnosti da tačno odredimo koordinate, putanje, impuls, energiju i druge veličine koje postoje u makrosvijetu. Stanje čestice u kvantnoj mehanici se opisuje talasnom funkcijom, koja predstavlja vjerovatnoću da se čestica u određenom trenutku nađe u određenoj tački prostora. Kako mikročestice imaju talasne osobine postojaće ograničenje istovremenog određivanja položaja mikročestice i njene brzine, to jeste impulsa.

U kvantnoj mehanici stepen tačnosti utvrđivanja stanja čestice daje Hajzenbergova relacija neodređenosti. Hajzenberg je tvrdio da pri istovremenom određivanju položaja $(x, y, z)$ i impulsa $(p_x, p_y, p_z)$ postoje neodređenosti (apsolutne greške mjerenja) koje zadovoljavaju:

$$\triangle x \cdot \triangle p_x \geq \frac{\hbar}{2},$$
$$\triangle y \cdot \triangle p_y \geq \frac{\hbar}{2},$$
$$\triangle z \cdot \triangle p_z \geq \frac{\hbar}{2},$$

$\triangle x, \triangle y, \triangle z$ su greške mjerenja položaja date mikročestice koja se kreće; $\triangle p_x, \triangle p_y$, $\triangle p_z$ su greške koje pravimo pri mjerenju impulsa; $\hbar$ je redukovana Plankova konstanta (Dirakova konstanta) i data je sa $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, gdje je $h = 6.626176 \times 10^{-34} s$ Plankova konstanta. Dakle neodređenost položaja i neodređenost impulsa su međusobno obrnuto srazmjerne, što znači da ako je položaj mikročestice tačnije određen $\triangle x \to 0$, veća će biti neodređenost impulsa. Stoga je nemoguće istovremeno tačno odrediti položaj i impuls mikročestice. Kako je $\triangle p_x = m\triangle v_x$ dobijamo iz gornje relacije

$$\triangle x \cdot m\triangle v_x \geq \frac{\hbar}{2},$$
$$\triangle x \cdot \triangle v_x \geq \frac{\hbar}{2m}.$$

Sada vidimo da proizvod neodređenosti koordinata i brzine zavisi od mase čestice. Ako je masa velika ovaj proizvod će biti jako mali, odnosno impliciraće manju neodređenost $\triangle x$ i $\triangle v_x$. Tako dolazimo do granice primjenljivosti klasične fizike.

Hajzenberg je tvrdio da će svaki eksperiment u kome se mjeri položaj i impuls mikročestice dovesti do grešaka. Njegove relacije su pokazale da nije isto kada vršimo mjerenja u mikrosvijetu i u makrosvijetu. Kada ga vršimo u makrosvijetu djelovanje instrumenata na objekat možemo učiniti da bude jako malo to jeste da gotovo i ne utiče na osobine objekta. Međutim u mikrosvijetu, uticaj mjernih instrumenata mora da se uzme u obzir.

Njutn je otkrio da ako znamo položaj i istovremeno impuls tijela, kao i sile koje na njega djeluju, možemo precizno izračunati sve buduće položaje i impulse tog tijela. Hajzenbergova relacija neodređenosti ovo poništava u mikrosvijetu. Tek kasnije je Maks Born, otkrio izračunavanje vjerovatnoće budućih događaja u mikrosvijetu. Hajzenberg (1932. godine) i Born (1954. godine) su dobili Nobelove nagrade za svoja otkrića.

## 2.1 Kvantna mehanika

Kada je otkriveno da se čestica ponaša kao i talas bilo je jasno da se više ne može opisivati jednačinama klasične mehanike. Novu mehaniku koja je uzimala u obzir i talasnu prirodu čestice su postavili Šredinger, Hajzenberg, Dirak,... Naziva se talasna ili kvantna mehanika. Pronalazak kvantne mehanike može biti smješten u periodu između 1923. i 1927. godine. Gotovo istovremeno su predložene ekvivalentne formulacije: Matrična mehanika i Talasna mehanika. Osnovna jednačina talasne mehanike je Šredingerova jednačina (Ervin Šredinger 1926. godina). To je diferencijalna jednačina talasne funkcije- kompleksna funkcija koordinata čestice i vremena za datu česticu. Ona ima analogiju u klasičnoj mehanici a to je Drugi Njutnov zakon. Kada riješimo Šredingerovu jednačinu dobijamo energiju stanja u kojima može da se nađe čestica i talasne funkcije (funkcije stanja) pomoću kojih možemo izračunati vjerovatnoću nalaženja čestice u tim energetskim stanjima. Najveća njena mana je što su za njeno rješavanje potrebni često komplikovani matematički postupci.

Postoje dvije različite situacije u kojima čestice mogu da se nađu:

1.slobodne čestice- ukupna energija je pozitivna- talasne funkcije su progresivni talasi

2.vezane čestice- ukupna energija je negativna- talasne funkcije su stojeći talasi.

U ovom radu se bavimo samo slučajem slobodne čestice. Slobodna čestica ima sljedeće osobine :

- na nju ne djeluju sile;
- kreće se ravnomjerno pravolinijski (po inerciji);
- potencijalna energija je jednaka 0 $\Rightarrow$ ukupna energija je jednaka kinetičkoj;
- impuls je konstantan.

Matrična mehanika se oslanjala od samog početka na kritiku Stare kvantne teorije. Hajzenbergov aspekt toga je da u svakoj fizičkoj teoriji treba razlikovati pojmove i veličine koje su fizički primjetne od onih koje nisu. Stara kvantna mehanika se poziva na čitav niz pojmova bez eksperimentalne osnove. Najpoznatiji primjer toga je pojam orbite elektrona. Matrična mehanika Hajzenberga, Borna i Žordana napušta pojam orbite elektrona. Ona polazi od fizičkog posmatranja veličina kao što su frekvencija i intenzitet radijacije emitovane od strane atoma i povezuje teoriju sa svakom fizičkom veličinom određenom matricom.

Talasna mehanika Šredingera javlja se još u radovima L. de Brolja o talasima materije. Kako bi ustanovio osnovu jedinstvene teorije materije i radijacije postavio je hipotezu da je talasno-čestična dualnost opšta osobina mikroskopskih objekata, i da materija kao i svjetlost može da se posmatra i iz aspekta talasa i korpuskule. Kao što smo već i naveli dokaz De Broljeve hipoteze o talasnoj prirodi čestice uslijediće direktno samo nekoliko godina kasnije otkrićem fenomena difrakcije. U međuvremenu Šredinger pokušava da uopšti pojam talasa materije i otkriva jednačinu širenja talasne funkcije predstavljajući dati kvantni sistem. Šredingerova jednačina predstavlja osnovni elemenat Talasne mehanike. On je takođe pokazao da su Talasna mehanika i Matrična mehanika ekvivalentne.

### 2.1.1 Talasi materije

Posmatrajmo materiju iz dualnog aspekta to jeste kao što je elektromagnetni talas povezan sa svakim fotonom, povezuje se talas sa svakom česticom materije. Za takav talas važi da je ugaona frekvencija $\omega$ povezana sa energijom $E$ jednačinom $E = \hbar\omega$. U okviru ovog gledišta atom se ponaša kao rezonantna šupljina sa nizom frekvencija i uz pomoć toga se objašnjava kvantizacija energetskih nivoa.

Istovremeno smo u mogućnosti da uspostavimo jedinstvenu teoriju gdje su materija i radijacija različite vrste istog objekta. Obje imaju osobine i talasa i korpuskule. Ovim pretpostavkama se vodio i de Brolj u svojoj teoriji o talasima materija i one su bile potpuno opravdane.

Fundamentalna osobina talasa materije se dobija analogijom sa optikom (pojavom kvanta u fizici najvažnija karakteristika bila je dupli aspekt svjetlosti to jeste kao talas i korpuskula). Kao što smo i za foton tako i za talas pretpostavljamo da je vrijednost u svakoj tački intenziteta talasa povezana sa česticom daje vjerovatnoću nalaženja čestice u istoj tački. Što je više ograničen domen talasa to je bolje lokalizovana čestica. Slično je u optici u uslovima kada se talasna dužina $\lambda$ može uzeti kao zanemarljivo mala. Ovakva aproksimacija je tačna kada optičke osobine sredine kroz koju svjetlost putuje, ostaju konstantne na razdaljini nekoliko talasnih dužina, $|\operatorname{grad}\lambda| \ll 1$.

### 2.1.2 Slobodan talasni paket, fazna brzina i grupna brzina

Posmatramo širenje talasa materije u homogenoj izotropnoj sredini. Najjednostavniji tip talasa je ravni monohromatski

$$e^{i(k\tau-\omega t)} \tag{1}$$

gdje je $\omega$ ugaona brzina i data je jednačinom $\omega = 2\pi f$. To je vibracija talasne dužine $\lambda = 2\pi/k$ koja putuje u pravcu njenog talasnog vektora $k$ sa konstantnom brzinom. Ova brzina je brzina širenja površina jednakih faza, ili fazna brzina:

$$v_\phi = \frac{\omega}{k}.$$

Frekvencija $\omega$ je nezavisna od pravca $k$ ali može zavisiti od dužine vektora. Uz hipo-

tezu, svaka frekvencija $\omega$ odgovara energiji čestice $E$

$$E = \hbar\omega. \tag{2}$$

Prirodno je zatim povezati talas (1) sa uniformnim pravolinijskim kretanjem energije $E$ u pravcu paralelnom sa $k$.

Kako bismo povezali $k$ sa impulsom $p$, prvo moramo povezati sa česticom talas ograničenog proširenja. Talas (1) očigledno ne zadovoljava ovaj uslov, ali ćemo to postići superpozicijom ravnih talasa sa susjednim talasnim vektorima. Na taj način dobijamo talasni paket:

$$\psi(r,t) = \int f(k')e^{i(k'r-\omega' t)}dk'.$$

Sa $A$ i $\alpha$ označavamo apsolutnu vrijednost i fazu od $f$, respektivno. Iz hipoteze, $A$ ima mjerljivu vrijednost samo u maloj okolini od $k$. Mi ispitujemo u kom proširenju i pod kojim uslovima kretanje ovakvog talasnog paketa se može uporediti sa kretanjem klasične čestice. Da bismo to pojednostavili radimo prvo sa jednodimenzionim talasnim paketom

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k')e^{i(k'x-\omega' t)}dk'.$$

Postavimo $\phi = k'x - \omega' t + \alpha$. Talas $\psi(x,t)$ je integral proizvoda funkcije $A$ (koja pokazuje vrh u oblasti $S$ proširenja $\triangle k$ u okolini tačke $k = k'$) sa oscilirajućom funkcijom $e^{i\phi}$. Ako je broj oscilacija od $e^{i\phi}$ veliki onda će $\psi$ biti zanemarljivo. Najveće vrijednosti $\psi$ (apsolutne) dobijamo kada je faza $\phi$ konstantna u $S$, odnosno $d\phi/dk \approx 0$ (izvod po $k$ u okolini tačke $k = k'$ ). Dakle jedine značajne vrijednosti od $\psi$ su one za koje $e^{i\phi}$ iznosi samo jednu ili frakciju jedne oscilacije:

$$\triangle k \times |\frac{d\phi}{dk}| \lesssim 1.$$

Kako je

$$\frac{d\phi}{dk} = x - t\frac{d\omega}{dk} + \frac{d\alpha}{dk},$$

talas $\psi(x,t)$ je praktično koncentrisan u regiji proširenja $\triangle x \simeq \frac{1}{\triangle k}$ okružujući centar talasnog paketa, definisanog uslovom $d\phi/dk = 0$, pa dobijamo

$$x = t\frac{d\omega}{dk} - \frac{d\alpha}{dk}.$$

Ova tačka putuje sa uniformnim kretanjem i to brzinom

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

koja se naziva grupna brzina talasa $e^{i(kx-\omega t)}$. Ova brzina, a ne fazna brzina $v_\phi$, u klasičnoj aproksimaciji gdje se posmatra da proširenje talasnog paketa bude zanemarljivo, mora biti kao brzina čestice

$$v = \frac{dE}{dp}$$

($\approx p/m$ u nerelativističkoj aproksimaciji). Iz uslova $v = v_g$ i iz Komptonove formule $\triangle\lambda = \lambda' - \lambda = 2\frac{h}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}$ dobijamo de Broljevu relaciju: (Iz ova dva uslova dobijamo da je $k$ funkcija od $p$ u okviru aditivne konstante, koja se fiksira da bi ta relacija bila nezavisna od pravca putovanja duž koordinantnih osa)

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}.$$

Sve se ovo lako uopštava na trodimenzioni talasni paket. Tada će centar talasnog paketa da putuje sa uniformnim kretanjem pri brzini

$$v_g = \mathrm{grad}_k \omega$$

i ona mora biti jednaka brzini čestice:

$$v = \mathrm{grad}_p E.$$

Ovaj uslov uz (2) daje

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k. \tag{3}$$

Ove relacije su iste kao one pronađene u slučaju fotona.

### 2.1.3 Disperzivni talasi

Za linearne probleme, disperzivni talasi se obično prepoznaju po postojanju elementarnih rešenja u obliku sinusoidnih talasnih vozova

$$\varphi(x,t) = Ae^{i\kappa x - i\omega t} \tag{4}$$

gdje je $\kappa$ talasni broj, $\omega$ je frekvencija i $A$ je amplituda. U elementarnom rešenju, $\kappa, A, \omega$ su konstante. Faktor $A$ uzimamo proizvoljno i ne razmatramo ga puno pošto su jednačine linearne. Ali da bi zadovoljili jednačine, faktori $\kappa, \omega$ moraju biti povezani jednačinom $G(\kappa, \omega) = 0$. Relacija između $\omega$ i $\kappa$ se naziva disperzivna relacija i funkcija $G$ je određena zavisno od jednačine problema. Pretpostavljamo da se disperzivna relacija može riješiti u obliku realnih korjena

$$\omega = W(\kappa). \tag{5}$$

Biće više takvih rješenja, sa različitim funkcijama $W(\kappa)$. Veličina $\theta = \kappa x - \omega t$ je faza a $c = \frac{\omega}{\kappa}$ fazna brzina. Različiti talasni brojevi dovešće do različitih faznih brzina. Ovo objašnjava termin "disperzija". U Furijeovoj sintezi opštih rješenja superpozicijom, komponente sa različitim talasnim brojevima se šire kako vrijeme prolazi.

Poznato je da će jednačine sa realnim koeficijentima dovesti do realnih disperzivnih relacija samo ako se u potpunosti sastoje od parnih izvoda ili se u potpunosti sastoje od neparnih izvoda. Parni izvodi će dovesti do realnih koeficijenata, neparni do čistih imaginarnih koeficijenata; oni se ne mogu kombinovati ako će finalna forma biti realna. Šredingerova jednačina

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi, \tag{6}$$

sa kombinovanim neparnim i parnim izvodima, ima realnu disperzivnu relaciju

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$$

dozvoljavajući kompleksne koeficijente. Možemo uspostaviti korespondenciju između jednačine i disperzivne relacije dosta dublje. Sama linearna jednačina sa konstantnim koeficijentima može biti napisana kao

$$P(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3})\phi = 0,$$

gdje je $P$ polinom. Kada elementarno rješenje (4) zamjenimo u jednačinu, $\partial/\partial t$ će dati faktor $-i\omega$ i svaki $\partial/\partial x_j$ će proizvesti faktor $i\kappa_j$. Disperzivna relacija mora biti

$$P(-i\omega, i\kappa_1, i\kappa_2, i\kappa_3) = 0, \tag{7}$$

i imamo direktnu korespondenciju između jednačine i disperzivne relacije preko

$$\frac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow -i\omega, \quad \frac{\partial}{\partial x_j} \leftrightarrow i\kappa_j.$$

Iz (4) možemo dobiti ponovo jednačinu. To je osnova za raniju napomenu da jednačina može biti izvedena kada je disperzivna relacija poznata.

Međutim, vidi se da jednačina ove vrste može dati samo polinomne disperzivne relacije. Prirodno pitanje je koje vrste operatora donose mnogo generalnije disperzivne relacije. Jedna mogućnost je da se oscilatorno kretanje talasa predstavljeno sa

(4) odvija samo u nekim prostornim koordinatama dok je kod preostalih koordinata komplikovanije ponašanje. Tipičan primjer je teorija dubokih vodenih talasa u kojoj se talasi šire horizontalno, a zavisnost od vertikalne koordinate nije oscilatorna. Druga mogućnost, koja ima talasno ponašanje u svim promjenljivim, može biti ilustrovana u jednoj dimenziji integrodiferencijalnom jednačinom

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(x,t) + \int_{-\infty}^{\infty} K(x-\xi)\frac{\partial \phi}{\partial \xi}(\xi,t)d\xi = 0, \tag{8}$$

gdje je $K(x)$ jezgro date funkcije. Ova jednačina ima elementarna rješenja $\varphi = Ae^{i\kappa x - i\omega t}$ dajući

$$-i\omega e^{i\kappa x} + \int_{-\infty}^{\infty} K(x-\xi)i\kappa e^{i\kappa\xi}d\xi = 0.$$

Uslov može biti napisan kao

$$c = \frac{\omega}{\kappa} = \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta)e^{-i\kappa\zeta}d\zeta. \tag{9}$$

Desna strana je Furijeova transformacija datog jezgra $K(x)$ i, sa inverznom teoremom imamo

$$K(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} c(\kappa)e^{i\kappa x}d\kappa. \tag{10}$$

Prema tome (8) se može konstruisati tako da daje bilo koje željeno $c(\kappa)$, a samim tim i bilo koju željenu disperzivnu funkciju: jednostavno izabere se $K(x)$ kao Furijeova transformacija (10) željene fazne brzine $c(\kappa)$. Tačnije, ako

$$c(\kappa) = c_0 + c_2\kappa^2 + \cdots + c_{2m}\kappa^{2m},$$

onda

$$K(x) = c_0\delta(x) - c_2\delta''(x) + \cdots + (-1)^m c_{2m}\delta^{(2m)}(x),$$

i (8) se redukuje do diferencijalne jednačine

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + c_0\frac{\partial\varphi}{\partial x} - c_2\frac{\partial^3\varphi}{\partial x^3} + \cdots + (-1)^m c_{2m}\frac{\partial^{2m+1}\varphi}{\partial x^{2m+1}} = 0.$$

Kada je $c(\kappa)$ mnogo generalnija funkcija sa beskonačnim Tejlorovim nizom stepena $\kappa$, možemo uzeti odgovarajuću diferencijalnu jednačinu sa beskonačnim nizom izvoda.

**Generalna rješenja sa Furijeovim integralima**

Ako su (4)-(5) elementarna rješenja za linearnu jednačinu, onda je

$$\varphi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\kappa)e^{i\kappa x - iW(\kappa)t}d\kappa \tag{11}$$

takođe rješenje. Proizvoljna funkcija $F(\kappa)$ može se izabrati da odgovara proizvoljnim početnim ili graničnim uslovima, pod pretpostavkom da su uslovi dovoljno razumni za Furijeovu transformaciju. Ako postoji $n$ modaliteta sa $n$ različitih izbora od $W(\kappa)$, postojaće $n$ izraza kao (11) sa $n$ proizvoljnih funkcija od $F(\kappa)$. Tada će biti prikladno dati $n$ početnih uslova za određivanje rješenja. Primjeri

$$\varphi_{tt} - \alpha^2\nabla^2\varphi + \beta^2\varphi = 0 \quad \omega = \pm\sqrt{\alpha^2\kappa^2 + \beta^2};$$

$$\varphi_{tt} + \gamma^2\varphi_{xxxx} = 0 \quad \omega = \pm\gamma\kappa^2$$

imaju dva modaliteta i prikladno je propisati $\varphi$ i $\varphi_t$ kad je $t = 0$. Kao što se dešava u ovim slučajevima, dva modaliteta će često biti $\omega = \pm W(\kappa)$ i, u tipičnom jednodimenzionalnom slučaju, tada imamo

$$\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} F_1(\kappa) e^{i\kappa x - iW(\kappa)t} d\kappa + \int_{-\infty}^{\infty} F_2(\kappa) e^{i\kappa x + iW(\kappa)t} d\kappa \tag{12}$$

sa početnim uslovima

$$\varphi = \varphi_0(x), \quad \varphi_t = \varphi_1(x),$$

kad je $f = 0$. Ako je $W(\kappa)$ neparna po $\kappa$, prvi izraz u (12) predstavlja talase koji se kreću udesno i drugi izraz predstavlja talase koji se kreću ulijevo. Ako je $W(\kappa)$ parna, kao u gore navedenim primjerima, talasi kretajući se udesno i ulijevo javljaju se u oba dijela. Primjenjujući početne uslove, zahtjevamo

$$\varphi_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \{F_1(\kappa) + F_2(\kappa)\} e^{i\kappa x} d\kappa,$$

$$\varphi_1(x) = -i \int_{-\infty}^{\infty} W(\kappa) \{F_1(\kappa) - F_2(\kappa)\} e^{i\kappa x} d\kappa,$$

Inverzna formula daje

$$F_1(\kappa) + F_2(\kappa) = \Phi_0(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(x) e^{-i\kappa x} dx,$$

$$-iW(\kappa)\{F_1(\kappa) - F_2(\kappa)\} = \Phi_1(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1(x) e^{-i\kappa x} dx,$$

i $F_1(\kappa), F_2(\kappa)$, su determinisane kao

$$F_1(\kappa) = \frac{1}{2}\{\Phi_0(\kappa) + \frac{i\Phi_1(\kappa)}{W(\kappa)}\},$$

$$F_2(\kappa) = \frac{1}{2}\{\Phi_0(\kappa) - \frac{i\Phi_1(\kappa)}{W(\kappa)}\}.$$

Pošto su $\varphi_0(x), \varphi_1(x)$ realni, $\Phi_0(-\kappa) = \Phi_0^*(\kappa)$ i $\Phi_1(-\kappa) = \Phi_1^*(\kappa)$ gdje zvjezdice označavaju kompleksnu konjugaciju (kompleksne konjugate). Slijedi da za neparno $W(\kappa)$

$$F_1(-\kappa) = F_1^*(\kappa), \quad F_2(-\kappa) = F_2^*(\kappa); \tag{13}$$

i za parno $W(\kappa)$

$$F_1(-\kappa) = F_2^*(\kappa), \quad F_2(-\kappa) = F_1^*(\kappa), \tag{14}$$

U svakom slučaju, rješenje (12) je realno: realni početni uslovi moraju dovesti do realnih rješenja za realne jednačine. Standardno rješenje iz kojeg mogu da se rekonstruišu druga je dobijeno uzimanjem

$$\varphi_0(x) = \delta(x), \quad \varphi_1(x) = 0.$$

Onda $F_1(\kappa) = F_2(\kappa) = 1/4\pi$ i (12) se svodi na

$$\varphi = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(\kappa x) \cos(W(\kappa)t) d\kappa; \tag{15}$$

Naravno ovo je formalni integral koji treba tumačiti kao generalizovanu funkciju.

**Asimptotsko ponašanje**

Iako Furijeovi integrali daju tačna rješenja, sadržaj je teško vidjeti. Glavne karakteristike disperzivnih talasa postaju razumljivije tek kad posmatramo asimptotsko ponašanje za veliko $x$ i $t$. Prvo posmatramo integral

$$\varphi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\kappa) e^{i\kappa x - iW(\kappa)t} d\kappa$$

u jednodimenzionom slučaju. Interesuje nas talasno kretanje kada su $x$ i $t$ veliki; zanimljiva granica je $t \to \infty$ sa fiksnim $x/t$ (Izbor $x/t$ omogućava nam da ispitamo talase koji se kreću tom brzinom). Shodno tome, imamo

$$\varphi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\kappa) e^{i\chi t} d\kappa, \tag{16}$$

gdje

$$\chi(\kappa) = W(\kappa) - \kappa \frac{x}{t}.$$

Za sada, $x/t$ je fiksiran parametar i imamo samo zavisnost od $\kappa$ u $\chi$. Integral (16) može se zatim proučavati metodom najbržeg spuštanja; ovo je u stvari problem za koji je Kelvin razvio metodu. Kelvin je tvrdio da za veliko $t$, osnovna konstribucija integralu je iz susjednih stacionarnih tačaka $\kappa = k$ takvih da

$$\chi'(\kappa) = W'(\kappa) - \frac{x}{t} = 0. \tag{17}$$

Funkcije $F(\kappa), \chi(\kappa)$ u (16) su proširene u Tejlorovom nizu u okolini $\kappa = k$. Dominantna konstribucija dolazi iz izraza

$$F(\kappa) \simeq F(k),$$

$$\chi(\kappa) \simeq \chi(k) + (\kappa – k)^2 \chi''(k),$$

pod uslovom $\chi''(k) \neq 0$. Sa ovim aproksimacijama, kontribucija je

$$F(k) e^{-i\chi(k)t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{2}(\kappa – k)^2 \chi''(k)t} dk.$$

Preostali integral se svodi na realni integral greške

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-az^2} dz = (\frac{\pi}{\alpha})^{1/2}$$

rotiranjem puta integracije kroz $\pm\pi/4$; znak treba biti izabran da bude isti kao znak $\chi(k)$. Onda imamo

$$F(k) \sqrt{\frac{2\pi}{t|\chi''(k)|}} e^{-i\chi(k)t - \frac{i\pi}{4} \mathbf{sgn} \chi''}.$$

Ako postoji više od jedne stacionarne tačke $\kappa = k$ koja zadovoljava (17), svaka daje sličan izraz i na kraju imamo

$$\varphi \sim \sum_{k\ stacionarnih\ tačaka} F(k) \sqrt{\frac{2\pi}{t|W''(k)|}} e^{ikx - iW(k)t - \frac{i\pi}{4} \mathbf{sgn} W''(k)}. \tag{18}$$

Sljedeći izraz u asimptotskom ponašanju zahtjeva da je Tejlorov niz neprekidan sve dok je $(\kappa – k)^4$ izraz u $F(\kappa)$ i $(\kappa – k)^4$ izraz u $\chi(\kappa)$. Primjenom iste metode dobija se faktor

$$1 - \frac{i}{t|W''|}(\frac{F''}{2F} - \frac{1}{2}\frac{W'''}{W''}\frac{F'}{F} + \frac{5}{24}\frac{W'''^2}{W''^2} - \frac{1}{8}\frac{W^{iv}}{W''}) \tag{19}$$

koji množimo sa izrazom u (18). Komplikovan oblik potiče od potrebe da se radi sa dva dodatna izraza u Tejlorovom nizu za $F$ i $\chi$. Uopšteno, ovaj niz se nastavlja u inverznim stepenima od $t$ sa koeficijentima koji su funkcije od $k$. Ranije je pravo značenje od "veliko $t$" ostavljeno nejasno; $t$ mora biti veliko u poređenju sa vremeskim skalama izvedenim iz disperzivne relacije i iz skale dužine u početnim uslovima. Za oštro izabrane početne uslove sa malom skalom dužine, $F'$ i $F''$ su male i zahtjeva se da je $t$ veliko u odnosu na tipični period u $W(k)$, koji se zauzvrat daje parametrima u jednačini. Za ekstremni slučaj $\delta$ funkcije početnog uslova, $F$ je konstantna i $F' = F'' = 0$. Za specijalan slučaj dva modaliteta sa $\omega = \pm W(\kappa)$, potpuno rješenje je dato sa (12). Dalje pretpostavljamo da je $W(\kappa)$ monotona i pozitivna za $\kappa > 0$, što je uobičajeno slučaj, a razmatramo i asimptotsko ponašanje (12) za $x > 0$. Ako je $W(\kappa)$ neparna, $W'(\kappa)$ je parna i (17) ima dva korjena $\pm k$. Ove dvije kontribucije u (18) mogu da se kombinuju, pošto $F_1(-k) = F_1^*(k)$ iz (13), i imamo

$$\varphi \sim 2Re(F_1(k)\sqrt{\frac{2\pi}{t|W''(k)|}}e^{ikx-iW(k)t-i\frac{\pi}{4}sgnW''(k)}), \quad t \to \infty, \quad \frac{x}{t} > 0, \tag{20}$$

gdje je $k(x, t)$ pozitivan korjen od (17) definisan sa

$$k(x, t) : W'(k) = \frac{x}{t}, \quad k > 0, \quad \frac{x}{t} > 0. \tag{21}$$

**Grupna brzina**

U bilo kojoj tački $(x, t)$, (21) određuje odgovarajući talasni broj $k(x, t)$, i disperziona relacija $\omega = W(k)$ daje frekvenciju $\omega(x, t)$ u toj tački. Podsjetimo se jednačine za fazu

$$\theta(x, t) = xk(x, t) - t\omega(x, t),$$

i (20) može onda biti napisana

$$\varphi = Re\{A(x, t)e^{i\theta(x,t)}\}, \tag{22}$$

gdje je kompleksna amplituda

$$A(x, t) = 2F_1(k)\sqrt{\frac{2\pi}{t|W''(k)|}}e^{-(\pi i/4)sgnW''}. \tag{23}$$

Izraz (23) je u obliku elementarnog rješenja, ali $A, k, \omega$ nisu više konstante. Međutim, rješenje još uvijek predstavlja oscilatorni talasni voz, sa fazom $\theta$ koja opisuje razlike između lokalnog maksimuma i minimuma. Razlika je što talasni voz nije uniforman; rastojanje i vrijeme između uzastopnih maksimuma nisu konstantni, niti je amplituda. Prirodno je generalizovati pojam talasnog broja i frekvencije u ovom neuniformnom slučaju sa definisanjem njih kao $\theta_x$ i $-\theta_t$, respektivno. Brojanjem maksimuma u jedinici udaljenosti će očigledno biti loše definisana veličina, gdje je $\theta_x$ direktan i ne odgovara intuitivnoj ideji lokalnog talasnog broja. Štaviše, imamo

$$\theta(x, t) = kx - W(k)k,$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = k + \{x - W'(k)t\}\frac{\partial k}{\partial x}, \tag{24}$$
$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = -W(k) + \{x - W'(k)t\}\frac{\partial k}{\partial t};$$

stacionarni uslov (21) eliminiše izraze u $k_x, k_t$, i imamo samo

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = k(x, t), \tag{25}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = -W(k) = -\omega(x, t). \tag{26}$$

Prema tome talasni broj $k$, koji je prvo predstavljen kao posebna vrijednost talasnog broja u Furijeovom integralu, se slaže sa našom proširenom definicijom lokalnog talasnog broja $\theta_x$ u oscilatornom neuniformnom talasnom vozu. Isto je i sa odgovarajućom frekvencijom. Pored toga, lokalni talasni broj i lokalna frekvencija zadovoljavaju disperzivnu relaciju čak i u neuniformnom talasnom vozu. Ova proširenja rade tako dobro zato što neuniformnost nije prevelika. Ako je oscilacija previše nepravilna, možda ćemo naći faznu funkciju $\theta$ i zatim definisati $\theta_x$ kao talasni broj, ali intuitivna interpretacija bi se mogla izgubiti ako bi i sam $\theta_x$ varirao brzo tokom jedne oscilacije. U našem slučaju, $k(x, t)$ je slabo varirajuća funkcija. Iz (21),

$$\frac{k_x}{k} = \frac{W'}{kW''}\frac{1}{x}, \frac{k_t}{k} = -\frac{W'}{kW''}\frac{1}{t},$$

i $x, t$ su oba relativno velika. Zato je relativna promjena jedne talasne dužine ili jednog perioda mala. Prema tome $k$ je u tom smislu sporo varirajuća funkcija; isto važi za $\omega$.

Sa ovim interpretacijama veličina koje se javljaju u (23), vraćamo se na određivanje $k$ i $\omega$ kao funkcija od $(x, t)$ iz (21), i određivanju $A$ iz (24). Jednačina (21) određuje $k$ kao funkciju od $x$ i $t$. Postavlja se pitanje: gdje će se naći određena vrijednost $k_0$. Odgovor je: u tačkama

$$x = W'(k_0)t.$$

Kretajući se sa brzinom $W'(k_0)$ uvijek ćemo vidjeti talase sa talasnim brojem $k_0$ i frekvencijom $W(k_0)$. Veličina

$$W'(k) = \frac{d\omega}{dk}$$

je grupna brzina; to je važna brzina za grupu talasa sa raspodjelom talasnog broja. Interpretacija (21) pokazuje da se različiti talasni brojevi šire sa grupnom brzinom. Svaka određena vrijednost $\theta_0$ faze se širi prema

$$\theta(x, t) = \theta_0.$$

Dakle, kreće se prema

$$\theta_x \frac{dx}{dt} + \theta_t = 0,$$

pa je,

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\theta_t}{\theta_x} = \frac{\omega}{k}.$$

Fazna brzina $c$ je još uvijek data sa $\omega/k$ iako su značenja od $\omega$ i $k$ proširena. Ali razlikuje se od grupne brzine.

Za detaljna objašnjenja dijela 2.1.3 to jeste disperzivnih talasa, grupne i fazne brzine upućujemo na [3].

### 2.1.4 Kvantizacija nivoa atomske energije

Teorija talasa materije daje kvantizaciju energetskih nivoa atoma. Posmatrajmo primjer vodonikovog atoma i eliptičnu orbitu energije $E$. Talasni vektor $k$ ima vrijednost u svakoj tački orbite datu relacijom (3). Faza talasa u datoj tački orbite se povećava pri svakom obrtaju za $\oint kdr$. Da bi se stojeći talas postavio treba da ga pomnožimo sa $2\pi$. Tako dolazi do kvantizacije uslova

$$\oint pdr = \hbar \oint kdr = nh,$$

$$\oint p_r dr + \int p_\phi d\phi = nh.$$

Slično se dolazi do Bor-Somerfild zakona kvantizacije.

Ovi rezultati su dobri samo u geometrijskoj optičkoj aproksimaciji gdje pojmovi talasne dužine i talasnog vektora zadržavaju njihovo značenje. Odnosno ne možemo tvrditi da kvantizacija važi za male kvantne brojeve. Jedno je sigurno da je energetska kvantizacija povezana sa uspostavljanjem stojećeg talasa. Uopštavanje ove aproksimativne teorije daje opštije slučajeve (kao što klasična optika ide od geometrijske do talasne (odatle naziv Talasna mehanika )): imamo postavljeno postojanje talasa materije, a tek treba da otkrijemo njihovu jednačinu širenja...

### 2.1.5 Zakon konzervacije broja čestice materije

Na osnovu svega što je prethodno rečeno vidimo veliku sličnost između osobina svjetlosti i materije. Ali treba istaknuti i razlike, jer čak i u najjednostavnijim situacijama broj fotona može da varira vremenom kroz emisiju ili apsorpciju, dok broj elementarnih čestica materije ostaje konstantan. Na to nam ukazuje najopštiji fenomen atomske fizike a kvantna mehanika sistema čestica će potvrditi valjanost zakona konzervacije.

Mi se nećemo baviti apsolutnim zakonom konzervacije (razlika između materije i svjetla nije toliko izražena). Nakon što je otkriven pozitron (Anderson 1932.), a to je čestica iste mase kao i elektron ali suprotnog naelektrisanja, postalo je moguće u određenim uslovima napraviti elektron-pozitron parove (emisija materije) kao i da se mogu uništiti pri sudaru pozitron i elektron (apsorpcija materije) gdje dođe do oslobađanja energije u obliku zračenja. Uz zakon ekvivalencije između mase i energije, energija potrebna za stvaranje elektron-pozitron para je najmanje $2mc^2 (\approx 1MeV)$. Drugi slučaj emisije elektrona ili pozitrona je beta raspad atomskog jezgra. Kada se oslonimo samo na fenomen atomske fizike pozitroni su odsutni, jezgra su stabilna i prenos energije je ispod praga za kreiranje elektron-pozitron para te je zakon konzervacije dobijen. To i pretpostavljamo u nastavku.

Različiti kvantni sistemi su sačinjeni od dobro definisanog broja materijalnih čestica a najjednostavniji od njih je sastavljen od čestice u spoljašnjem polju sile, na primjer elektron. Talas povezan sa tim u svakom trenutku $t$ je funkcija $\psi(x,t)$ položaja te čestice. Vodonikov atom se na primjer sastoji od elektrona i protona, koji interaguju jedni sa drugim, pa talas $\psi(x_e, x_p; t)$ zavisi od položaja koordinata te dvije čestice $x_e, x_p$. Naelektrisanje protona ima istu vrijednost kao i elektrona ali je pozitivno a ne negativno. To je bilans između njih jednakih a ipak suprotno naelektrisanih protona i elektrona koji osigurava električnu neutralnost atoma. Broj protona u atomskom jezgru se naziva Z; ukupno naelektrisanje atoma Ze (pozitivni umnožak naelektrisanja protona). U atomu je broj elektrona koji okružuju jezgro takođe Z. Dakle kompleksan atom je formiran od jezgra naelektrisanja Ze, definisan sa njegovom pozicijom R, i od Z elektrona čije pozicije su određene vektorima $r_1, r_2, ...r_Z$. Njemu pridružen talas će biti funkcija $\psi(R, r_1, r_2, ...r_Z; t)$. Na sličan način se definiše talasna funkcija za mnogo složenije sisteme.

### 2.1.6 Neophodnost za talasnu jednačinu i uslovi nametnuti ovoj jednačini

Uzeli smo kao istinito da sve predikcije koje možemo napraviti u vezi sa dinamičkim osobinama sistema u momentu $t$ možemo zaključiti iz poznavanja $\psi$ u tom momentu. Dakle problem ove teorije je sljedeći: ako znamo talasnu funkciju $\psi$ u početnom trenutku $t_0$, odredimo tu funkciju za sve momente posle, $t > t_0$. Za to nam je potrebno poznavanje jednačine širenja talasa $\psi$.

Međutim do nje ne možemo doći dedukcijom već kao i za ostale jednačine matematičke fizike uzimamo ih kao istinite a opravdanje za to nalazimo ako je uspješno poređenje predikcija sa eksperimentalnim rezultatima. Ali izbor talasne funkcije će biti ograničen određenim uslovima kako bismo zadržali prethodno tumačenje $\psi$:

(A) Jednačina mora biti linearna i homogena; talas posjeduje osobinu superpozicije (karakteristika talasa generalno): ako su $\psi_1$ i $\psi_2$ rješenja jednačine, svaka njihova linearna kombinacija($\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$) je takođe rješenje te jednačine.

(B) Mora biti diferencijalna jednačina prvog reda po t; na taj način određivanjem $\psi$ u početnom trenutku jedinstveno definiše njenu čitavu evoluciju posle, u skladu sa pretpostavkom da je dinamičko stanje fizičkog sistema potpuno determinisano jednom kada je $\psi$ dato.

Predikcije teorije, jednačine, moraju imati formalnu analogiju u klasičnoj mehanici (princip korespondencije).

# 3 Pojam operatora

Opširnije o ovom poglavlju možete naći u [1], [2], [7].

Ako nam određena operacija dozvoljava da dovedemo u korespondenciju sa svakom funkcijom $\psi$ određenog funkcijskog prostora, jednu i samo jednu dobro definisanu funkciju $\psi'$ od tog istog prostora, onda se kaže da je $\psi'$ dobijena djelovanjem operatora $A$ na funkciju $\psi$ odnosno

$$\psi' = A\psi.$$

Operator $A$ je linearan ako je njegovo djelovanje na linearnu kombinaciju sa konstantnim koeficijentima, $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$ , dato sa

$$A(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(A\psi_1) + \lambda_2(A\psi_2).$$

Među linearnim operatorima koji djeluju na talasne funkcije čestice pomenućemo

$$\psi \equiv \psi(r, t) \equiv \psi(x, y, z, t)$$

1) diferencijalni operatori $\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z, \partial/\partial t$ (na primjer $\partial\psi/\partial t$ je izvod od $\psi$ po $t$ to jeste operator $\partial/\partial t$ djeluje na funkciju $\psi$ i daje $\partial\psi/\partial t$);

2) operatori oblika $f(r, t)$. Oni djeluju tako što množe funkciju $\psi$ sa funkcijom $f(r, t)$.

Sada možemo formirati nove linearne operatore sa algebarskim operacijama:

a) množenje operatora $A$ konstantom $c$:

$$(cA)\psi \equiv c(A\psi);$$

b) zbir $S = A + B$ dva operatora $A$ i $B$:

$$S\psi \equiv A\psi + B\psi;$$

c) proizvod $P = AB$ operatora $B$ sa operatorom $A$:

$$P\psi \equiv AB\psi \equiv A(B\psi).$$

Za razliku od sume, proizvod operatora nije komutativan, jer proizvod $AB$ nije uvijek jednak proizvodu $BA$. U prvom slučaju $B$ prvo djeluje na $\psi$ a onda $A$ djeluje na funkciju $(B\psi)$. Razlika $AB - BA$ se naziva komutator od $A$ i $B$ i označavamo ga sa $[A, B]$:

$$[A, B] \equiv AB - BA.$$

Ako je jednaka 0 onda se kaže da komutiraju, odnosno $AB = BA$. Ali ako uzmemo na primjer operator $f(x)$ koji množi funkciju sa $f(x)$ i diferencijalni operator $\partial/\partial x$ dobićemo da oni ne komutiraju.

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x)\psi = \frac{\partial}{\partial x}(f\psi) = \frac{\partial f}{\partial x}\psi + f\frac{\partial\psi}{\partial x} = (\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial x})\psi.$$

To jeste $[\frac{\partial}{\partial x}, f(x)] = \frac{\partial f}{\partial x}$. Pa će za $f(x) = x$ biti $[\frac{\partial}{\partial x}, x] = 1$. Primjer linearnog operatora koji je dobijen zbirom i množenjem linearnih operatora je Laplasijan:

$$\triangle \equiv \operatorname{div}\operatorname{grad} \equiv (\triangle\triangle) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

On se može posmatrati i kao skalarni proizvod gradijenta $\nabla \equiv (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ sa samim sobom.

**Problem 1.** *Za Koši-Rimanov operator, $\partial_y - i\partial_x$, pokazati da su eksponencijalna rješenja tačno funkcije $e^{az}$ za $a \in \mathbb{C}$ i $z \equiv x + iy$.* [2]

DOKAZ:

$$(\partial_y - i\partial_x)e^{az} = (\partial_y - i\partial_x)e^{a(x+iy)} = \partial_y(e^{a(x+iy)}) - i\partial_x(e^{a(x+iy)}) =$$

$$= e^{a(x+iy)}ia - ie^{a(x+iy)}a = 0.$$

## 3.1 Operatori impulsa i energije

Neka je data talasna funkcija $u$ i pretpostavljamo da je u pitanju de Broljev talas za česticu sa impulsom $p$ i energijom $E$. Tada je

$$u(t, x) = e^{i(kx - \omega t)}$$

pri čemu je

$$p = hk, \quad E = h\omega, \quad E = \frac{p^2}{2m}.$$

Tražimo operator impulsa tako što ćemo naći izvod po $x$:

$$\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}u(t, x) = \frac{h}{i}(ik)u(t, x) = hku(t, x) = pu(t, x).$$

Djelovanjem operatora $\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ na funkciju $u(t, x)$ dobija se $p$ puta talasna funkcija. Označavamo ga sa $\hat{p}$ i zovemo operator impulsa

$$\hat{p} := \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x},$$

$$\hat{p}u(t, x) = pu(t, x).$$

Izvedimo sad energiju $E$ pomoću operatora energije. Sada tražimo izvod po $t$ od talasne funkcije:

$$ih\frac{\partial}{\partial t}u(t, x) = ih(-i\omega)u(t, x) = h\omega u(t, x) = Eu(t, x). \tag{27}$$

Čini se kao da je $ih\frac{\partial}{\partial t}$ operator energije ali pošto je energija slobodne čestice data u terminima impulsa ($E = \frac{p^2}{2m}$) pokušaćemo da nađemo relevantniji operator za energiju

$$Eu(t, x) = \frac{p^2}{2m}u(t, x) = \frac{p}{2m}(pu(t, x)) = \frac{p}{2m}\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}u(t, x).$$

[2] U literaturi [2] (strana 96) se nalazi formulacija ovog problema.

Pošto je $p$ konstanta možemo je pomjeriti da bude pod izvodom

$$Eu(t,x) = \frac{1}{2m}\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}pu(t,x) = \frac{1}{2m}\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}u(t,x).$$

Odnosno

$$Eu(t,x) = \frac{1}{2m}\hat{p}\hat{p}u(t,x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}u(t,x).$$

Tako dobijamo operator energije koji označavamo sa $\hat{E}$

$$\hat{E} := \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Dakle dobijamo $\hat{E}u(t,x) = Eu(t,x)$. Zamjenjujući desnu stranu jednačine (28) sa prethodnim rezultatom dobijamo

$$ih\frac{\partial}{\partial t}u(t,x) = -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(t,x).$$

Odnosno

$$ih\frac{\partial}{\partial t}u(t,x) = \hat{E}u(t,x).$$

Ovo je Šredingerova jednačina slobodne čestice. Provjerimo da li de Broljeva talasna funkcija zadovoljava Šredingerovu jednačinu:

$$ih(-i\omega)u(t,x) = -\frac{h^2}{2m}(ik^2)u(t,x),$$

$$h\omega = \frac{h^2k^2}{2m} \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m}.$$

### 3.1.1 Talasna jednačina slobodne čestice

Teorija talasa materije vodi do talasne jednačine slobodne čestice, u nerelativističkoj aproksimaciji. Talas $\psi(x,t)$ je superpozicija

$$\psi(x,t) = \int F(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$$

monohromatkog ravnog talasa $e^{i(px-Et)/\hbar}$ čija je frekvencija $E/\hbar$ povezana sa talasnim vektorom $p/\hbar$ relacijom koja povezuje impuls i energiju čestice mase $m$

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

# 4 Osobine Šredingerove jednačine

Osobine Šredingerove jednačine su[3]:

1. To je diferencijalna jednačina prvog reda u vremenu, to jeste dovoljno je znati talasnu funkciju u nekom početnom trenutku $t_0$ i Šredingerova jednačina onda određuje talasnu funkciju za sve $t$. Naime, ako znamo $u(t_0, x)$ za sve $x$ onda se desna strana Šredingerove jednačine može procjeniti za svako $x$ (pošto se ona sastoji samo od izvoda $x$ i množenja). To znači da za bilo koju tačku $x$ možemo izračunati izvod po $t$ talasne funkcije što je lijeva strana Šredingerove jednačine te možemo izračunati talasnu funkciju.

2. Linearnost i superpozicija. Svaka superpozicija rješenja za različito $k$ je ponovo rješenje. Na primjer :

$$u(t, x) = e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} + e^{i(k_2 x - \omega_2 t)}.$$

Primjetimo da iako svaki sabirak odgovara stanju konačnog impulsa, ukupno rješenje neće odgovarati, to jeste u jednačini ispod desna strana se ne može zapisati kao proizvod broja i $u(t, x)$

$$\hat{p}u(t, x) = hk_1 e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} + hk_2 e^{i(k_2 x - \omega_2 t)}.$$

3. $i$ na lijevoj strani Šredingerove jednačine ukazuje na to da je nemoguće naći rješenje za realno $u(t, x)$. Ako bi $u(t, x)$ bila realna funkcija onda bi i desna strana jednačine bila realna ali lijeva bi bila imaginarna. Stoga, radimo sa kompleksnim talasnim funkcijama.

4. Nije obična talasna funkcija:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = 0.$$

Ona ima realna rješenja $\Phi \sim f(x \pm vt)$.

5. Šredingerova jednačina nije ni eliptična ni parabolična ni hiperbolična.

[3]Većina sadržaja ovog odjeljka je iz literature [1] i [2]

# 5 Pregled važnih pojmova

Pošto ćemo u ovom master radu rješavati Šredingerovu jednačinu u Švarcovom prostoru i pošto nam je potrebna Furijeova transformacija kako bismo interpretirali talasnu funkciju, ovo poglavlje je namjenjeno podsjećanju njihovih najvažnijih definicija i osobina koje koristimo u ovom radu. Dokaze, tvrđenja i više detalja o pojmovima iz ovog poglavlja čitalac može pronaći u [2] i [5].

## 5.1 Švarcovi prostori

Radićemo sa Švarcovim prostorom

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) = \{u \in C^\infty(\mathbb{R}^d) : \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}^d, \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |x^\alpha \partial^\beta u(x)| < \infty\}$$

koji je opremljen sa prebrojivom familijom seminormi

$$\|f\|_{\alpha,\beta} := \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |x^\alpha \partial^\beta u(x)|.$$

Koristićemo sljedeće činjenice:

- Važi $g_n \to g$ u $\mathcal{S}$ ako za svako $\alpha, \beta$ imamo $\|g_n - g\|_{\alpha,\beta} \to 0$
- Možemo definisati metriku na $\mathcal{S}$ indukovanu definisanjem:

$$\rho(g, f) = \sum_{\alpha,\beta} 2^{-|\alpha|-|\beta|} \frac{\|g - f\|_{\alpha,\beta}}{1 + \|g - f\|_{\alpha,\beta}}.$$

Lako se vidi da je $g_n \to g$ u $\mathcal{S}$ ekvivalentno sa $(g_n, g) \to 0$.

- Prostor $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ opremljen sa $\rho$ je kompletan metrički prostor.
- Funkcije kompaktnog nosača $C_0^\infty$ su guste u $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$.

## 5.2 Furijeova transformacija

**Definicija 6.** Za $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ definišemo

$$\mathcal{F}u(\xi) = \hat{u}(\xi) := \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix\xi} u(x) dx$$

gdje je $x \cdot \xi = \sum\limits_{i=1}^{d} x_i \xi_i$.

**Lema 1.** $u(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ *ima Furijeovu transformaciju* $\mathcal{F}u(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$.

Koristeći integraciju po dijelovima lako se vidi da

$$(-i\partial_\xi)^\alpha \hat{u} = \mathcal{F}((-x)^\alpha u), \qquad \mathcal{F}((-i\partial_x)^\alpha u) = \xi^\alpha \mathcal{F}(u).$$

Ovo daje naznaku koliko je značajna Furijeova transformacija u rješavanju linearnih parcijalnih diferencijalnih jednačina sa konstantnim koeficijentima. Neka je

$$L = \sum_{|\alpha| \leq n} a_\alpha \partial_x^\alpha$$

onda uzimajući Furijeovu transformaciju od $Lu = f$ (uz pretpostavku da su i $u$ i $f$ u Švarcovom prostoru)

$$P(\xi)\hat{u}(\xi) = \hat{f}(\xi) \quad sa \quad P(\xi) = \sum_{|\alpha|\leq n} a_\alpha (i\xi)^\alpha,$$

gdje je $P(\xi)$ karakteristični polinom operatora $L$.

**Tvrđenje 1.** *$\mathcal{F}$ je neprekidno preslikavanje iz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ u njega samog.*

**Tvrđenje 2.** *Važi:*
•$\mathcal{F}(u(x-h)) = e^{-ih\xi}\hat{u}(\xi)$,
•$\mathcal{F}(u(\lambda x))(\xi) = |\lambda|^{-d}(\mathcal{F}u)(\frac{\xi}{\lambda})$.

Da bismo pronašli inverznu Furijeovu formulu posmatramo

$$\langle f, g\rangle := \int fgdx$$

čime označavamo uparivanje dvije Švarcove funkcije i imamo

$$\langle \mathcal{F}\phi, \psi\rangle = \langle \phi, \mathcal{F}\psi\rangle$$

što slijedi iz Fubinijeve teoreme i simetrije Furijeovog jezgra $(2\pi)^{-d/2}e^{-ix\xi}$. Slično, za $L^2$ unutrašnji proizvod

$$(\phi, \psi)_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(x)\overline{\psi(x)}dx$$

imamo

$$(\mathcal{F}\phi, \psi) = (\phi, \mathcal{F}^\star\psi)$$

gdje $\mathcal{F}^\star$ ima + u eksponentu umjesto -. Operator $\mathcal{F}^\star$ se naziva inverzna Furijeova transformacija.

**Propozicija 1.** *Preslikavanje*

$$\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

*je bijekcija. Inverzna funkcija je $\mathcal{F}^\star$ sa formulom*

$$u(x) = \mathcal{F}^\star\hat{u}(x) = (2\pi)^{-d/2}\int e^{+ix\xi}\hat{u}(\xi)d\xi.$$

### 5.2.1 Proširenje Furijeove transformacije na $L^p$ prostore

**Definicija 7.** Neka je $1 \leq p < \infty$, a $\Omega$ otvoren, povezan skup. Tada prostor $L^p$ definišemo kao

$$L^p(\Omega) = \{f : \Omega \to \mathbb{R}^d : f \text{je mjerljiva, } \int_\Omega |f(x)|^p dx < \infty\}.$$

Ovo je Banahov prostor sa normom koju definišemo u nastavku.

**Definicija 8.** ($L^p$ norma) Neka je $1 \leq p < \infty$ broj i neka je $f$ funkcija definisana na domenu $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Definišemo $L^p$ normu od $f$ sa

$$||f||_{L^p(\Omega)} \stackrel{def}{=} (\int_\Omega |f(x)|^p d^d x)^{1/p}.$$

Osobine $|| \cdot ||_{L^p(\Omega)}$ norme su:
• Nenegativnost: $||f||_{L^p(\Omega)} \geq 0, \quad ||f||_{L^p(\Omega)} = 0 \Leftrightarrow f(x) = 0$ skoro svuda
• Skaliranje: $||\lambda f||_{L^p(\Omega)} = |\lambda| ||f||_{L^p(\Omega)}$
• Nejednakost trougla: $||f + g||_{L^p(\Omega)} \leq ||f||_{L^p(\Omega)} + ||g||_{L^p(\Omega)}$
• Helderova nejednakost:

$$\int_\Omega |f(x)g(x)|dx \leq ||f||_{L^p} ||g||_{L^q},$$

gdje je $f \in L^p(\Omega), g \in L^q(\Omega), \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1,\ p, q \geq 1, \frac{1}{\infty} = 0.$

Prostor $L^2$ je i Hilbertov, sa unutrašnjim proizvodom $(f|g)$ definisanim sa

$$(f|g) = \int_\Omega f(x)\overline{g(x)}dx,$$

gdje $\overline{g(x)}$ označava kompleksno konjugovanu vrednost od $g(x)$. Osnovna ideja je

**Propozicija 2.** *Neka su $X, Y$ Banahovi prostori i $E \subset X$ gust linearan potprostor od $X$. Ako je $T : E \to X$ neprekidno, to jeste*

$$\|Te\|_Y \leq c\|e\|_X$$

*važi za neko $c > 0$ za svako $e \in E$. Onda $T$ ima jedinstveno proširenje $T_{ext} : X \to Y$ sa $T_{ext}|_E = T$ zadovoljavajući $\|Tx\|_Y \leq c\|x\|_X$ za svako $x \in X$.*

Da bi proširili Furijeovu transformaciju sljedeće dvije ocjene su ključne, koje važe za $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$

$$\|\mathcal{F}f\|_{L^\infty} \leq (2\pi)^{-d/2} \|f\|_{L^1}, \quad (*)$$
$$\|\mathcal{F}f\|_{L^2} = \|f\|_{L^2} = \|\mathcal{F}^\star f\|_{L^2}. \quad (**)$$

Prva slijedi gotovo odmah iz definicije, a druga iz $(\mathcal{F}\phi, \psi) = (\phi, \mathcal{F}^\star \psi)$ i $\mathcal{F}\mathcal{F}^\star = id = \mathcal{F}^\star \mathcal{F}$.

**Propozicija 3.** *Prostor $C_0^\infty$ je gust u $L^p(\mathbb{R}^d)$ za $1 \leq p \leq \infty$.*

**Definicija 9.** Sa $\dot{C}(\mathbb{R}^d)$ označavamo skup od $u \in C(\mathbb{R}^d)$ takav da je $\lim\limits_{x \to \infty} u(x) = 0$.

Za takve funkcije se kaže da nestaju u beskonačnosti. $\dot{C}(\mathbb{R}^d)$ je zatvoren potprostor od $L^\infty(\mathbb{R}^d)$.

**Teorema 1.** *(Riman-Lebegova) Furijeova transformacija $\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ se proširuje jedinstveno na neprekidno linearno preslikavanje $L^1(\mathbb{R}^d) \to \dot{C}(\mathbb{R}^d)$ sa normom jednakom $(2\pi)^{-d/2}$. Za $u \in L^1(\mathbb{R}^d)$ vrijednost $(\mathcal{F}u)(\xi)$ je jednaka apsolutno konvergentnom integralu $(2\pi)^{-d/2} \int e^{-ix\xi} u(x)dx$.*

DOKAZ: Postojanje slijedi iz činjenice da je $\mathcal{S}$ gust u $L^1$ i iz $(*)$. Gornja granica za normu je dostignuta u $\hat{u}(0)$ za bilo koje pozitivno $u \in \mathcal{S}$. Da bismo dokazali formulu, biramo $u_n \in \mathcal{S} \quad u_n \to u$ u $L^1$. Onda je $\mathcal{F}u_n \to \mathcal{F}u$ u $\dot{C}$. U stvari, $\mathcal{F}u_n(\xi) \to \mathcal{F}u(\xi)$. Sada imamo

$$(2\pi)^{d/2}\mathcal{F}u_n(\xi) = \int e^{-ix\xi}u_n(x)dx \to \int e^{-ix\xi}u(x)dx,$$

Razlika ova dva integrala je $\leq ||u_n - u||_{L^1}$.$\square$

**Teorema 2.** *(Planšarel) Furijeova transformacija $\mathcal{F}$ i $\mathcal{F}^*$ na $\mathcal{S}$ proširuje jedinstveno unitarno preslikavanje $L^2$ na njega samog zadovoljavajući $\mathcal{F}^*\mathcal{F} = \mathcal{F}\mathcal{F}^* = id$.*

DOKAZ: Postojanje izometričnog prosirenja za $\mathcal{F}$ i $\mathcal{F}^*$ slijedi iz $(**)$. Da je $\mathcal{F}\mathcal{F}^* = \mathcal{F}^*\mathcal{F} = id$ tačno slijedi iz činjenice da su obje strane neprekidne na $L^2$ i da su jednake na gustom podskupu $\mathcal{S}$. Unitarnost slijedi. $\square$

Furijeova transformacija $\mathcal{F}$ preslikava $L^1$ u $L^\infty$ sa normom $(2\pi)^{-d/2}$ i $L^2$ u $L^2$ sa normom 1. Interpolacijom između ova dva može se proširiti preslikavanje od $L^p$ na $L^q$ za $1 \leq p \leq 2$ i $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. Ovaj rezultat je dat u Teoremi 3. koja kaže da ako je $K$ ograničen od $L^{r_0}$ do $L^{s_0}$ i ako je ograničen od $L^{r_1}$ do $L^{s_1}$, onda je $K$ ograničen i od $L^{r_\theta}$ do $L^{s_\theta}$ za $0 \leq \theta \leq 1$. Definišemo $r_\theta$ i $s_\theta$ sa

$$\frac{1}{r_\theta} \equiv \theta\frac{1}{r_0} + (1-\theta)\frac{1}{r_1}, \quad \frac{1}{s_\theta} \equiv \theta\frac{1}{s_0} + (1-\theta)\frac{1}{s_1}.$$

Sada navodimo nekoliko konvencija koje su nam potrebne za narednu teoremu. Prvo, $1 \leq r \leq \infty$ i $1 \leq s \leq \infty$. Drugo, uzimamo da je $1/\infty = 0, \quad 1/0 = \infty$. Za fiksirano $R > 0$, definišemo $B \equiv \{|x| < R\}$.

**Definicija 10.** Linearno preslikavanje $K : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ je oblika $(r, s)$ ako i samo ako

$$(\exists c \geq 0)(\forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)), \quad ||K\varphi||_{L^s(\mathbb{R}^d)} \leq c||\varphi||_{L^r(\mathbb{R}^d)}.$$

Ako je $r < \infty$, onda je $\mathcal{S}$ gust u $L^r$ i $K$ ima jedinstveno proširenje na ograničeno linearno preslikavanje od $L^r$ na $L^s$. Za $r = \infty$ proširenje preslikava $\dot{C}(\mathbb{R}^d)$ na $L^s$.

**Teorema 3.** *(Riz-Torin konveksna teorema) Pretpostavimo da je za $i = 0, 1,\ 1 \leq r_i, s_i \leq \infty$, i $K$ je linearno preslikavanje oblika $(r_i, s_i)$. Onda za sve $\theta \in [0, 1]$, $K$ je oblika $(r_\theta, s_\theta)$. Štaviše, ako*

$$(\forall u \in L^{r_i}), \quad ||Ku||_{s_i} \leq B_i||u||_{r_i}, \quad i = 0, 1$$

*Za svako $\theta \in [0, 1], \quad u \in L^{r_\theta}$,*

$$||Ku||_{s_\theta} \leq B_0^\theta B_1^{1-\theta}||u||_{r_\theta}.$$

**Napomena 1.** *Dokaz teoreme Riz-Torin je komplikovan pa ga nećemo raditi ovdje. Može se naći u radovima iz funkcionalne analize.*

**Posljedica 1.** *(Hausdorf-Jang nejednakost) Furijeova transformacija $\mathcal{F} : \mathcal{S} \to \mathcal{S}$ se proširuje jedinstveno na neprekidno linearno preslikavanje od $L^p$ do $L^q$ za $1 \leq p \leq 2$, $1/q + 1/p = 1$. Štaviše, za takvo $p$ i bilo koje $f \in L^p$,*

$$||\mathcal{F}u||_{L^q} \leq (2\pi)^{-d(2-p)/2p}||u||_{L^p}.$$

### 5.2.2 Temperirane distribucije i proširenje $\mathcal{F}$ u $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$

**Definicija 11.** Prostor $C_0^\infty$ definišemo kao:

$$C_0^\infty(\mathbb{R}^d) = \{\phi \in C^\infty(\mathbb{R}^d) : \exists K \Subset \mathbb{R}^d, \phi_{|\mathbb{R}^d \ K} = 0\}.$$

Ako $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ kažemo da je $\phi$ glatka funkcija sa kompaktnim nosačem.

**Definicija 12.** Niz $\{\phi_j\} \subset C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ konvergira ka nuli, ako važi
- Postoji kompaktan skup $K \Subset \mathbb{R}^d$ takav da je $\phi_j \subset K$, za svako $j \in \mathbb{N}$.
- Za svako $\alpha \in \mathbb{N}_0^n$, $||\partial^\alpha \phi_j||_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \to 0$, kada $j \to \infty$.

Prethodno uvedenu konvergenciju označavamo sa $\xrightarrow{\mathcal{D}}$. Skup $C_0^\infty$ sa ovako definisanom konvergencijom označavamo sa $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$, a elemente ovog prostora zovemo test funkcije.

**Definicija 13.** Linearnu neprekidnu funkcionelu $\mathcal{S}$ nad $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ zovemo distribucijom. Njeno djelovanje na test funkciju $\phi$ označavamo sa $\langle \mathcal{S}, \phi \rangle$.

Kažemo da je $\mathcal{S}$ neprekidna ako za svaki niz test funkcija $\{\phi_j\}$ koji konvergira ka nuli važi $\langle \mathcal{S}, \phi_j \rangle \to 0$, kada $j \to \infty$. Vektorski prostor ovih distribucija označavamo sa $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^d)$.

Temperirana distribucija je neprekidna linearna funkcionela na $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ što je očigledno veći prostor test funkcija od $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$. Prostor temperiranih distribucija označavamo sa $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \subset \mathcal{D}'(\mathbb{R}^d)$. Kada je distribucija u $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^d)$ temperirana? Ako se proširuje na neprekidno linearno preslikavanje $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \to \mathbb{C}$. Ako se to desi, proširenje je jedinstveno jer je $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ gust u $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Operatori $\partial^\alpha, \tau_h$ (translacija), $\sigma_\lambda$ (skaliranje), Furijeova transformacija i konvolucija se mogu proširiti i na elemente od $\mathcal{S}'$ koristeći formulu za integraciju po dijelovima:

$$\langle LT, \phi \rangle := \langle T, L'\phi \rangle$$

za sve $T \in \mathcal{S}'$ i $\phi \in \mathcal{S}$ gdje je $L'$ transponovano od $T$. Dakle, za Furijeovu transformaciju imamo

$$\langle \mathcal{F}T, \phi \rangle := \langle T, \mathcal{F}(\phi) \rangle.$$

Dakle, $\mathcal{F}$ se proširuje na preslikavanje iz $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \to \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$.

**Napomena 2.** *Prostor $L^p$ je potprostor od $\mathcal{S}'$.*

**Lema 2.** *Furijeova transformacija od $\delta$-distribucije je konstanta $(2\pi)^{d/2}$:*

$$\langle \mathcal{F}\delta, \phi \rangle = \langle \delta, \hat{\phi} \rangle = \hat{\phi}(0) = \int \frac{1}{(2\pi)^{-d/2}} \phi(x) dx.$$

Posmatrajmo sada specijalan slučaj temperiranih distribucija. Pretpostavimo da imamo $u : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ mjerljivu i $u(1 + |x|^2)^{d/2}$ u $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$. Tada možemo definisati odgovarajuću temperiranu distribuciju $U \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ pomoću formule:

$$U(\phi) = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(x) u(x) dx.$$

Ova reprezentacija $U$ je jedinstvena i identifikovaćemo $U$ sa $u$. Ako specijalizujemo dalje za $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ onda postoje dvije interpretacije Furijeove transformacije od $u$, stara $\hat{u} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ i distribucija. Lako je provjeriti da li su kompatibilne u tome

$$\langle \hat{u}, \phi \rangle = \langle u, \hat{\phi} \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} u(k) \hat{\phi}(k) dk = \int_{\mathbb{R}^d} \hat{u}(k) \phi(k) dk$$

gdje je $\langle \mathcal{F}\phi, \psi\rangle = \langle \phi, \mathcal{F}\psi\rangle$ korišćeno. Slijedi definicija Furijeove verzije prostora Soboljeva .

**Definicija 14.** Neka je $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ i $s \in \mathbb{R}$. Kažemo da $u \in H_{(s)}(\mathbb{R}^d)$ ako je $\hat{u}$ mjerljivo i $\hat{u}(\xi)(1+|\xi|^2)^{s/2}$ je u $L^2(\mathbb{R}^d)$. Ako je $u \in H_{(s)}(\mathbb{R}^d)$ definišemo normu

$$\|u\|_{(s)} = (\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} |u(\xi)|^2 (1+|\xi|^2)^s d\xi)^{\frac{1}{2}}.$$

Primjetimo da je $H_{(s)}(\mathbb{R}^d)$ kompleksan Hilbertov prostor i da je $H_{(s)}(\mathbb{R}^d) \subset H_{(t)}(\mathbb{R}^d)$ za $s \geq t$ i $H_{(0)}(\mathbb{R}^d) = L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$.

**Lema 3.** *Funkcija $\delta$ je u $H^{(s)}(\mathbb{R}^d)$ ako i samo ako je $s < -\frac{d}{2}$*

Postoji kanonski oblik povezivanja prostora $H_{(s)}$ i $H_{(t)}$ i to pomaže pri dokazivanju da su Švarcove funkcije guste u $H_{(s)}$ (generalnije one su guste u $\mathcal{S}'$).

**Definicija 15.** Neka je $u \in H_{(s)}(\mathbb{R}^d)$ i $t$ realan broj. Definišemo

$$(1-\triangle)^t u \in H_{(s-2t)}(\mathbb{R}^d) :=$$

$\{$ temperirana distribucija čija je Furijeova transformacija data sa $(1+|\xi|^2)^t \hat{u}(\xi)\}$.

Primjetimo da

$$(1-\triangle)^t u \in H_{(s-2t)}(\mathbb{R}^d)$$

i

$$\|(1-\triangle)^t u\|_{(s-2t)} = \|u\|_{(s)}$$

iz kojih zaključujemo da je $(1-\triangle)^t$ neprekidno linearno preslikavanje iz $H_{(s)}$ u $H_{(s-2t)}$ sa ograničenim inverzom $(1-\triangle)^{-t}$. U stvari $H_{(s)}(\mathbb{R}^d)$ je slika od $L^2(\mathbb{R}^d)$ pri preslikavanju $(1-\triangle)^{s/2}$. Ovo implicira da je $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ gust u $H_{(s)}(\mathbb{R}^d)$.

**Lema 4.** *Ako je $u$ u Švarcovom prostoru i $k$ cijeli broj onda je „uobičajena" definicija $(1-\triangle)^k u$ kompatibilna sa Furijeovom definicijom datom iznad.*

**Lema 5.** *Neka je $H_{(-s)}$ je dual od $H_{(s)}$. Tada za svaku ograničenu linearnu funkcionelu $f$ u $H_{(s)}$ postoji $\phi \in H_{(-s)}$ tako da je $f(u) = \int_{\mathbb{R}^d} u\phi dx$.*

Konačno, povežimo definiciju prostora $H_{(k)}(\mathbb{R}^d)$ sa prostorima $H^k(\mathbb{R}^d)$ koje smo definisali ranije gdje je $k$ nenegativni cijeli broj. Iz Parseval imamo za $\phi, \psi$ u Švarcovom prostoru

$$\|\phi\|_{H^k} = \sum_{|\alpha|<k} \int_{\mathbb{R}^d} \partial^\alpha \phi(x) \partial^\alpha \bar{\phi}(x) dx = \sum_{|\alpha|<k} \int_{\mathbb{R}^d} \xi^{2\alpha} \hat{\phi}(\xi) \hat{\bar{\phi}}(\xi) d\xi$$

i pošto postoje konstante $c_{1,k} c_{2,k}$ sa

$$c_{1,k}(1+|\xi|^2)^k \leq \sum_{|\alpha|<k} \xi^{2\alpha} \leq c_{2,k}(1+|\xi|^2)^k$$

nalazimo da su norme ekvivalentne na gustom podskupu ($\mathcal{S}$ je gust i u $H_{(k)}$ i u $H^k$, stoga možemo identifikovati elemente iz $H_{(k)}$ i $H^k$ i obrnuto.

**Lema 6.** *Za $Re(a) \geq 0, a \neq 0$, $\mathcal{F}(e^{-ax^2/2}) = a^{-d/2} e^{-\xi^2/2a}$.*

### 5.2.3 Soboljevljev prostor

**Teorema 1.** *Neka je $k$ nenegativni cijeli broj i $s > \frac{k}{+}\frac{d}{2}$. Onda postoji konstanta $C$ koja zavisi od $k, d$ i $s$ takva da za sve $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ imamo*

$$\|f\|_{C_b^k(\mathbb{R}^d,\mathbb{C})} =\leq C\|f\|_{(s)}.$$

Ovdje je $C_b^k$ Banahov prostor $C^k$ funkcija čiji su izvodi do reda $k$ ograničeni sa uobičajenom sup-normom (suma supremuma svih izvoda).

**Posljedica 2.** *Neka je $f \in H_{(s)}(\mathbb{R}^d)$ za $s > \frac{d}{2}$. Zatim nakon redefinisanja $f$ na skupu mjere nula, $f$ je neprekidna funkcija.*

# 6 Interpretacija talasne funkcije

Šredinger je mislio da talasna funkcija predstavlja česticu koja se može raširiti i raspasti. Maks Born je u eksperimentu uvidio da ne dolazi do frakcije čestica koje idu u različitim smjerovima već čestice ostaju cijele, ne raspadaju se. S obzirom na rezultat eksperimenta, Born je predložio interpretaciju vjerovatnoće, čije pristalice nisu bili ni Šredinger ni Ajnštajn. Tako je nastao eksperiment Šredingerova mačka. Šredinger je ovaj misaoni eksperiment formulisao kao odgovor na kopenhagensku interpretaciju kvantne mehanike. Međutim Born-ova jednačina je bila tačna. Slijedi objašnjenje Bornove interpretacije talasne funkcije a detalje o pojmovima iz ovog dijela rada možete pronaći u literaturi [2] i [7].

Bornova interpretacija talasne funkcije zahtjeva vjerovatnoću: $u(t, x)$ nam ne govori koliko mnogo čestice ćemo naći u položaju $x$ i vremenu $t$, već šta je vjerovatnoća da je nađemo pri $x$ i vremenu $t$. Vjerovatnoća $dP$ da nađemo česticu u kocki (unutar elementa zapremine $d^3\vec{x}$ je $dP(t, \vec{x}) = |u(t, \vec{x})|^2 d^3\vec{x}$. Dakle ukupna vjerovatnoća da se pronađe čestica u cijelom prostoru je jedinična (jer čestica mora biti nađena negdje):

$$\int_{cijeli\ prostor} |u(t, \vec{x})|^2 d^3\vec{x} = 1.$$

Fizička interpretacija, u kvantnoj mehanici, je da je kvadrat modula, $|u(t, x)|^2$ gustina vjerovatnoće za nalaženje čestice u vremenu $t$ i položaju $x$. Za podskup Lebegove mjere $E \subset \mathbb{R}^d$ :

$$Vjerovatnoća(čestica\ je\ u\ E\ pri\ vremenu\ t) = \int_E |u(t, x)|^2 dx. \tag{28}$$

Gustina vjerovatnoće za impuls čestice je data Furijeovom transformacijom $u(t, \cdot)$:

$$Vjerovatnoća(impuls\ je\ u\ E\ pri\ vremenu\ t) = \int_E |\hat{u}(t, \xi)|^2 d\xi. \tag{29}$$

Interpretacija vjerovatnoće zahtjeva da

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(t, x)|^2 dx = 1, \forall t \geq 0, \tag{30}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u(t, x)\bar{u}(t, x) dx = 1,$$

za fizički relevantna rješenja. Neće sve talasne funkcije zadovoljavati gornju jednačinu. Najjednostavniji primjer je da zamislimo bilo koju talasnu funkciju koja teži ka konstanti, integral ce biti beskonačan. Stoga mi razmatramo samo one funkcije za koje važi:

$$\lim_{x \to \pm\infty} u(t, x) = 0, \quad \lim_{x \to \pm\infty} \frac{\partial u}{\partial x} < \infty.$$

Da bismo izveli jednačinu (31) pretpostavljamo gornje uslove:

$$\partial_t \int |u|^2 dx = \partial_t \int u\bar{u} dx = \int (u\bar{u}_t + u_t\bar{u}) dx =$$

$$= \sum_j \int u\overline{i\partial_j{}^2 u} + (i\partial_j{}^2 u)\bar{u} dx =$$

$$= \sum_j i \int \partial_j u \overline{\partial_j u} - \partial_j u \overline{\partial_j u} dx = 0.$$

Interpretacija vjerovatnoće (29) implicira da je očekivana vrijednost položaja $x^{av}$ data sa:

$$x^{av} = \int_{\mathbb{R}^d} x|u(t,x)|^2 dx = E_u[x]. \tag{31}$$

Slično, (30) implicira da je očekivana vrijednost impulsa, $\xi^{av}$, jednaka

$$\xi^{av} = \int_{\mathbb{R}^d} \xi|\hat{u}(t,\xi)|^2 d\xi = E_u[\xi]. \tag{32}$$

Disperzije su :

$$(\delta x_j)^2 = D(x_j) = \int (x_j - x_j^{av})^2 |u|^2 dx, 1 \leq j \leq d, \tag{33}$$

$$(\delta \xi_j)^2 = D(\xi_j) = \int (\xi_j - \xi_j{}^{av})^2 |\hat{u}|^2 d\xi, 1 \leq j \leq d. \tag{34}$$

Koristićemo takođe i oznaku $V_u[x]$ za (33) i $V_u[\xi]$ za (35).

# 7 Rješavanje Šredingerove jednačine

U ovom dijelu posmatramo Šredingerovu jednačinu za česticu mase 1/2 i Plankove konstante jednake 1,

$$u_t = i\triangle u, \quad t, x \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d.$$

Ova jednačina opisuje evoluciju talasne funkcije slobodne čestice u kvantnoj mehanici. Nelinearna Šredingerova jednačina ima oblik $u_t = i\triangle u + iV(x)u$ i opisuje evoluciju u prisustvu potencijala. Ona je dosta teži problem za koji, osim za neke veoma posebne potencijale, nema eksplicitnog rješenja. Uprkos interpretaciji vjerovatnoće, Šredingerova jednačina je deterministički fizička teorija u smislu da uz dato početno stanje, $u(t, \cdot) = f(\cdot)$, rješenje $u$ je determinisano za svako $t$. Evolucija je determinisana rješavanjem početnog problema

$$u_t = i\triangle u, \quad u(0, \cdot) = f.$$

Već znamo puno o ovom problemu. Kako je $(t = 0)$ karakteristična, ne očekujemo da Tejlorov niz za $u$ konvergira, čak ako je $f$ realna analitička funkcija. Međutim, ako je $f$ polinomna sve ide dobro. Fizički uslov (28) čini takva polinomna rješenja neinteresantnim. Postoji nenulto $u \in C^\infty(\mathbb{R}_t \times \mathbb{R}^d_x)$ sa

$$u_t = i\triangle u, \quad u = 0 \quad za \quad t < 0.$$

Iako je na prvi pogled zbunjujuće, ovo nije strašno pošto polinomna rješenja moraju biti kvadratno integrabilna po $x$. Nula rješenja odozgo brzo rastu kad $|x| \to \infty$.

Fizička interpretacija $\int\limits_E |u|^2 dx$, kao vjerovatnoća pronalaženja čestice u $E$ predlaže da tražimo rješenja za koja je ta veličina neprekidna u $t$. Tražimo rješenja takva da je $t \mapsto u(t, \cdot)$ neprekidno na $\mathbb{R}$ sa vrijednostima iz $L^2(\mathbb{R}^d)$. To dovodi do toga da srodna mjerenja impulsa budu neprekidna. U ovom dijelu rada korišćena je literatura [2] i [6].

## 7.1 Hajzenbergova teorema

Kako smo zahtjevali da važi $\int_{-\infty}^{\infty} |u(t, x)|^2 dx = 1$ za sve $t \geq 0$ ne treba da pretpostavljamo isto i za $\hat{u}$ pošto nam Parseval-ova jednakost govori da je $\int_{-\infty}^{\infty} |\hat{u}(t, \xi)|^2 \frac{d\xi}{2\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} |u(t, x)|^2 dx = 1$.

Hajzenbergov princip kaže da je moguće za obje disperzije (34), (35) da su istovremeno veoma male, odnosno $(\delta x_j)^2 (\delta \xi_j)^2 \geq \frac{1}{4}$. Da bismo pojednostavili dokaz Hajzenbergove nejednakosti pretpostavljamo da je $x^{av} = 0$ i $\xi^{av} = 0$. Da ova pretpostavka nije u stvari restrikcija ili gubitak opštosti dokazaćemo u sljedećem problemu:

**Problem 2.** *Za $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ za koje važi $\int |u|^2 dx = 1$, neka je $v \equiv e^{-i\xi^{av} x} u(x + x^{av})$. Pokazati da su očekivane vrijednosti položaja i impulsa određene čestice za svako $v$ jednaki nuli, i da su disperzije $(\delta x_j)^2, (\delta \xi_j)^2$ iste za $v$ kao i za $u$.*[4]

DOKAZ: Označimo za funkciju $u$ očekivanje položaja i impulsa sa $a$ i $b$ respektivno. Onda je $v \equiv e^{-ibx} u(x + a)$. Treba da pokažemo da je $E_v[x] = 0$ i $E_v[\xi] = 0$ i da je $V_v[x] = V_u[x], V_v[\xi] = V_u[\xi]$. Koristeći da je $|e^{ibx}| = 1$ i smjenu promjenljivih $(y = x + a)$ dobijamo

[4] U literaturi [2] (strana 98) je zadat ovaj problem.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |v(t,x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left|e^{-ibx}u(t,x+a)\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |u(t,y)|^2 dy = 1.$$

Zatim imamo da je očekivana vrijednost položaja čestice:

$$\begin{aligned} E_v[x] &= \int_{-\infty}^{\infty} x|v(t,x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\left|e^{-ibx}u(t,x+a)\right|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (y-a)|u(t,y)|^2 dy = E_u[x]–a = 0. \end{aligned}$$

Računamo još i

$$\begin{aligned} \hat{v}(t,\xi) &= \int_{-\infty}^{\infty} v(t,x)e^{-i\xi x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ibx}u(t,x+a)e^{-i\xi x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} u(t,y)e^{-i(\xi+b)(y-a)} dy \\ &= e^{ia(\xi+b)} \int_{-\infty}^{\infty} u(t,y)e^{-i(\xi+b)y} dy \\ &= e^{ia(\xi+b)}\hat{u}(\xi+b). \end{aligned}$$

Ponovo koristeći smjenu promjenljivih ($\sigma = \xi + b$) dobijamo

$$\begin{aligned} E_v[\xi] = \int_{-\infty}^{\infty} \xi|\hat{v}(t,\xi)|^2 d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \xi\left|e^{ia(\xi+b)}\hat{u}(t,\xi+b)\right|^2 d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma–b)|\hat{u}(t,\sigma)|^2 d\sigma \\ = E_u[\xi] - b = 0. \end{aligned}$$

Ostaje da izračunamo disperzije koristeći smjene promjenljivih $y = x + a$ i $\sigma = \xi + b$:

$$V_v[x] = \int_{-\infty}^{\infty} x^2|v(t,x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2|u(t,x+a)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (y-a)^2|u(t,y)|^2 dy = V_u[x],$$

$$V_v[\xi] = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2|\hat{v}(t,\xi)|^2 d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2|\hat{u}(t,\xi+b)|^2 d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma–b)^2|\hat{u}(t,\sigma)|^2 d\sigma = V_u[\xi].$$

Podsjetimo se nekoliko osobina o unutrašnjem proizvodu u kompleksnom vektorskom prostoru, koje će nam biti potrebne za nastavak dokaza:

1. $\forall z \in \mathbb{C} \quad |z|^2 = z\bar{z}, \quad z + \bar{z} = 2Re(z)$
2. Za svako realno $x$ važi $|e^{itx}| = |\cos x + i \sin x| = 1$
3. Za svako $f, g, c \in \mathbb{C}$ važi

$$\langle f, g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\overline{g(x)} dx$$

$$\langle cf, g\rangle = c\langle f, g\rangle$$

$$\langle f, cg\rangle = \bar{c}\langle f, g\rangle$$
$$\langle f, g\rangle = \overline{\langle g, f\rangle}$$
$$||cf|| = |c|\|f\|$$

4. Za svako $f, g \in \mathbb{C}$ važi

$$\|f+g\|^2 = \|f\|^2 + 2Re\langle f, g\rangle + \|g\|^2$$

5. Koši-Švarcova nejednakost

$$|\langle f, g\rangle| \leq \|f\|\|g\|$$

**Problem 3.** *(Hajzenbergova nejednakost) Neka je $v$ definisano kao u prethodnom problemu, i neka je $Q \equiv \int x\overline{v(x)}v'(x)dx$.*[5]

1. *Primjenom parcijalne integracije na Q, pokazati da je $ReQ = -\frac{1}{2}$.*
2. *Pokazati $|Q|^2 \leq (V_v[x])^2(V_v[\xi])^2$*
3. *Zaključiti da je $(V_v[x])^2(V_v[\xi])^2 \geq \frac{1}{4}$.*

DOKAZ: 1. Pošto posmatramo $v \neq 0$ onda su i $xv, \xi\hat{v} \neq 0$. Ako su $||xv||$ i $||\xi\hat{v}|$ beskonačne onda je lijeva strana nejednakosti beskonačna pa Hajzenbergova nejednakost važi trivijalno. Dakle ostaje nam samo da pokažemo slučaj kada su $||xv||$ i $||\xi\hat{v}||$ konačni. Koristeći parcijalnu integraciju dobijamo:

$$\begin{aligned} Q &= \int_{-\infty}^{\infty} x\overline{v(x)}v'(x)dx = \left\{z = x\overline{v(x)}, \quad dt = v'(x)dx\right\} \\ &= x|v(x)|^2\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} |v(x)|^2 + xv(x)\overline{v'(x)}dx. \end{aligned}$$

Pošto je prvi izraz na desnoj strani posljednje jednakosti 0 (jer je $||xv|| < \infty$ ) i uz osobinu 1. dobijamo

$$\int_{-\infty}^{\infty} |v(x)|^2 dx = -2Re\int_{-\infty}^{\infty} \overline{xv(x)}v'(x)dx.$$

A s ozbirom da je $\int_{-\infty}^{\infty} |v(x)|^2 dx = 1$ imamo

$$ReQ = -\frac{1}{2}.$$

2. Pošto je $|-2Re\int_{-\infty}^{\infty} \overline{xv(x)}v'(x)dx| \leq 2|\int_{-\infty}^{\infty} \overline{xv(x)}v'(x)dx|$ i iz Koši-Švarcove nejednakosti

$$|\int_{-\infty}^{\infty} \overline{xv(x)}v'(x)dx|^2 \leq (\int_{-\infty}^{\infty} x^2|v(x)|^2dx)(\int_{-\infty}^{\infty} |v'(x)|^2dx).$$

[5] U literaturi [2] (strana 98) je zadat ovaj problem.

Imamo da je

$$\Big(\int_{-\infty}^{\infty} |v(x)|^2 dx\Big)^2 \leq 4\Big(\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |v(x)|^2 dx\Big)\Big(\int_{-\infty}^{\infty} |v'(x)|^2 dx\Big).$$

Znamo da je lijeva strana prethodne jednačine jednaka $1$ i da je prvi faktor na desnoj strani $V_v[x]$. Za preostali faktor na desnoj strani koristimo Parseval-ovu jednakost

$$\int_{-\infty}^{\infty} |v'(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\xi \hat{v}(\xi)|^2 \frac{d\xi}{2\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 |\hat{v}(\xi)|^2 \frac{d\xi}{2\pi} = V_v[\xi].$$

Posljednja jednakost prethodne jednačine važi jer je $E_v[\xi] = 0$.

3. Konačno iz prethodnog slijedi Hajzenbergova nejednakost:

$$\frac{1}{4} \leq (V_v[x])^2 (V_v[\xi])^2.$$

**Teorema 2.** ***(Hajzenbergova teorema):*** *Ako je $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ sa $\int |u|^2 dx = 1$, onda je $(\delta x_j)^2 (\delta \xi_j)^2 \geq \frac{1}{4}$ gdje su disperzije definisane u jednačinama (32), (33), (34) i (35).*

# 8 Rješenja Šredingerove jednačine sa početnim uslovima iz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$

Eksponencijalna rješenja Šredingerove jednačine zadovoljavaju $\tau = -i|\xi|^2$. To su

$$e^{-it|\xi|^2+ix\xi} = e^{i\xi(x-\xi t)},$$

funkcije od $x - \xi t$. Eksponencijalno rješenje frekvencije $\xi$ razvija se translacijom pri brzini $\xi$. Za jednačinu $u_t = ic\triangle u$, rješenja su $e^{i\xi(x-c\xi t)}$ i brzina je $c\xi$. Hiperpovrši konstantne faze transliraju pri brzini $c|\xi|$ u pravcu $\xi/|\xi|$. Zbog toga se brzina $c\xi$ naziva fazna brzina pri frekvenciji $\xi$. Međutim grupna brzina, koja iznosi $2c\xi$ za jednačinu $u_t = ic\triangle u$, je mnogo važnija veličina. Većina sadržaja ovog poglavlja se nalazi u [2].

Posmatramo slučaj kada je $c = 1$. Ako uzmemo linerne kombinacije eksponencijalnih rješenja, dobijemo rješenja

$$\int a(\xi)e^{-it|\xi|^2+ix\xi}d\xi.$$

Da bismo riješili početni problem

$$u_t = i\triangle u, \quad u(0,\cdot) = f(\cdot), \tag{35}$$

postavimo da je $t = 0$ i izjednačimo krajnji izraz sa $f$. Ovo ukazuje da $a = (2\pi)^{-d/2}\mathcal{F}f$, vodi do formule

$$u(t,x) = (2\pi)^{-d/2}\int e^{-it|\xi|^2}e^{ix\xi}\mathcal{F}f(\xi)d\xi. \tag{36}$$

Drugi način da dobijemo ovu formulu je da uzmemo Furijeovu transformaciju od $u_t = i\triangle u$ u odnosu na $x$ pa dobijemo $\partial_t\hat{u} = -i|\xi|^2\hat{u}$, $\hat{u}(t=0,\xi) = \hat{f}(\xi)$. Rješavamo sada ovu običnu diferencijalnu jednačinu u vremenu sa $\xi$ kao parametrom

$$\partial_t\hat{u} = -i|\xi|^2\hat{u} \Leftrightarrow \partial_t(\ln\hat{u}) = \frac{\partial_t\hat{u}}{\hat{u}} = -i|\xi|^2.$$

Prethodni izraz integralimo po $t$ i dobijamo

$$\ln\hat{u} = -it|\xi|^2 + \ln C(\xi) \Leftrightarrow \hat{u} = e^{-it|\xi|^2}C(\xi).$$

Posljednja jednačina mora da važi i kada je $t = 0$ pa imamo

$$\hat{u}(0,\xi) = e^{-i0|\xi|^2}C(\xi) = C(\xi) = \hat{f}(\xi).$$

Na kraju imamo

$$\hat{u}(t,\xi) = e^{-it|\xi|^2}\hat{f}(\xi)$$

što je ekvivalentno sa

$$u(t,x) \equiv \mathcal{F}^{-1}(e^{-it|\xi|^2}\mathcal{F}f) \tag{37}$$

a to je isto kao (37).

Dalje pokazujemo da su formule (37), (38) rješenja od (36). Jasno je da za svako $f \in \mathcal{S}$ $u$ dato sa (37) je beskonačno diferencijabilan i po $t$ i po $x$, pa se integral (37) može diferencirati proizvoljan broj puta u odnosu na $t$ i $x$. Diferenciranje je opravdano brzim opadanjem $\mathcal{F}f$ pošto su $t, x$ izvodi funkcije koju integralimo izraženi kao linearna kombinacija izraza oblika

$$polinomno(t,\xi)e^{-it|\xi|^2}e^{ix\xi}\mathcal{F}f(\xi).$$

Zahvaljujući brzom opadanju $\mathcal{F}f$, ovi su ograničeni sa $c_{N,T}\langle\xi\rangle^{-N}$ na $[-T,T]\times\mathbb{R}^d_x\times\mathbb{R}^d_\xi$. Nalazimo da $u\in C^\infty(\mathbb{R}\times\mathbb{R}^d)$ i zadovoljava početni problem (36). Dalje, Furijeova transformacija od $D^\alpha_{t,x}u(t,\cdot)$ ima Furijeovu transformaciju jednaku konačnoj linearnoj kombinaciji izraza oblika

$$polinomno(t,\xi)e^{-it|\xi|^2}\mathcal{F}f(\xi).$$

Za fiksirano $t$, oni leže u $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d_\xi)$. Slijedi da je preslikavanje $t\mapsto u(t)$ preslikavanje $\mathbb{R}\mapsto\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Da bi dokazali neprekidnost dovoljno je pokazati da $\xi^\alpha\partial^\beta_\xi\mathcal{F}D^\gamma_{t,x}(u(t+h)-u(t))$ konvergira ka 0 u $L^\infty(\mathbb{R}^d_\xi)$ kad $h$ teži nuli.

Dakle pokazujemo da

$$\sup_x|x^\alpha\partial^\beta_x(u(t+h,x)-u(t,x))|$$

ide u 0 kad $h\to 0$. Zamjenjujući u formulu $u$ vidimo da je

$$\sup_x|x^\alpha\partial^\beta_x\int(e^{-i(t+h)|\xi|^2}-e^{-it|\xi|^2})e^{it\xi}\mathcal{F}f(\xi)d\xi|.$$

Zbog uniformne konvergencije možemo izmjeniti red integraljenja i diferenciranja, pa provlačenjem kroz $\partial^\beta_x$ i zamjenjivanjem $x^\alpha e^{it\xi}$ sa $(-i\partial_\xi)^\alpha e^{it\xi}$ i integracijom po dijelovima vidimo da dobijamo konačnu sumu izraza oblika izvodom po $\xi$ od

$$[p(t+h,\xi)e^{-i(t+h)|\xi|^2}-p(t,\xi)e^{-it|\xi|^2}]\partial^\mu_\xi\mathcal{F}(f),$$

gdje je $p$ polinom. To je polinomijalno ograničeno po svim promenljivama i proizvodom $h(\langle\xi\rangle+\langle t\rangle)^N$. Brzo opadanje $\partial^\mu_\xi\mathcal{F}f$ više nego kompenzuje polinomni rast, odnosno dozvoljava da integral konvergira i možemo pustiti $h\to 0$ da bi dobili krajnji rezultat.

Želimo da pokažemo da je $u$ diferencijabilna funkcija u vremenu sa vrijednostima iz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Postoje dvije razumne definicije ove notacije i one su ekvivalentne. Dajemo ih u sljedećoj propoziciji koju ne dokazujemo jer je dokaz sličan onom za neprekidnost:

**Propozicija 4.** *Pretpostavimo da $u\in C(\mathbb{R}:\mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$.Tada su sljedeći iskazi ekvivalentni:*

*(1) $\mathcal{S}\text{–}\lim_{h\to 0}(u(t+h)-u(t))/h$ postoji uniformno na ograničenim podskupovima od $\mathbb{R}_t$.*

*(2) Parcijalni izvod $\partial u/\partial t$ postoji za svako $t,x,(\partial u/\partial t)(t,\cdot)\in\mathcal{S}$ za svako $t$, i preslikavanje $t\mapsto(\partial u/\partial t)(t,\cdot)$ je neprekidno iz $\mathbb{R}$ u $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d_x)$.*

Uzimajući Furijeovu transformaciju od izraza $\mathcal{S}\text{–}\lim_{h\to 0}\frac{u(t+h)-u(t)}{h}=u_t$ pokazuje da $u\in C^1(\mathbb{R}:\mathcal{S})\Leftrightarrow\mathcal{F}u\in C^1(\mathbb{R}:\mathcal{S})$. U tom slučaju, $\partial_t\mathcal{F}u=\mathcal{F}\partial_t u$.

**Definicija 16.** Za $k\geq 1, C^k(\mathbb{R}:\mathcal{S}(\mathbb{R}^d_x))$ je definisan induktivno kao skup funkcija $u\in C^{k-1}(\mathbb{R}:\mathcal{S})$ tako da $\partial^{k-1}_t u\in C^1(\mathbb{R}:\mathcal{S}), C^\infty(\mathbb{R}:\mathcal{S})\equiv\bigcap_k C^k(\mathbb{R}:\mathcal{S})$.

Nije teško pokazati da je $C^k(\mathbb{R} : \mathcal{S})$ skup od $u \in C^k(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d)$ tako da je za $0 \leq j \leq k, t \mapsto \partial_t^j u(t) \in C(\mathbb{R} : \mathcal{S})$. Zaista, rješenje $u$ konstruisano gore pripada $C^\infty(\mathbb{R} : \mathcal{S})$.

Prostor $C^\infty(\mathbb{R} : \mathcal{S})$ je kompletan metrički prostor, a metrika je izvedena iz niza normi

$$p_n(u) \equiv \sum_{|\alpha|+j+|\beta|\leq n} \|x^\alpha \partial_t^j \partial_x^\beta u\|_{L^\infty([-n,n]\times\mathbb{R}^d)}.$$

Konačno, primjetimo da je $u \in C^\infty(\mathbb{R} : \mathcal{S}) \Leftrightarrow \mathcal{F}u \in C^\infty(\mathbb{R} : \mathcal{S})$.

**Teorema 4.** *Za svako $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, postoji jedinstveno $u \in C^\infty(\mathbb{R} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$ koje zadovoljava (36). Rješenje $u$ je dato formulom (37).*

DOKAZ: Egzistencija je dokazana u prethodnoj diskusiji. Ostaje da dokažemo jedinstvenost. Ako $u \in C^1(\mathbb{R} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d))$ zadovoljava $u_t = i\triangle u$, onda uzimajući Furijeovu transformaciju obje strane dobijamo

$$\mathcal{F}(u_t) = \mathcal{F}(i\triangle u)$$

$$\partial_t(\mathcal{F}u) = i(i^2|\xi|^2\mathcal{F}u).$$

Dakle, $\partial_t\hat{u} = -i|\xi|^2\hat{u}$, a odatle je

$$\partial_t(e^{it|\xi|^2}\hat{u}) = e^{it|\xi|^2}\hat{u}(i|\xi|^2) + e^{it|\xi|^2}\partial_t\hat{u}$$

$$= e^{it|\xi|^2}\hat{u}(i|\xi|^2) + e^{it|\xi|^2}(-i|\xi|^2\hat{u}) = 0.$$

Što znači da $e^{it|\xi|^2}\hat{u}$ ne zavisi od $t$ (jednak je za svako $t$), a kako je za $t = 0 \quad \hat{u}(0) = \mathcal{F}f(\xi)$ dobijamo $e^{it|\xi|^2}\hat{u} = e^{i0|\xi|^2}\hat{u}(0) = \mathcal{F}f(\xi)$. Odnosno $\hat{u} = e^{-it|\xi|^2}\mathcal{F}f(\xi) \Leftrightarrow u = \mathcal{F}^{-1}(e^{-it|\xi|^2}\mathcal{F}f(\xi))$. Pretpostavimo suprotno, da postoje dva rješenja (36), $v$ i $w$, $v \neq w$. Sada za $u = v - w$ imamo početni uslov $u(0,\cdot) = v(0,\cdot) - w(0,\cdot) = f(\cdot) - f(\cdot) = 0$. Konačno imamo da je $\hat{u} = 0 \Rightarrow u = 0$ to jeste $v = w$. Došli smo do kontradikcije, dakle rješenje jeste jedinstveno. $\Box$

Primjetimo da je $|\mathcal{F}u(t,\xi)|^2 = |\mathcal{F}f(\xi)|^2$ nezavisno od $t$. Prema tome gustina vjerovatnoće impulsa je nezavisna od $t$, veoma jak oblik konzervacije impulsa. Integracijom po $\xi \in \mathbb{R}^d$ pokazuje se da je $L^2(\mathbb{R}^2)$ norma od $u(t)$ neprekidna u vremenu. Dakle zahtjev (31) je zadovoljen sve dok je to zadovoljeno za $t = 0$. Konzervacija ukupnog (totalnog) impulsa tvrdi da je $\int \xi|\mathcal{F}u|^2 d\xi$ nezavisno od $t$. Ovo je slabija tvrdnja.

**Primjer 1.** *Naći rješenje početnog problema (36) kada je $f(x) = e^{-a|x|^2}, a > 0$ Gausova funkcija „širine" $1/\sqrt{a}$ i visine 1.*

Na osnovu $\mathcal{F}f(\xi) = a^{-d/2}e^{-|\xi|^2/2a}$ dolazimo do formule

$$\hat{u}(t) = e^{-it|\xi|^2}\mathcal{F}f(\xi) = a^{-d/2}e^{-(1/a+2it)|\xi|^2/2}, \tag{38}$$

koja je opet Gausova. Pošto je $\hat{u}$ glatka, $u = \mathcal{F}^{-1}\hat{u} = \mathcal{F}\hat{u}$, i uz Lemu 6. iz dijela 5.2.2 dolazimo do

$$u = a^{-d/2}(1/a + 2it)^{-d/2}e^{-|x|^2(2(1/a+2it))}$$

$$= (1 + 2ait)^{-d/2}e^{-a|x|^2/(2(1+4a^2t^2))}e^{ia^2t|x|^2/(1+4a^2t^2)}. \tag{39}$$

Ovo je jedno od nekoliko eksplicitnih rješenja Šredingerove jednačine. Kada $t \to \infty$, širina od $u$ raste kao $t\sqrt{a}$. Fizička interpretacija je da $(\delta x) \approx t\sqrt{a}$. Slično raspodjela impulsa je Gausova sa širinom $\delta p \approx \sqrt{a}$. Impuls reda $\sqrt{a}$ izaziva širenje kao $t\sqrt{a}$ objašnjavajući ponašanje od $\delta x$. Kada $t \to \infty$, amplituda od $u$ opada kao $(at)^{-d/2}$. Geometrijsko obrazloženje je da se talas širi preko $|x| \leq t\sqrt{a}$. Ako je tipična amplituda $M$, onda kvadrat od $L^2$ norme je kao $M^2(t\sqrt{a})^d$ koja mora biti nezavisna od $t$, gdje je

$$M^2(t\sqrt{a})^d \approx \int e^{-a|x|^2/2}dx \sim a^{-d/2},$$

što implicira $M^2 \sim (at)^{-d}$.

**Primjer 2.** *Blisko povezan primjer ilustruje širenje oscilatornih impulsa. Neka je* $f(x) = e^{ix\eta}e^{-i|x|^2/2}$ *sa* $\eta \in \mathbb{R}^d$.

Onda $\mathcal{F}f(\xi) = e^{-|\xi-\eta|^2/2}$ i

$$\hat{u}(t) = e^{-it|\xi|^2}e^{-|\xi-\eta|^2/2}$$

$$= e^{-it((\xi-\eta)^2+2(\xi-\eta)\eta+\eta^2)}e^{-(\xi-\eta)^2/2} \equiv \psi(t, \xi - \eta). \tag{40}$$

Zatim je $u = e^{ix\eta}v$ gdje je $\hat{v} \equiv \psi(t, \xi) = e^{-it(\xi^2+2\xi\eta+\eta^2)}e^{-\xi^2/2}$. Faktor $e^{-i2t\xi\eta}$ takođe odgovara translaciji

$$v = \tau_{2\eta t}w$$

gdje je

$$\hat{w} = e^{-it|\eta|^2}e^{-(1+2it)\xi^2/2}.$$

Pošto je $\hat{w}$ glatka, $w = \mathcal{F}^{-1}\hat{w} = \mathcal{F}\hat{w}$ je data kao u Lemi 6. iz dijela 5.2.2.

$$w = e^{-it|\eta|^2}(1 + 2it)^{-d/2}e^{-x^2/(2(1+2it))}.$$

Onda je

$$u = e^{i\eta(x-\eta t)}(1 + 2it)^{-d/2}e^{-(x-2\eta t)^2/(2(1+2it))}. \tag{41}$$

Neka je $g(t, x)$ rješenje za $\eta = 0$, tako da je $g$ proširenje Gausove funkcije iz Primjera 1. Onda je $u = e^{i\eta(x-\eta t)}g(x - 2\eta t)$ proizvod rješenja ravnog talasa sa faznom brzinom $\eta$ i proširenja pulsa translacijom sa grupnom brzinom $2\eta t$. Primjetimo da je fazna brzina sporija od grupne brzine pa izgleda da puls prestiže površinski talas. Primjetimo i da brzina proširenja zavisi od frekvencije pulsa. Ovo daje drugi pogled na širenje Gausovih pulseva iz Primjera 1. Dijelovi različitih frekvencija se pomjeraju pri različitim brzinama što razbija talas na dijelove. Analogno fenomen objašnjava razdvajanje snopa bijele svjetlosti u boje uz pomoć prizme. Razdvajanje na dijelove lokalnih talasa i separacija prema frekvencijama su fenomen zvani disperzija.

Interpretacija impulsa (30) predlaže da je impuls $\approx \eta$, pošto je Furijeova transformacija lokalizovana blizu $\eta$. Ako je impuls jednak proizvodu mase i brzine onda masa mora biti jednaka $\frac{1}{2}$, pošto je brzina jednaka $2\eta$. Ovo ponovo potvrđuje fizičku interpretaciju uvodnog teksta. Jednačina za česticu mase $m$ je $u_t = (i/2m)\triangle u$.

Operator $f \mapsto u(t, \cdot)$ se naziva propagator i označen je sa $S(t)$ gdje $S$ označava rješenje. Definisan je za svako $t \in \mathbb{R}$. Za svako $t$, $S(t)$ je neprekidno linearno preslikavanje iz $\mathcal{S}$ u njega samog i dato je sa formulom $S(t) = \mathcal{F}^{-1}e^{-it|\xi|^2}\mathcal{F}$.

**Napomena 3.** *Šredingerovu jednačinu u ovom radu rješavamo samo na prostoru $\mathcal{S}$ zato što je gust u prostoru temperiranih distribucija tj. na prostorima Soboljeva.*

# 9 Biografija

Nataša Tešić je rođena 27. oktobra 1995. godine u Bijeljini. Završila je Gimnaziju "Filip Višnjić" u Bijeljini, opšti smjer, 2014. godine kao odličan učenik. Iste godine upisuje Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu, smjer Matematika (modul Matematika finansija). Zaključno sa septembarskim ispitnim rokom 2017. godine položila je sve predviđene ispite, a potom upisuje master studije na istom fakultetu, smjer Primjenjena matematika, Matematika finansija. Položila je sve ispite predviđene nastavnim planom i programom zaključno sa aprilskim ispitnim rokom 2019. godine i time stekla uslov za odbranu master rada.

# Literatura

[1] A.Messiah, Quantum Mechanics, vol. 1, trans. G. Temmer, Interscience, New York, 1961.

[2] Jeffrey Rauch, Partial differential equations, Graduate Texts in Mathematics, vol. 128, Springer-Verlag, New York, 1991.

[3] G. B. Whitham, Linear and Nonlinear Waves, Wiley New York, 1974.

[4] Jovan Cvetić, Talasi, Beograd, 2003.

[5] Gustav Holzegel, Partial Differential Equations, Schrodinger and Heat Equation, 2014

[6] Jens Gerlach Christensen, Uncertainty Principles, University of Copenhagen, 2003

[7] B. Zwiebach, Equations for a wavefunction, MIT Quantum Physics I (Lecture 5), 2016

UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

| | |
|---|---|
| Redni broj:<br>**RBR** | |
| Identifikacioni broj:<br>**IBR** | |
| Tip dokumentacije:<br>**TD** | Monografska dokumentacija |
| Tip zapisa:<br>**TZ** | Tekstualni štampani materijal |
| Vrsta rada:<br>**VR** | Master rad |
| Autor:<br>**AU** | Nataša Tešić |
| Mentor:<br>**ME** | dr Marko Nedeljkov |
| Naslov rada:<br>**NR** | Šredingerova jednačina |
| Jezik publikacije:<br>**JP** | srpski (latinica) |
| Jezik izvoda:<br>**JI** | s/en |
| Zamlja publikovanja:<br>**ZP** | Republika Srbija |
| Uže geografsko područje:<br>**UGP** | Vojvodina |
| Godina:<br>**GO** | 2019. |
| Izdavač:<br>**IZ** | Autorski reprint |
| Mjesto i adresa: | Departman za matematiku i informatiku, |

| | |
|---|---|
| **MA** | Prirodno-matematički fakultet,<br>Univerzitet u Novom Sadu, Trg Dositeja Obradovića 4 |
| Fizički opis rada:<br>**FOR** | (8/41/7/0/0/0/0)<br>(brojpoglavlja/strana/lit.citata/tabela/slika/grafika/priloga) |
| Naučna oblast:<br>**NO** | Matematika |
| Naučna disciplina:<br>**ND** | Primjenjena matematika |
| Predmetne odrednica,<br>ključne riječi:<br>(**PO**, **UDK**) | Šredingerova jednačina, kvantna mehanika, parcijalne diferencijalne jednačine, Hajzenbergov princip neodređenosti, interpretacija talasne funkcije |
| Čuva se:<br>**ČS** | Biblioteka Departmana za matematiku i informatiku, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu |
| Važna napomena:<br>**VN** | nema |
| Izvod (IZ): | Problem kojim se bavimo je pronalaženje položaja čestice. Prema klasičnoj mehanici svaka čestica ima dobro definisanu poziciju u svakom trenutku. Ali prema kvantnoj mehanici to nije slučaj. |

Dokazuje se da je Hajzenbergov princip tačan, to jeste da su disperzije impulsa i položaja čestice male. Hajzenbergov princip neodređenosti nam govori da je nemoguće odrediti istovremeno tačan položaj i brzinu neke čestice. Najbolje što možemo u određivanju položaja čestice je da koristimo raspodjelu vjerovatnoće. Kako bismo to uradili koristimo talasnu funkciju. Ovaj master rad se bavi rješavanjem linearne Šredingerove jednačine, кoja opisuje evoluciju talasne funkcije slobodne čestice u kvantnoj mehanici. Pokazuje se da postoji rješenje te jednačine sa početnim uslovima u Švarcovom prostoru kao i da je to rješenje jedinstveno.

Datum prihvatanja teme od strane NN veća:
**DP**
17.09.2019.

Datum odbrane:
DO

Članovi komisije:
**KO**

Predsednik: dr Srboljub Simić, redovni profesor, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu

Član: dr Ivana Vojnović, docent, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu

| | |
|---|---|
| Član: | dr Marko Nedeljkov, redovni profesor, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, mentor |

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCES
KEY WORDS DOCUMENTATION

| | |
|---|---|
| Accession number: **ANO** | |
| Identification number: **INO** | |
| Document type: **DT** | Monograph type |
| Type of record: **TR** | Textual printed material |
| Contents code: **CC** | Master's thesis |
| Author: **AU** | Nataša Tešić |
| Mentor: **ME** | Dr Marko Nedeljkov |
| Title: **TI** | Schrodinger equation |
| Language of text: **LT** | Serbian (Latin) |
| Language of abstract: **LT** | s /en |
| Country of publication: **CP** | Republic of Serbia |
| Locality of publication: **LP** | Vojvodina |
| Publication year: **PY** | 2019. |
| Publisher: **PU** | author's reprint |

| | |
|---|---|
| Publ. place: **PP** | Novi Sad, Department of Mathematics and Informatics, Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4 |
| Physical description: **PD** | (8/41/7/0/0/0/0) |
| Scientific field: **SF** | Mathematics |
| Scientific discipline: **SD** | Applied mathematics |
| Subject Key words: **SKW** | Schrodinger equation, quantum mechanics, partial differential equations, Heisenberg uncertainty principle, interpretaion of wavefunction |
| Holding data: **HD** | The Library of the Department of Mathematics and Informatics, Faculty of Sciences, University of Novi Sad |
| Note: **N** | |
| Abstract (**AB**): | The problem we are dealing with is finding the position of the particle. According to classical mechanics, each particle has a well-defined position at all times. But according to quantum mechanics, this is not the case. It is proved that the Heisenberg principle is correct, that is, the dispersions of the momentum and position of a particle are small. The Heisenberg uncertainty principle tells us that it is impossible to determine at the same time the exact position and velocity of a particle. The best we can do in determining the position of a particle is to use a probability distribution. To do this we use a wave function. This master thesis deals with solving the linear Schrodinger equation, which describes the evolution of the free-particle wave function in quantum mechanics. It is shown that there is a |

solution of this equation with initial conditions in the Schwartz space, and that this solution is unique.

| | |
|---|---|
| Accepted on Scientific board on: **AS** | 17.09.2019. |
| Defended: **DE** | |
| Thesis Defend board: **DB** | |
| President: | Srboljub Simić PhD, full professor, Faculty of Sience, University of Novi Sad |
| Member: | Ivana Vojnović PhD, assistant professor , Faculty of Sience, University of Novi Sad |
| Member: | Marko Nedeljkov PhD, full professor, Faculty of Sience, University of Novi Sad |