TEK TEORIJA ODLUČUJE O TOME ŠTA SE MOŽE POSMATRATI

ALBERT AJNŠTAJN

MODELNI POTENCIJALI ZA DVOATOMSKE MOLEKULE

Na ovom mestu želim da izrazim veliku zahvalnost dr. Bratislavu S. Tošiću redovnom profesoru Prirodnomatematičkog fakulteta u Novom Sadu, i mentoru ovoga rada, za ljubaznost prilikom izbora teme, i pomoć, prilikom rada, koja je ne retko prelazila granice uobičajenog.

U V O D

Cilj ovog diplomskog rada je da se da prikaz nekih najkarakterističnijih jednačina koje se pojavljuju u problemima mehanike i fizike uopšte. Osim toga, biće data procedura rešavanja nekih uopštenih formi ovih jednačina. Pored ovoga, biće detaljno analizirane mogućnosti Laplasovih transformacija u postupku rešavanja diferencijalnih jednačina drugog reda. Takodje će biti izložena dva simbolična metoda za rešavanje diferencijalnih jednačina, od kojih jedan koristi diferencijalni i multiplikativni operator, a drugi operator translacije.

Fizičke aplikacije ovih računa odnose se, uglavnom, na molekulske spektre i različite modelne potencijale iz teorije dvoatomskih molekula.

I GLAVA

U ovoj glavi će biti razmotrene neke specijalne diferencijalne jednačine, koje se često javljaju u praksi, tj. na koje se mogu svesti mnogi problemi u fizici. Sve ove jednačine pripadaju klasi linearnih diferencijalnih jednačina. Umesno je upitati se, zbog čega su toliko važne linearne diferencijalne jednačine. RIČARD P. FEJNMAN u /9/ daje vrlo fini odgovor: "Linearne diferencijalne jednačine su toliko značajne, zbog toga što su osnovni fizički zakoni vrlo često linearni. Npr. Maksvelove jednačine u elektrodinamici su linearne jednačine. Veliki zakoni kvantne mehanike, koliko su nam poznati, takodje se svode na linearne jednačine. Postoji još jedan veliki razlog: linearne jednačine umemo da rešavamo."

Jednačine koje obradjujemo mogu se napisati u opštem obliku

$$Ly + \lambda \rho(x) y = 0 \qquad \rho(x) > 0 \quad \lambda = const$$

gde je,

$$Ly = \frac{d}{dx}\left(K(x)\frac{dy}{dx}\right) - q(x)y \qquad K(x) \geqslant 0 \quad q(x) \geqslant 0$$

Naprimer, za nekoliko diferencijalnih jednačina koje ćemo razmotriti

1. Gausova (hipergeometrijska) jednačina

$$K(x) = x^{\gamma}(1-x)^{\alpha+\beta+1-\gamma}$$
$$q(x) = 0$$
$$\lambda = -\alpha\beta$$
$$\rho(x) = x^{\gamma-1}(1-x)^{\alpha+\beta-\gamma}$$

2. Beselova jednačina

$K(x) = x$

$q(x) = \frac{p^2}{x}$

$\lambda = 1$

$\rho(x) = x$

3. Lagerova jednačina

$K(x) = x$

$\rho(x) = \varepsilon x + 1$

$\lambda = 1$

$q(x) = \frac{s^2}{4x}$

4. Ermit - Veberova jednačina

$K(x) = 1$

$\rho(x) = 1$

$\lambda = \alpha$

$q(x) = \beta^2 x^2$

5.

a) Asocirane Ležandrova jednačina

$K(x) = 1 - x^2$

$q(x) = \frac{m^2}{1-x^2}$

$\rho = 1$

$\lambda = 1$

b) Obična Ležandrova jednačina (dobijamo za $m=0$ iz asociranih Ležandrovih jednačina)

$K(x) = 1 - x^2$

$q(x) = 0$

$\rho(x) = 1$

$\lambda = 1$

6. Vitekerova jednačina

$K(x) = 1$

$q(x) = -\frac{m^2}{x^2} + \frac{K}{x}$

$\lambda = \frac{1}{4}$

$\rho(x) = 1 - \frac{1}{x^2}$

§1. Gausova hipergeometrijska funkcija

Izlaganje ćemo započeti sa tkz. hipergeometrijskim funkcijama. Interesantno je ovde spomenuti mišljenje F. G. TRIKOMI-a izneto na kongresu italijanskog matematičkog društva u Torinu 1956 godine /2/, da su hipergeometrijske funkcije te koje su se do sada pokazale kao najmoćnije od svih sa gledišta fizičko-tehničkih primena. "Šta više, čuje se katkada da su sve funkcije od efektivne važnosti za primenu, hipergeometrijske funkcije".

One se javljaju kao rešenja diferencijalne jednačine oblika

$$x(1-x)\frac{d^2y}{dx^2}+\left[\gamma-(\alpha+\beta+1)x\right]\frac{dy}{dx}-\alpha\beta y=0 \qquad (1.1.)$$

što sledi iz glave I tačke 1.

Ova se jednačina rešava pomoću potencijalnog reda

$$y=\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu x^{\nu+k} \qquad (1.2)$$

Zamenom u jednačinu (1.1) izraza (1.2) i posle sredjivanja dobijamo

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}(\nu+k)(\nu+k-1+\gamma)a_\nu x^{\nu+k-1}\equiv\sum_{\nu=0}^{\infty}(\nu+k+\alpha)(\nu+k+\beta)\, x^{\nu+k} \qquad (1.3)$$

Ovde će biti detaljnije obradjena procedura rešavanja pomoću redova tako da se nadalje na tome nećemo zadržavati.

U sumi s leve strane stavimo da je $\nu-1=\mu$, a u sumi s desne strane stavimo formalno da je $\nu=\mu$

pa (1.3) postaje

$$K(K+\gamma-1)a_0 x^{K-1} + \sum_{\mu=0}^{\infty}(\mu+K+1)(\mu+K+\gamma)a_{\mu+1} x^{\mu+K} \equiv \tag{1.4}$$

$$\equiv \sum_{\mu=0}^{\infty}(\mu+K+\alpha)(\mu+K+\beta)a_\mu x^{\mu+K}$$

Sada je očigledno da će identitet (1.4) za $a_0 \neq 0$ biti zadovoljen za

$$K=0 \tag{1.5}$$

$$K=1-\gamma \tag{1.6}$$

Rekurentni obrazac

$$a_{\mu+1}=\frac{(\mu+K+\alpha)(\mu+K+\beta)}{(\mu+K+1)(\mu+K+\gamma)}a_\mu \tag{1.7}$$

za slučaj (1.5) postaje

$$a_{\mu+1}=\frac{(\mu+\alpha)(\mu+\beta)}{(\mu+1)(\mu+\gamma)}a_\mu \tag{1.8}$$

Za $\mu=n$ (1.8) postaje

$$a_n=\frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\dots(\alpha+n-1)\,\beta(\beta+1)(\beta+2)\dots(\beta+n-1)}{1\cdot 2\cdot 3\dots n\;\;\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)\dots(\gamma+n-1)}a_0 \tag{1.9}$$

ili izraženo preko gama funkcija Γ

$$a_n=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}\;\frac{\Gamma(n+\alpha)\,\Gamma(n+\beta)}{n!\;\Gamma(n+\gamma)}a_0 \tag{1.10}$$

Na osnovu (1.2), (1.5) i (1.10) možemo pisati da je prvi partikularni integral Gausove jednačine (1.1)

$$y_1 = F(\alpha,\beta,\gamma;x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \frac{\Gamma(n+\alpha)\,\Gamma(n+\beta)}{n!\,\Gamma(n+\gamma)} x^n \qquad (1.11)$$

Dobijeni izraz se naziva Gausov hipergeometrijski red, ili Gausova hipergeometrijska funkcija. On konvergira u intervalu $|x|<1$. To se može proveriti na osnovu D'Alamberovog kriterijuma konvergencije

$$|x| < \left\{ \lim_{n\to\infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| \right\}^{-1} \qquad (1.12)$$

Sada ćemo analizirati slučaj (1.6). Rekurentni obrazac (1.7) postaje

$$a_{\mu+1} = \frac{(\mu+\alpha+s)(\mu+\beta+s)}{(\mu+1)(\mu+1+s)} a_\mu \qquad (1.13)$$

gde smo uveli oznaku $1-\gamma = s$.

Opšti član izraza (1.13), izražen preko gama funkcija Γ, ima oblik

$$a_n = \frac{\Gamma(s+1)}{\Gamma(\alpha+s)\Gamma(\beta+s)} \frac{\Gamma(\alpha+s+n)\,\Gamma(\beta+s+n)}{n!\,\Gamma(s+1+n)} a_0 \qquad (1.14)$$

Na osnovu (1.2) i (1.14) i činjenice da je $s=1-\gamma$ dobijamo drugi partikularni integral jednačine (1.1.)

$$y_2=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(2-\gamma)\quad\Gamma(\alpha+1-\gamma+n)\,\Gamma(\beta+1-\gamma+n)}{\Gamma(\alpha+1-\gamma)\,\Gamma(\beta+1-\gamma)\quad n!\quad\Gamma(2-\gamma+n)}\,x^{n+1-\gamma}\equiv$$

$$\equiv x^{1-\gamma}F(\alpha+1-\gamma,\beta+1-\gamma,2-\gamma;x) \tag{1.15}$$

Za $\gamma=1$, y_1 i y_2 se poklapaju. Pošto radijus konvergencije $|x|<1$ ne zavisi od parametara α,β i γ, to je on isti i za y_2.

U daljem tekstu biće izražene neke elementarne funkcije preko Gausovih hipergeometrijskih funkcija, što je dokaz njihove velike važnosti i značaja.

$$(1+x)^n=F(-n,b,b;-x) \tag{1.16}$$

$$\ln(1+x)=xF(1,1,2;-x) \tag{1.17}$$

$$e^x=\lim_{b\to\infty}F(1,b,1;\tfrac{x}{b}) \tag{1.18}$$

Na ovom mestu je zgodno uvesti tkz. konfluentnu (izrodjenu, degenerisanu) hipergeometrijsku funkciju koja se javlja kao rešenje jednačine

$$x\frac{d^2y}{dx^2}+(\gamma-x)\frac{dy}{dx}-\alpha y=0 \tag{1.19}$$

Ova se jednačina može rešavati pomoću potencijalnog reda, analogno jednačini (1.1). Njena rešenja su

$$y_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(\gamma+n)} \frac{x^n}{n!} = F(\alpha,\gamma,x) \qquad (1.20)$$

$$y_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha-\gamma+1+n)}{\Gamma(\alpha-\gamma+1)} \frac{\Gamma(2-\gamma)}{\Gamma(2-\gamma+n)} \frac{x^{1-\gamma+n}}{n!} = \qquad (1.21)$$

$$= x^{1-\gamma} F(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma; x)$$

Ove funkcije su vrlo značajne, jer uključuju u sebe mnoge funkcije koje su od fizičkog interesa.

a) Beselove funkcije
b) Rešenje Šedingerove jednačine za kulonovski potencijal (polinomi Lagera)
c) Rešenje Šedingerove jednačine za potencijal harmonijskog oscilatora (polinomi Ermita)
d) Integrale Frenela iz klasične optike

i mnoge druge.

Smenom $y = x^{-\gamma/2} e^{\frac{x}{2}} W(x)$, jednačina (1.19) se transformiše u Vitekerovu jednačinu

$$\frac{d^2W}{dx^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{k}{x} + \frac{\frac{1}{4} - m^2}{x^2}\right)W = 0 \qquad (1.22)$$

čija su rešenja tkz. Vitekerove funkcije.

U daljem tekstu ćemo se više koristiti Vitekerovim funkcijama (koje su tabelirane, jer na osnovu izloženog vidimo da se konfluentna hipergeometrijska funkcija može uvek svesti na Vetekerovu), a samo ćemo naglasiti vezu izmedju pojedinih polinoma i izrodjenih hipergeometrijskih funkcija.

§ 2. Beselova jednačina

Besel je naišao na ove funkcije 1824 godine, proučavajući jedan problem dinamičke astronomije. One se inače javljaju kao specijalni slučajevi konfluentnih hipergeometrijskih funkcija.

Diferencijalnu jednačinu čija su rešenja Beselove funkcije možemo naći na osnovu glava I tačka 2 i ona je oblika

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2}+x\frac{dy}{dx}+(x^2-p^2)y=0 \qquad (2.1)$$

gde je p bilo kakav broj.

Rešenje tražimo u obliku potencijalnog reda

$$y=\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu x^{\nu+k} \qquad (2.2)$$

Analognim računom kao u § 1. nalazimo rekurentni obrazac

$$a_{\mu+1}=\frac{-1}{(\mu+k+2+p)(\mu+k+2-p)}\,a_\mu \qquad (2.3)$$

s tim što je $a_0 \neq 0 \quad a_1 = 0$

$$K_1 = p \tag{2.4}$$

$$K_2 = -p \tag{2.5}$$

Postoji još jedna mogućnost $a_0 = 0 \quad a_1 \neq 0$

$$K_1 = p-1 \tag{2.6}$$

$$K_2 = -p-1 \tag{2.7}$$

Neposrednim računom se može dokazati da obe varijante dovode do istih rezultata. Dalje ćemo raditi samo sa varijantom (2.4) ÷ (2.5).

U slučaju (2.4), opšti član, izražen preko gama funkcija, ima oblik

$$a_{2n}^{(1)} = \frac{(-1)^n \; \Gamma(1+p)}{2^{2n}\, n!\, \Gamma(n+1+p)} a_0^{(1)} \tag{2.8}$$

$$a_{2n+1}^{(1)} = 0$$

Iz (2.2) i (2.8), dobijamo prvi partikularni integral jednačine (2.1)

$$y_1 = J_p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\, \Gamma(n+1+p)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n+p} \tag{2.9}$$

gde je stavljeno da je $\Gamma(1+p)2^p a_0^{(1)} = 1$

Rešenje J_p dato formulom (2.9) naziva se Beselova funkcija prvog reda. Red konvergira u intervalu $-\infty < x < \infty$, što se može pokazati koristeći D'Alamberov kriterijum za konvergenciju.

U slučaju (2.5) vidimo da je struktura rekurentnog obrasca ista, s tim što je ovde izvršena zamena $(1+p) \to (1-p)$ i odatle odmah možemo pisati drugi partikularni integral Beselove jednačine

$$y_2 = J_{-p}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\,\Gamma(n+1-p)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n-p} \qquad (2.10)$$

gde je stavlgeno da je $\Gamma(1-p)2^{-p} a_0^{(2)} = 1$

I ovaj red konvergira u intervalu $-\infty < x < \infty$

Veza izmedju Beselovih funkcija prve vrste i konfluentnih hipergeometrijskih funkcija je

$$J_p(x) = \frac{1}{\Gamma(p+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^p e^{-ix} F\left(\frac{1}{2}+p, 1+2p, 2ix\right) \qquad (2.11)$$

Ukoliko p nije ceo broj, funkcije J_p i J_{-p} su linearno nezavisne i opšte rešenje Beselove jednačine (2.1) je

$$y(x) = C_1 J_p(x) + C_2 J_{-p}(x) \qquad (2.12)$$

Ako je pak p ceo broj, rešenja J_p i J_{-p} su linearno zavisna i izmedju njih postoji veza

$$J_{-p}(x) = (-1)^p J_p(x) \qquad (2.13)$$

Ako je indeks p polucelobrojan, onda se Beselove funkcije izražavaju preko elementarnih funkcija.

Rekurentni obrasci za dobijanje Beselovih funkcija polucelobrojnog indeksa imaju oblik

$$(x^{-1}\hat{D})^{\ell}\left[x^{m+1/2} J_{m+1/2}(x)\right] = x^{m+1/2-\ell} J_{m+\frac{1}{2}-\ell} \qquad (2.14)$$

$$(x\hat{D}^{-1})^{\ell}\left[x^{m+1/2} J_{m-1/2}(x)\right] = x^{m-1/2+\ell} J_{m-1/2+\ell} \qquad (2.15)$$

gde je,

$$\hat{D} = \frac{d}{dx} \qquad (x^{-1}\hat{D})^{\ell} = \overbrace{\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\cdots\frac{1}{x}\frac{d}{dx}}^{\ell\text{-puta}}$$

$$\hat{D}^{-1} = \int dx \; (C_1 = 0) \quad (x\hat{D}^{-1})^{\ell} = \underbrace{x\hat{D}^{-1}x\hat{D}^{-1}\cdots x\hat{D}^{-1}}_{\ell\text{-puta}}$$

Izmedju Beselovih funkcija prve vrste postoje relacije

$$J_n'(x) = J_{n-1}(x) - \frac{n}{x} J_n(x) \qquad (2.16)$$

$$J_n'(x) = \frac{1}{2}\left[J_{n-1}(x) - J_{n+1}(x)\right] \qquad (2.17)$$

$$J_n'(x) = \frac{n}{x} J_n(x) - J_{n+1}(x) \qquad (2.18)$$

$$J_2(x) - J_0(x) = 2\,J_0''(x) \tag{2.19}$$

$$J_2(x) = J_0''(x) - \frac{1}{x} J_0'(x) \tag{2.20}$$

$$J_0'(x) = -J_1(x) \tag{2.21}$$

$$\frac{d}{dx}\left(x^n J_n(x)\right) = x^n J_{n-1}(x) \tag{2.22}$$

U literaturi se uvode još i funkcije (druge Beselove ili Nojmanove)

$$Y_p(x) = \frac{\cos p\pi\, J_p(x) - J_{-p}(x)}{\sin px} \tag{2.23}$$

koje su uvek drugo nezavisno rešenje jednačine (2.1).

Poznate su još i Henkelove funkcije prve, i druge vrste, koje su linearna kombinacija Beselove i Nojmanove funkcije.

$$H_p^{(1)}(x) = J_p(x) + i\,Y_p(x) \tag{2.24}$$

$$H_p^{(2)}(x) = J_p(x) - i\,Y_p(x) \tag{2.25}$$

Ove funkcije nisu formalne matematičke konstrukcije, već su našle i efektivnu primenu (npr. u kvantnoj teoriji polja. Vidi RP FEJMAN "The theory of fundamental process es" Njujork 1961).

Pomoću Beselovih funkcija mogu se definisati još neke nove funkcije, ali one nisu od interesa za ovaj rad.

§3. Ermit - Veberova jednačina

Na osnovu glava I,tačka 4,ova jednačina ima oblik

$$\frac{d^2y}{dx^2} + (\alpha - \beta^2 x^2)y = 0 \tag{3.1}$$

Ova jednačina nije pogodna za neposredno rešavanje pomoću potencijalnog reda,i da bi smo je napisali u obliku u kome će se ona moći rešavati pomoću potencijalnog reda,moramo je na odgovarajući način transformisati. U tom cilju uvodimo smenu funkcije

$$y(x) = z(x)\, e^{-1/2\,\beta x^2} \tag{3.2}$$

pa jednačina (3.1) u tom slučaju postaje

$$\frac{d^2z}{dx^2} - 2\beta x \frac{dz}{dx} + (\alpha - \beta) z = 0 \tag{3.3}$$

Da bi smo jednačinu (3.3) još više uprostili,u smislu toga da umesto dva parametra α i β figuriše samo jedan,uvodimo smenu argumenta

$$x = a\xi \qquad a = const \tag{3.4}$$

i birajući da je $a^2\beta = 1$, onda preko α i β figuriše samo jedan parametar

$$\frac{d^2z}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dz}{d\xi} + \left(\frac{\alpha}{\beta} - 1\right) z = 0 \tag{3.5}$$

Jednačinu (3.5) rešavamo pomoću potencijalnog reda

$$Z=\sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \xi^{\nu+K} \tag{3.6}$$

imajući u vidu da je rešenje Ermit - Veberove jednačine (3.1) povezano sa rešenjem jednačine (3.5) na sledeći način

$$y=e^{-\frac{1}{2}\xi^2} Z(\xi) \qquad \xi = x\sqrt{\beta} \tag{3.7}$$

Analogno kao i u predhodnim slučajevima, imamo dve mogućnosti

$a_0 \neq 0 \quad a_1 = 0 \quad K = 1$

$$a_{\mu+2} = 2\frac{\mu+1-S}{(\mu+2)(\mu+3)} a_\mu \tag{3.8}$$

i $a_0 = 0 \quad a_1 \neq 0 \quad K = -1$

$$a_{\mu+2} = 2\frac{\mu-1-S}{\mu(\mu+1)} a_\mu \tag{3.9}$$

$$\mu = 0,1,2,\ldots$$

U slučaju (3.8) rešenje je dato u obliku

$$Z_1 = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \Gamma\left(\frac{S}{2}-\nu\right)}{(2\nu+1)!\,\Gamma(S-2\nu)} \xi^{2\nu+1} \tag{3.10}$$

a u slučaju (3.9) dobijamo drugo partikularno rešenje

$$Z_2 = \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^{\nu+1} \frac{\Gamma\left(\frac{s+1}{2} - \nu\right)}{(2\nu)!\,\Gamma(s-2\nu+1)} \xi^{2\nu} \qquad (3.11)$$

gde su uvedene oznake

$$\lambda = \frac{\alpha}{\beta} \qquad s = \frac{\lambda - 1}{2}$$

Na osnovu D'Alamberovog kriterijuma konvergencije, može se pokazati da partikularni integrali (3.10) i (3.11) konvergiraju za $-\infty < \xi < \infty$

Na osnovu uvedenih oznaka i (3.7) možemo pisati opšte rešenje Ermit - Veberove jednačine

$$y = \left\{ C_1 Z_1\left(\frac{\alpha/\beta + 1}{2}, \beta, x\sqrt{\beta}\right) + C_2 Z_2\left(\frac{\alpha}{2\beta}, \beta, x\sqrt{\beta}\right) \right\} e^{-1/2\beta x^2} \qquad (3.12)$$

Ako jednačinu (3.5) napišemo u obliku

$$\frac{d^2 z}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dz}{d\xi} + 2nz = 0 \qquad (3.13)$$

(tkz. Ermit -Čebiševa jednačina) gde je, $s = \frac{\alpha/\beta - 1}{2} = n$ $n = 0, 1, 2 \ldots$ onda je uvek jedan njen partikularni integral polinom stepena n . Ti polinomi se nazivaju Ermitovi polinomi (Ermit ih je definisao 1864 godine) i oni se definišu kao

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \qquad (3.14)$$

$$H_{2m}(\xi) = \sum_{\nu=0}^{m} \frac{(-1)^{m-\nu}}{(m-\nu)!} \frac{(2m)!}{(2\nu)!} (2\xi)^{2\nu} = e^{\xi^2} \frac{d^{2m}}{d\xi^{2m}} e^{-\xi^2} \qquad (3.15)$$

$$H_{2m+1}(\xi)=-e^{\xi^2}\frac{d^{2m+1}}{d\xi^{2m+1}}e^{-\xi^2}=\sum_{\nu=0}^{m}\frac{(-1)^{m-\nu}}{(m-\nu)!}\frac{(2m+1)!}{(2\nu+1)!}(2\xi)^{2\nu+1} \qquad (3.16)$$

Polinomi definisani u (3.15) i (3.16) izražavaju se preko konfluentnih hipergeometrijskih funkcija na sledeći način

$$H_{2n}=(-1)^n\frac{(2n)!}{2^n n!}F\left(-n,\frac{1}{2},\frac{x^2}{2}\right) \qquad (3.17)$$

$$H_{2n+1}=(-1)^n\frac{(2n+1)!}{2^n n!}xF\left(-n,\frac{3}{2},\frac{x^2}{2}\right) \qquad (3.18)$$

Na ovom mestu bilo bi zgodno da se uradi jedan primer iz prakse. Naime, znamo da potencijalna energija mnogih fizičkih sistema ima minimum u nekoj tački prostora. Razvijajući potencijalnu energiju u red oko te tačke

$$U=U(0)+x\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_0+\frac{1}{2}x^2\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_0+\cdots \qquad (3.19)$$

gde je x rastojanje od tačke mirovanja, koja se definiše uslovom $\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_0=0$. Ako čestica mase m vrši male oscilacije oko tačke ravnoteže, onda u redu možemo zadržati samo dva prva člana. Energiju sistema ćemo računati od vrednosti .
Tada hamiltonijan postaje

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}x^2 \qquad (3.20)$$

gde je, $K=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_0$. Pretpostavićemo da se oblik potencijalne energije očuvava i za velike vrednosti x (idealizovan realni sistem).

Klasične jednačina kretanja čestice je

$$x(t)=A\cos(\omega t+\beta) \qquad \omega=\sqrt{\frac{K}{m}} \tag{3.21}$$

U tom slučaju se kaže da čestica vrši harmonijsko kretanje oko ravnotežnog položaja i odgovarajući sistemi se nazivaju harmonijskim oscilatorima.

Iz (3.20) i (3.21) se dobija klasični izraz za energiju harmonijskog oscilatora

$$\begin{gathered} E=\frac{1}{2}mA^2\omega^2=m\omega^2\langle x^2\rangle_{KL.} \\ \langle x^2\rangle_{KL}=A^2\langle\cos^2(\omega t+\beta)\rangle=\frac{A^2}{2} \end{gathered} \tag{3.22}$$

Sada potražimo stacionarne stanje harmonijskog oscilatora metodima kvantne mehanike. U tom slučaju hamiltonijan ima oblik

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{3.23}$$

a stacionarna Šedingerova jednačina za ovaj slučaj postaje

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi(x)=0 \tag{3.24}$$

Ovo je očigledno Ermit - Veberova jednačina. Uvodjenjem smene $\frac{2mE}{\hbar^2}=\alpha$ $\frac{m\omega}{\hbar}=\beta$ i $\xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, dobijamo jednačinu

$$\frac{d^2 z}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dz}{d\xi} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega}-1\right)z = 0 \qquad (3.25)$$

Na osnovu predhodnih razmatranja jednačina (3.25) će imati konačno rešenje kad $\xi \to \pm\infty$, tj. ono će biti polinom stepena n, samo ako je

$$\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-1\right) = 2n \qquad (3.26)$$

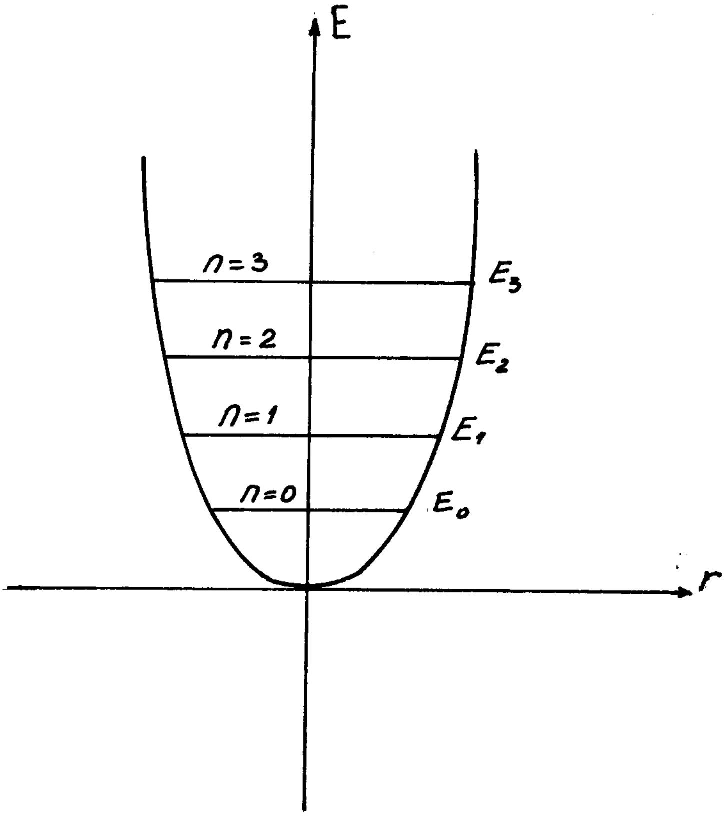
odakle dobijamo izraz za energiju linearnog harmonijskog oscilatora

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad (3.27)$$

Iz (3.27) vidimo da je:

a) spektar harmonijskog oscilatora je diskretan i nedegenerisan,
b) spektar je ekvidistantan.

Izraz $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ se naziva nulta energija harmonijskog oscilatora i ona je povezana sa Hajzenbergovim relacijama neodredjenosti, tj. sa talasnim svojstvima čestice. Rezultat, da je energija linearnog harmonijskog oscilatora diskretna je vrlo važan i u procesu nastajanja kvantne mehanike je odigrao veliku ulogu.



sl. 1.

Na osnovu predhodnog izlaganja znamo da je talasna funkcija oblika

$$\Psi_n(\xi) = C_n \, e^{-1/2\,\xi^2} H_n(\xi) \qquad (3.28)$$

Konstantu C_n odredjuju iz uslova normiranja

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_m \, d\tau = 1 \qquad (3.29)$$

pa je konačno oblik talasne funkcije dat kao

$$\Psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n \, n! \, \pi^{1/2}}} \, e^{-1/2\,\xi^2} H_n(\xi) \qquad (3.30)$$

§4. Problem vodonika i alkalnih metala

U ovom odeljku biće obradjen jedan problem značajan sa fizičkog stanovišta, a u okviru koga će biti razmotrene još dve značajne diferencijalne jednačine, a to su:

a) Asocirana Ležandrova jednačina
b) Lagerova jednačina

koje se često sreću u praksi i čija se rešenja mogu svrstati u hipergeometrijske funkcije /2/.

Problem je značajan, jer se kod vodonika i alkalnih metala, ustvari, javlja problem dva tela, pa se može naći egzaktno rešenje Šedingerove jednačine za ovaj slučaj.

Hamiltonijan za ovaj slučaj je dat kao

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \qquad (4.1)$$

Kako je problem svernosimetričan laplasijan se izražava u sfernim koordinatama

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}\right] \qquad r\in[0,\infty) \qquad (4.2)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\hat{L}_z^2}{\sin^2\theta} \qquad (4.3)$$

$$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\ ; \quad \theta\in[0,\pi] \quad \varphi\in[0,2\pi] \qquad (4.4)$$

Šedingerovu jednačinu za stacionaran slučaj

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2}r^2\Psi + \frac{2mZe^2}{\hbar^2}r = \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}\Psi \quad (4.5)$$

rešavamo tkz. metodom razdvajanja promenljivih, tj. stavljajući da je $\Psi(\theta,\varphi,r)=\alpha(r)\,Y(\theta,\varphi)$ i deleći sa $\alpha(r)\,Y(\theta,\varphi)$, pa dobijamo

$$\frac{r^2\frac{d^2\alpha}{dr^2} + 2r\frac{d\alpha}{dr} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2}r^2 + \frac{2mZe^2}{\hbar^2}r\right)\alpha}{\alpha} = \frac{\hat{L}^2Y}{\hbar^2Y} = a \quad (4.6)$$

$a = const$

Jednačina (4.6) nam daje dve nezavisne jednačine

$$\frac{d^2\alpha}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\alpha}{dr} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2mZe^2}{\hbar^2}\frac{1}{r} - \frac{a}{r^2}\right)\alpha = 0 \quad (4.7.a)$$

$$\hat{L}^2 Y = a\hbar^2 Y \quad (4.7.b)$$

Jednačina (4.7.b) nam, stavljajući $Y(\theta,\varphi)=\beta(\theta)\gamma(\varphi)$, daje nove dve nezavisne jednačine

$$\frac{d^2\beta}{d\theta^2} + \cot g\,\frac{d\beta}{d\theta} + \left(a - \frac{b}{\sin^2\theta}\right)\beta = 0 \quad (4.8.a)$$

$$\frac{d^2\gamma}{d\varphi^2} = -b\gamma \quad (4.8.b)$$

Rešenja jednačine (4.8.b) su

$$\gamma(\varphi) = C_1 e^{i\sqrt{b}\varphi} + C_2 e^{-i\sqrt{b}\varphi} \quad (4.9)$$

Birajući fizički realno rešenje i kako se iz uslova jednoznačnosti talasne funkcije mora promenljivoj φ dati uslov periodičnosti, a posle normiranja $\int_0^{2\pi} |\gamma(\varphi)|^2 = 1$ dobijamo konačno funkciju

$$\gamma(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (4.10)$$

U (4.10) je uvedena smena $\sqrt{b} = m$ $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots$ gde je m magnetni kvantni broj.

Jednačina (4.8.a) posle uvodjenja smene $\cos\theta = x$ postaje

$$(1-x^2)\frac{d^2\beta}{dx^2} - 2x\frac{d\beta}{dx} + \left(a - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\beta = 0 \qquad (4.11)$$

$$x \in [-1, 1]$$

Na osnovu tačke 5.a, glava I, ovo je tkz. asocirana Ležandrova diferencijalna jednačina. Ona se rešava uvodjenjem smene

$$u = (x^2-1)^s \qquad (4.12)$$

gde je, $s^2 = \frac{m^2}{4}$; $s_1 = \frac{m}{2}$ $s_2 = -\frac{m}{2}$. Pošto osnovna jednačina (4.11) zavisi samo od m^2 , onda rešenja koja odgovaraju tima dvema vrednostima s , zadovoljavaju jednu te istu jednačinu, pa medjusobno moraju biti povezane linearnom relacijom, $\theta(m) = C\theta(-m)$ i kad bi smo radili za $s = m \geq 0$, ono bi zbog gornje relacije važilo i za $s = m < 0$

Dakle smena je

$$\beta(x) = (x^2-1)^{\frac{|m|}{2}} Z(x) \qquad (4.13)$$

Jednačina (4.4) je oblika

$$(1-x^2)\frac{d^2 Z}{dx^2} - 2(|m|+1)x\frac{dZ}{dx} + (a-|m|-|m|^2)Z = 0 \qquad (4.14)$$

i nju rešavamo pomoću potencijalnog reda

$$Z = \sum_{\nu=0}^{\infty} C_\nu x^\nu \qquad (4.15)$$

Rekurentni obrazac je dat kao

$$C_{k+2} = \frac{(k+|m|)(k+|m|+1)-a}{(k+1)(k+2)} C_k \qquad (4.16)$$

Traženjem asimptockog rešenja, dolazimo do zaključka da ne možemo uzeti red, već samo polinom, da bi se red presekao mora biti

$$(k+|m|)(k+|m|+1) = l(l+1) \qquad (4.17)$$

gde je, l tkz. orbitalni kvantni broj. Odatle konačno nalazimo da je

$$Z(x) = P_{l-|m|}(x) \qquad (4.18)$$

pa na osnovu (4.12) rešenje jednačine ((4.8.a) je dato kao

$$\beta(x) = C_{\ell m}\,(x^2-1)^{\frac{|m|}{2}}\, P_{\ell-|m|}(x) \qquad (4.19)$$

gde su, $P_{\ell-|m|}(x)$ asocirani polinomi Ležandra. Oni se dobijaju iz običnih Ležandrovih polinoma kao

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) \qquad (4.20)$$

gde je,

$$P_n(x) = \sum_{\nu=0}^{\frac{n}{2}} \frac{(-1)^\nu\,(2n-2\nu)!}{2^n \nu!\,(n-\nu)!\,(n-2\nu)!}\, x^{n-2\nu} \qquad (4.21)$$

Asocirani Ležandrovi polinomi se mogu izraziti preko obične hipergeometrijske funkcije i to kao /1/.

$$P_n^m = \frac{1}{\Gamma(1-m)} \left(\frac{x+1}{x-1}\right)^{\frac{m}{2}} F\left(-n, n+1, 1-m, \tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}x\right)$$

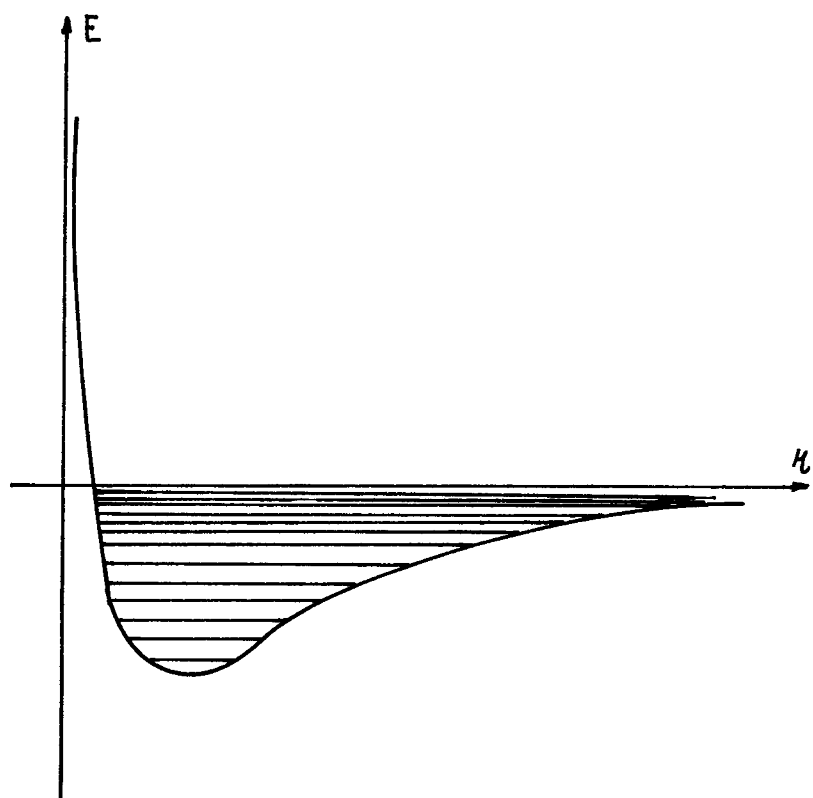
Iz uslova normiranja $\int_{-1}^{1} \beta^2(x)\,dx = 1$ odredjujemo konstantu $C_{\ell m}$ kao

$$C_{\ell m} = \frac{(-1)^{\ell+|m|}}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{2(\ell+|m|)!}} \qquad (4.22)$$

Vraćajući se na stare promenljive i uz uslov da je $Y(\theta,\varphi)=\gamma(\varphi)\beta(\theta)$ nalazimo konačni izraz za sverni deo talasne funkcije

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^{l+|m|}e^{im\varphi}}{2^l\, l!\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}(\sin\theta)^{|m|}\frac{d^{l+|m|}}{d(\cos\theta)^{l+|m|}}(\sin\theta)^{2l} \quad (4.23)$$

Da bi našli ukupnu talasnu funkciju, rešavamo radijalni deo Šedingerove jednačine, tj. jednačine (4.7.a) Ovo je takozvana Lagerova jednačina.



sl.2.

Za ograničeno r (elektron je vezan za atom) mora biti $E<0$, pa zbog toga stavljamo $\frac{2mE}{\hbar^2}=-A^2$

Uvodjenjem smene $r=a\rho$, jednačina (4.7.a) postaje

$$\frac{d^2\alpha}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d\alpha}{d\rho}+\left[-A^2a^2+2Z\frac{me^2}{\hbar^2}a\frac{1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]\alpha=0 \qquad (4.24)$$

Iz tradicionalističkih razloga (da bi se povezalo sa Borovom teorijom) stavlja se da je

$$\frac{me^2}{\hbar^2}a=1 \qquad a=\frac{\hbar^2}{me^2}=r_0=5{,}3\cdot10^{-9}\,cm \qquad (4.25)$$

Odatle nalazimo i da je

$$-A^2a^2=2\frac{E}{E_0} \qquad E_0=\frac{me^4}{\hbar^2}=2{,}72\ eV \qquad (4.26)$$

i uvodjenjem novih smena

$$A^2a^2=-\frac{2E}{E_0}=\kappa^2 \qquad (4.27)$$

(4.24) prelazi u (4.28)

$$\frac{d^2\alpha}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d\alpha}{d\rho}+\left[-\kappa^2+2Z\frac{1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]\alpha=0 \qquad (4.28)$$

Ova jednačina se rešava pomoću smene

$$\alpha(\rho)=Z(\rho)\,e^{-\kappa\rho} \qquad (4.29)$$

i onda se jednačina transformiše u

$$\frac{d^2 Z}{d\rho^2} + 2\left(K + \frac{1}{\rho}\right)\frac{dZ}{d\rho} + \left[2(Z-K)\frac{1}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]Z = 0$$

$$Z = \sum_{\nu=0}^{\infty} C_\nu \rho^{\nu+\gamma} \qquad (4.30)$$

Jednačina (4.30) se rešava pomoću potencijalnog reda, birajući varijantu koja nam omogućava normiranje u nuli $(\gamma = \ell)$ dobijamo rekurentni obrazac

$$C_{s+1} = 2K \frac{s+\ell+1-\frac{Z}{K}}{(s+\ell+1)(s+\ell+2)-\ell(\ell+1)} C_s \qquad (4.31)$$

Da bi rešenje konvergiralo, kad $\rho \to \pm\infty$ moramo raditi sa polinomom. Ti polinomi se nazivaju Lagerovim polinomima i oni imaju oblik

$$L_n^s = \sum_{\nu=0}^{n} (-1)^\nu \binom{n}{\nu} \frac{\Gamma(s+n+1)}{\Gamma(s+\nu+1)} x^\nu \qquad (4.32)$$

i mogu se izraziti preko konfluentnih hipergeometrijskih funkcija kao

$$L_n^s = \frac{\Gamma(s+n+1)}{\Gamma(s+1)} F(-n, s+1, x) \qquad (4.33)$$

Rešenje za radijalni deo Šedingerove jednačine, posle normiranja, je dato kao

$$\alpha_{n\ell}(\rho) = \left(\frac{2Z}{n}\right)^{3/2} \frac{\xi^{-\ell-1} e^{-1/2\xi}}{\sqrt{2n(n+\ell)!(n-\ell-1)!}} e^{\xi} \frac{d^{n-\ell-1}}{d\xi^{n-\ell-1}}\left(e^{-\xi}\xi^{n+\ell}\right) \qquad (4.34)$$

gde je, $\xi = \frac{2Z\rho}{n}$

Na osnovu (4.27) i $K = \frac{Z}{n}$ dobijamo izraz za energiju

$$E_n = -Z^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \qquad (4.35)$$

Kao što vidimo, spektar energije je degenerisan. Stepen degeneracija $\mathcal{D}$ je

$$\mathcal{D}=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2 \tag{4.36}$$

§5. Vitekerova jednačina

Na osnovu glava I, tačka 6, jednačina Vitekera ima oblik

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\left(-\frac{1}{4}+\frac{k}{x}+\frac{\frac{1}{4}-m^2}{x^2}\right)y=0 \tag{5.1}$$

Ova jednačina je veoma poznata u matematičkoj literaturi i naziva se ponekad koeficijentna hipergeometrijska jednačina, a njena rešenja koeficijentne funkcije. Postoje i tablice koeficijentnih funkcija, jer se dobar deo problema matematičke fizike svodi na jednačinu (5.1).

Može se pokazati da je Vitekerova jednačina povezana sa Lagerovom jednačinom. Zbog toga ovde nećemo posebno rešavati jednačinu (5.1), već ćemo samo naći njenu vezu sa Lagerovom i veze Lagerovih funkcija $L(x,\lambda,s)$ $\left[\lambda=\frac{s+1}{2}-\frac{1}{A},\ A^2=-2\varepsilon\right]$ i Vitekerovih funkcija koja su rešenja (5.1).

Da bi smo jednačinu (5.1) sveli na Lagerovu jednačinu, koja je oblika

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{dy}{dx}+\left[2\varepsilon+\frac{2}{x}-\frac{s^2}{4x^2}\right]y=0 \qquad (5.2)$$

U cilju rešavanja jednačine (5.1), uvodimo smenu

$$y=x^{1/2}\,z(x) \qquad (5.3)$$

pa (5.1) postaje

$$\frac{d^2z}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{dz}{dx}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{K}{x}-\frac{m^2}{x^2}\right]z=0 \qquad (5.4)$$

Dalje približavanje jednačine (5.4) jednačini (5.2), postižemo smenom argumenta

$$x=\frac{2}{K}t \qquad (5.5)$$

i jednačina (5.4) konačno postaje Lagerova, s tim što su uvedene oznake

$$2\varepsilon=-\frac{1}{K^2} \qquad s^2=4m^2 \qquad (5.6)$$

Rešenje Lagerove jednačine (5.7)

$$z=L(t,2m,m+K+\tfrac{1}{2})=\frac{2m\Gamma(2m)\,e^{-\frac{t}{K}}}{\Gamma(m+K+\frac{1}{2})}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{\Gamma(m+K+1/2+\nu)}{\nu!\,\Gamma(2m+1+\nu)}\left(\frac{2t}{K}\right)^{\nu} \qquad (5.7)$$

pomoću (5.3) i (5.5), možemo povezati sa rešenjem Vitekerove jednačine

$$y=W(x,K,m)=x^{1/2}L\left(\frac{Kx}{2},2m,m+K+\frac{1}{2}\right) \qquad (5.8)$$

ili eksplicitno

$$W(\kappa,x,m)=C_{\kappa m}\, x^{1/2} e^{-\frac{x}{2}} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m+\kappa+1/2+\nu)}{\nu!\,\Gamma(2m+1+\nu)}\, x^{\nu} \qquad (5.9)$$

gde je, $C_{\kappa m}$ proizvoljna integraciona konstanta.

Pošto su Vitekerove funkcije tabelirane, ponekad je zgodno izraziti rešenja Lagerove jednačine preko koeficijentnih funkcija. Veza izmedju Lagerovih funkcija i Vitekerovih je data u (5.10)

$$L(x,s,\lambda)=x^{-1/2} W\left[2x\sqrt{-2\varepsilon}\,,\left(\sqrt{-2\varepsilon}\right)^{-1},\frac{s}{2}\right] \qquad (5.10)$$

gde je,

$$\lambda=\frac{s+1}{2}-\frac{1}{A}=\frac{s+1}{2}-\frac{1}{\sqrt{-2\varepsilon}} \qquad (5.11)$$

Kao primer koliko se koeficijentne funkcije puno koriste, navešćemo vezu izmedju takozvane funkcije greške i Vitekerovih funkcija

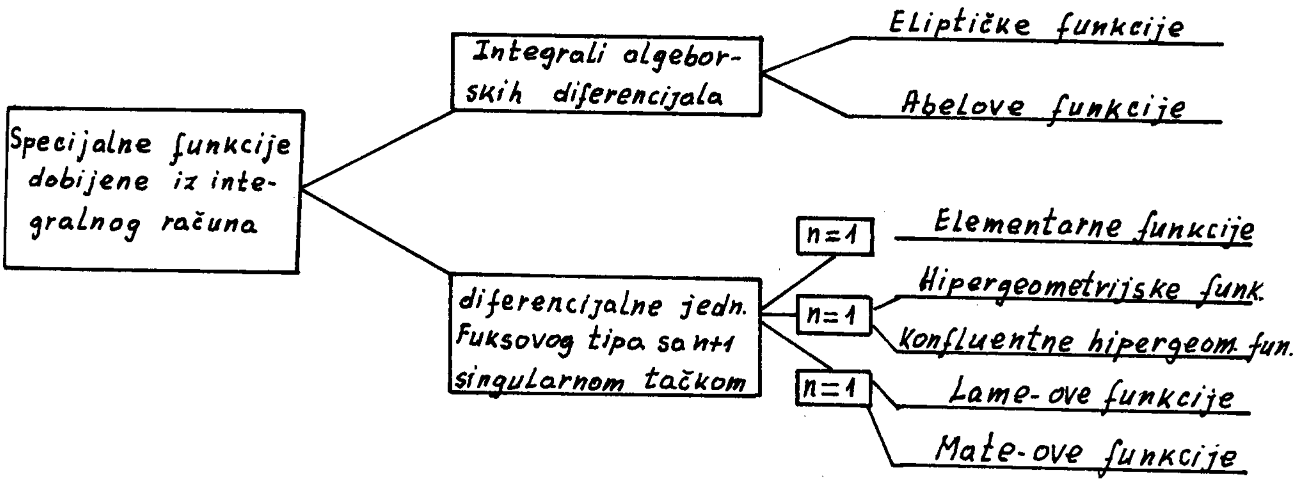
$$Erf(x)=\int_0^x e^{-t^2}dt=\frac{\sqrt{2\pi}}{2}-Erfc(x) \qquad (5.12)$$

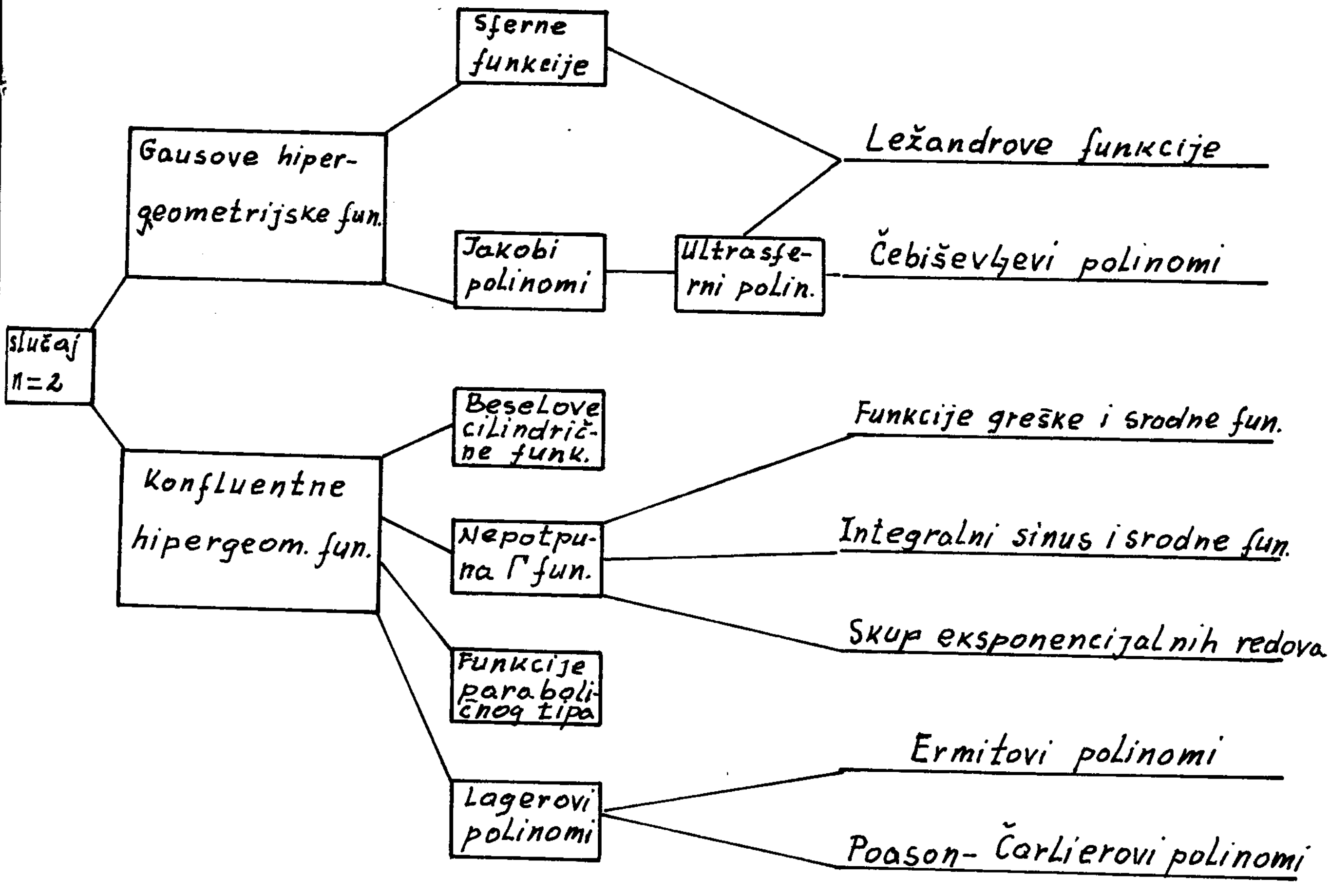
$$Erfc(x)=\int_x^{\infty} e^{-t^2}dt=\frac{1}{2}\, x^{-1/2} e^{-1/2 x^2} W_{-\frac{1}{4},\frac{1}{4}}(x^2) \qquad (5.13)$$

R e z i m e

U ovoj glavi je dat pregled nekih takozvanih specijalnih funkcija matematičke fizike,koje su,ustvari, rešenja odredjenih linearnih diferencijalnih jednačina drugog reda,koje se često susreću u praksi i koje su našle efektivnu upotrebu. Da bi se dobio potpuniji uvid u ovu interesantu oblast, navešćemo klasifikaciju specijalnih funkcija,koja dobro osvetljava uzajamne veze i poreklo /2/.

KLASIFIKACIJA SPECIJALNIH FUNKCIJA





II GLAVA

METODI REŠAVANJA SPECIFIČNIH TIPOVA JEDNAČINA

1. Operatorsko rešavanje diferencijalnih jednačina

Homogena diferencijalna jednačina drugog reda se ne može u opštem slučaju rešiti sa konačno mnogo kvadratura. Ovde ćemo pokazati da se ona može rešiti sa beskonačno mnogo kvadratura. Metod rešavanja je simbolički, pa ćemo se prvo u najkraćim crtama upoznati sa pojmom operatora i nekim osobinama operatora.

Operator je, po najopštijoj definiciji, simbol neke matematičke operacije. Za razliku od običnih brojeva, operatori medjusobom ne moraju da komutiraju, tj. u opštem slučaju ne mora da je $[A,B]=0$, gde je, $[A,B]\equiv AB-BA$, dok je za brojeve uvek $[A,B]=0$
U vezi sa ovim interesantno je odrediti inverzni operator za proizvod operatora $\hat{A}\hat{B}$,tj. naći $(\hat{A}\hat{B})^{-1}$. Jedina mogućnost koja zadovoljava ~~da~~ zahtev da operatori komutiraju je, da je

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1}=\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1} \qquad 1.1$$

Ovo se može generalisati na veći broj operacija

$$(\hat{A}_1\hat{A}_2\ldots\hat{A}_{n-1}\hat{A}_n)^{-1}=\hat{A}_n^{-1}\hat{A}_{n-1}^{-1}\ldots\hat{A}_2^{-1}\hat{A}_1^{-1} \qquad 1.2$$

Bitnu klasu operatora predstavljaju linearni operatori. Linearni operator $\hat{\mathcal{L}}$ se definiše na sledeći način

$$\hat{\mathcal{L}}\sum_n a_n\Psi_n=\sum_n a_n\hat{\mathcal{L}}\Psi_n \qquad 1.3$$

U formuli(1.3), a_n su konstante, a ψ_n funkcije. Od linearnih operatora najveću primenu u praksi ima operator diferenciranja $\hat{D}\equiv\frac{d}{dx}$ i multiplikativan operator $\varphi(x)$. Multiplikativni operator prosto množi, pa se u množenju ponaša kao običan broj. Može se pokazati da diferencijalni i multiplikativni operator ne komutiraju $[\hat{D},\varphi]\neq 0$. Operatori $\hat{D}$ i $\hat{\varphi}$ imaju svoje inverzne operatore, pri čemu je $\hat{\varphi}^{-1}=\frac{1}{\varphi(x)}$, dok $\hat{D}^{-1}$ nije jednoznačno definisan. Uz dopunsku definiciju, da je integraciona konstanta jednaka nuli, možemo pisati

$$\hat{D}^{-1}=\int dx \qquad (1.4)$$

Za operator $\hat{D}^2\equiv\frac{d^2}{dx^2}$, inverzni operator se definiše, uz dopunski zahtev, da obe integracione konstante budu jednake nuli

$$\hat{D}^{-2}=\int dx\int dx \qquad (1.5)$$

Operatori $\hat{D}^2$ i $\hat{D}^{-2}$ figurišu u difirencijalnim jednačinama drugog reda. Ako imamo nehomogenu jednačinu drugog reda

$$\frac{d^2y}{dx^2}+f(x)y=\phi(x) \qquad (1.6)$$

ona se može napisati kao

$$(\hat{D}^2+\hat{f})y=\phi(x) \qquad (1.7)$$

gde je, $\hat{f}\equiv f(x)$ multiplikativni operator.

Ukoliko postoji inverzni operator $(\hat{D}^2+\hat{f})^{-1}$, takav da je $(\hat{D}^2+\hat{f})^{-1}(\hat{D}^2+\hat{f})=1$, onda primenom ovog operatora na (1.7) s leve strane dobijamo rešenje jednačine u obliku

$$y=(\hat{D}^2+\hat{f})^{-1}\phi(x) \tag{1.8}$$

Potražimo sada operator $(\hat{D}^2+\hat{f})^{-1}$. Očigledno je da se $\hat{D}^2+\hat{f}$ može napisati kao

$$\hat{D}^2+\hat{f}=\begin{cases}\hat{f}(1+\hat{f}^{-1}\hat{D}^2)\\ \hat{D}^2(1+\hat{D}^{-2}\hat{f})\end{cases} \tag{1.9}$$

Odavde sledi da se i $(\hat{D}^2+\hat{f})^{-1}$ može napisati na dva načina, i to

$$(\hat{D}^2+\hat{f})^{-1}=\begin{cases}(1+\hat{f}^{-1}\hat{D}^2)\hat{f}^{-1}\\ (1+\hat{D}^{-2}\hat{f})^{-1}\hat{D}^{-2}\end{cases} \tag{1.10}$$

Po analogiji sa razvojem

$$(1+x)^{-1}=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n x^n \qquad |x|<1 \tag{1.11}$$

možemo pisati

$$(1+\hat{f}^{-1}\hat{D}^2)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n(\hat{f}^{-1}\hat{D}^2)^n \tag{1.12}$$

odnosno,

$$(1+\hat{D}^{-2}\hat{f})=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n(\hat{D}^{-2}\hat{f})^n \tag{1.13}$$

U vezi sa (1.12) i (1.13), treba naglasiti dve stvari:

a) Konvergencija operatorskog reda ne može se odrediti dok red ne primenimo na konkretnu funkciju; znači može se ispitivati samo konvergencija rezultata primene

b) Pošto operatori $\hat{D}^{-2}$ i $\hat{f}$ ne komutiraju, kao ni $\hat{f}^{-1}$ i $\hat{D}^{2}$, izrazi $(\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2})^{n} \neq \hat{f}^{-n}\hat{D}^{2n}$ i $(\hat{D}^{-2}\hat{f})^{n} \neq \hat{D}^{-2n}\hat{f}^{n}$, te se sume moraju primenjivati u konkretnom slučaju kao niz operacija, tj.

$$\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{n}\left(\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}\right)^{n}=1-\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}+\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}-\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}+\cdots \quad (1.14)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{n}\left(\hat{D}^{-2}\hat{f}\right)^{n}=1-\hat{D}^{-2}\hat{f}+\hat{D}^{-2}\hat{f}\hat{D}^{-2}\hat{f}-\hat{D}^{-2}\hat{f}\hat{D}^{-2}\hat{f}\hat{D}^{-2}\hat{f}+\cdots \quad (1.15)$$

Na osnovu predhodnog i na osnovu formule (1.8), možemo u principu da nadjemo dva partikularna rešenje jednačine (1.6) i to:

$$y_1(x)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{n}\left(\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}\right)^{n}\hat{f}^{-1}\phi(x)=\left(1-\hat{f}^{-1}\hat{D}^{2}+\cdots\right)\hat{f}^{-1}\phi(x) \quad (1.16)$$

$$y_2(x)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{n}\left(\hat{D}^{-2}\hat{f}\right)^{n}\hat{D}^{-2}\phi(x)=\left(1-\hat{D}^{-2}\hat{f}+\cdots\right)\hat{D}^{-2}\phi(x) \quad (1.16)$$

Opisani simbolički metod može se uspešnije primeniti na rešavanje homogene jednačine drugog reda, jer tu možemo da manipulišemo sa nehomogenim delom onako kako nam to odgovara. Pokazaćemo pre svega sledeće: ako su y_1 i y_2, dva rešenja nehomogene jednačine $y''+f(x)y=\phi(x)$, onda je njihova razlika rešenje odgovarajuće homogene jednačine $y''+f(x)y=0$. Zaista, mi možemo pisati

$$\begin{aligned} y_1'' + f(x)\,y_1 &= \phi(x) \\ y_2''+f(x)\,y_2 &= \phi(x) \end{aligned} \quad (1.18)$$

Ukoliko ove jednačine oduzmemo, dobijamo

$$\begin{aligned} (y_1-y_2)''+f(x)(y_1-y_2) &= 0 \\ Y_h &= y_{1nh}-y_{2nh} \end{aligned} \quad (1.19)$$

Sada možemo preći na rešavanje jednačine

$$y''+a(x)y'+b(x)y=0 \tag{1.20}$$

U prvoj fazi jednačina (1.20) se svodi na kanonički oblik, bilo smenom funkcije, bilo smenom argumenta, i prelazi u

$$\frac{d^2y}{dx^2}+f(x)y=0 \tag{1.21}$$

Zatim se za datu homogenu jednačinu naprave dve pomoćne nehomogene jednačine i to:

$$\frac{d^2y}{dx^2}+f(x)y=f(x) \tag{1.22}$$

$$\frac{d^2y}{dx^2}+f(x)y=xf(x) \tag{1.23}$$

Na osnovu formula (1.16) i (1.17), za jednačinu (1.22), nadju se dva partikularna integrala pri čemu (1.16) daje rešenje $y=1$. Na osnovu (1.19), prvi partikularni integral homogene jednačine (1.21) biće

$$Y_{1h}=1-\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left(\hat{D}^{-2}\hat{f}\right)^n\hat{D}^{-2}f(x)=1-\hat{D}^{-2}f(x)+\hat{D}^{-2}\hat{f}\hat{D}^{-2}\hat{f}-\cdots \tag{1.24}$$

Zatim se na osnovu formula (1.16) i (1.17) nadju rešenja jednačine (1.23), pri čemu formula (1.16) daje partikularno rešenje $y=x$. Tada je, na osnovu formule (1.19), drugo partikularno rešenje jednačine (1.21) dato sa

$$Y_{2h}=x-\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left(\hat{D}^{-2}\hat{f}\right)^n\hat{D}^{-2}\hat{f}=x-\hat{D}^{-2}xf(x)+\hat{D}^{-2}\hat{f}\hat{D}^{-2}xf(x)-\cdots \tag{1.25}$$

Opšte rešenje homogene jednačine tada glasi

$$Y=C_1 Y_{1h}+C_2 Y_{2h} \tag{1.26}$$

Kao što vidimo formule (1.24) i (1.25) daju rešenje homogene jednačine (1.21) preko beskonačno mnogo kvadratura. Može se pokazati da redovi (1.24) i (1.25) konvergiraju, ako je $f(x)$ analitička funkcija, tj. ako se ona može razviti u potencijalni red.

Sada ćemo na nekoliko primera pokazati gore izloženi metod rešavanja diferencijalnih jednačina.

1) Uzmimo jednačinu oblika

$$\frac{d^2y}{dx^2}+Ax^{\alpha}y=0 \qquad \alpha\neq -2 \tag{1.27}$$

očigledno je da je u ovom primeru

$$f(x)=Ax^{\alpha} \tag{1.28}$$

Ako izvršimo gore navedene operacije i izrazimo rešenje preko gama funkcija Γ, dobijamo

$$Y_{1h}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n A^n X^{n(\alpha+2)}}{(\alpha+2)^{2n} n!}\,\frac{\Gamma(\xi-n)}{\Gamma(\xi)} \tag{1.29}$$

i

$$Y_{2h}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n A^n X^{n(\alpha+2)}}{(\alpha+2)^n n!}\times\frac{\Gamma(\xi+1)}{\Gamma(\xi+n+1)} \tag{1.30}$$

gde je,

$$\xi=\frac{1}{\alpha+2} \tag{1.31}$$

Za konkretnu funkciju oblika

$$f(x)=B^2X^{-4} \tag{1.32}$$

i na osnovu relacija za gama funkcije

$$\Gamma(-x)\Gamma(x) = -\frac{\pi}{x \sin \pi x} \tag{1.33}$$

i relacija

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}+n\right) = \frac{(2n-1)!!(\pi)^{1/2}}{2^n} \qquad (2n-1)!! = \frac{(2n)!}{2^n n!} \tag{1.34}$$

a na osnovu (1.24) i (1.25) dobijamo

$$Y_{1h} = \frac{x}{B}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{B}{x}\right)^{2n+1}\frac{1}{(2n+1)!} = \frac{x}{B}\sin\frac{B}{x} \tag{1.35}$$

$$Y_{2h} = x\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left(\frac{B}{x}\right)^{2n}\frac{1}{(2n)!} = x\cos\frac{B}{x} \tag{1.36}$$

što se može dobiti i neposrednim putem.

2) Za diferencijalnu jednačinu oblika

$$y'' + Be^{\beta x} = 0 \tag{1.37}$$

očigledno je

$$f(x) = Be^{\beta x} \tag{1.38}$$

Za ovu funkciju ćemo naći samo jedno partikularno rešenje i to Y_{1h} , a ono je

$$Y_{1h} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{B^n e^{\beta n x}}{\beta^{2n}(n!)^2} \tag{1.39}$$

3) Jednačina oblika

$$y'' - xy = 0 \tag{1.40}$$

naziva se Ejrijeva jednačina. U ovom slučaju je $f(x)=-x$. Dva partikularna integrala nalaze se na osnovu formula (1.24) i (1.25). Ako u njih uvrstimo $f(x)=-x$ dobićemo

$$Y_{1h}=1-\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n(-1)^n(\hat{D}^{-2}x)^n\hat{D}^{-2}(-x)=1+\sum_{n=0}^{\infty}(\hat{D}^{-2}x)^n\hat{D}^{-2}x \tag{1.41}$$

$$Y_{2h}=x-\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n(-1)^n(\hat{D}^{-2}x)^n\hat{D}^{-2}(-x^2)=x+\sum_{n=0}^{\infty}(\hat{D}^{-2}x)^n\hat{D}^{-2}x^2 \tag{1.42}$$

Vršeći operacije naznačene u (1.41), konačno možemo pisati

$$Y_{1h}=1+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\prod_{\nu=1}^{n}(3\nu-2)\right\}\frac{x^{3n}}{(3n)!} \tag{1.43}$$

Drugi partikularni integral ima oblik

$$Y_{2h}=x+\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\prod_{\nu=1}^{n}(3\nu-1)\right\}\frac{x^{3n+1}}{(3n+1)!} \tag{1.44}$$

Očigledno je da Y_{1h} i Y_{2h} imaju beskonačan radijus konvergencije, jer je

$$\lim_{n\to\infty}\frac{(3n)!}{(3n+3)!}\,\frac{\prod_{\nu=1}^{n+1}(3\nu-2)}{\prod_{\nu=1}^{n}(3\nu-1)}=0 \tag{1.45}$$

§ 2. Generalisana Ojlerova jednačina

U ovom paragrafu, i sledećim u ovoj glavi, ćemo obraditi uopštene forme nekih najkarakterističnijih jednačina koje se javljaju u matematičkoj fizici. Jedna od takvih je i generalisana Ojlerova jednačina koja ima oblik

$$(a_2x+b_2)^2\frac{d^2y}{dx^2}+(a_1x+b_1)\frac{dy}{dx}+b_0y=0 \tag{2.1}$$

pri čemu je konstanta $a_2 \neq 0$

Posle deobe sa a_2 jednačina (2.1) postaje

$$\left(x+\frac{b_2}{a_2}\right)^2\frac{d^2y}{dx^2}+\left(\frac{a_1}{a_2^2}x+\frac{b_1}{a_2^2}\right)\frac{dy}{dx}+\frac{b_0}{a_2^2}y=0 \qquad (2.2)$$

Sada uvodimo smenu argumenta

$$x=\frac{a_2b_1-a_1b_2}{a_2^3}\xi-\frac{b_2}{a_2} \qquad (2.3)$$

gde su koeficijenti tako izabrani, da bi se što više uprostili izrazi uz prvi i drugi izvod funkcije.

Posle uvodjenja smene argumenta (2.3), jednačina (2.2) postaje

$$\xi^2\frac{d^2y}{d\xi^2}+\left(\frac{a_1}{a_2^2}\xi+1\right)\frac{dy}{d\xi}+\frac{b_0}{a_2^2}y=0 \qquad (2.4)$$

Naravno, sve ovo važi uz uslov da je $a_2b_1-a_1b_2\neq 0$ Predpostavićemo da ovo važi, a kasnije će-mo diskutovati slučaj $a_2b_1-a_1b_2=0$.

U cilju daljeg uproščavanja uvodimo smenu funkcije

$$y=\xi^{-\frac{a_1}{2a_2^2}}W(\xi) \qquad (2.5)$$

posle čega jednačina (2.4) postaje

$$\xi^2\frac{d^2w}{d\xi^2}+\frac{dw}{d\xi}+\left(B-\frac{1}{\xi}A\right)w=0 \qquad (2.6)$$

gde su uvedene oznake

$$A=\frac{a_1}{2a_2^2} \qquad B=\frac{2a_1a_2+4b_0a_2^2-a_1^2}{4a_2^4} \qquad (2.7)$$

Ako bi smo jednačinu (2.6) pokušali da rešimo pomoću potencijalnog reda, dobili bi smo divergentno rešenje. Ovo se može proveriti prostim računom. To nas navodi na ideju da bi trebalo izvršiti još jednu smenu argumenta i to oblika

$$\xi=\frac{1}{\theta} \tag{2.8}$$

jer bi ovo sigurno dovelo do jednačine, čije bi rešenje bilo dato u obliku konvergentnog reda. Posle uvodjenja ~~dve~~ (2.8) a jednačinu (2.6), dobija se

$$\frac{d^2W}{d\theta^2}+\left(\frac{2}{\theta}-1\right)\frac{dW}{d\theta}+\left(\frac{B}{\theta^2}-\frac{A}{\theta}\right)W=0 \tag{2.9}$$

Iz oblika jednačine (2.9) se vidi, da je možemo svesti na Lagerovu jednačinu koja ima oblik

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{dy}{dx}+\left(2\varepsilon+\frac{2}{x}-\frac{s^2}{4x^2}\right)y=0 \tag{2.10}$$

Radi toga uvodimo novu funkciju smenom

$$z=\theta^{-1/2}e^{-\frac{\theta}{2}}W(\theta) \tag{2.11}$$

posle čega jednačina (2.9) postaje

$$\frac{d^2z}{d\theta^2}+\frac{1}{\theta}\frac{dz}{d\theta}+\left(-\frac{1}{4}-\frac{A-1}{\theta}-\frac{1-4B}{4\theta^2}\right)z=0 \tag{2.12}$$

Očigledno je da u cilju potpunog poklapanja oblika jednačine (2.12) i (2.10) moramo uvesti novi argument i to smenom

$$\theta=\gamma t \qquad \gamma=const. \tag{2.13}$$

Ako pri tom uvedemo da je

$$(1-A)\gamma=2 \tag{2.14}$$

konačno imamo

$$\frac{d^2z}{dt^2}+\frac{1}{t}\frac{dz}{dt}+\left(-\frac{1}{(1-A)^2}+\frac{2}{t}-\frac{1-4B}{4t^2}\right)z=0 \qquad (2.15)$$

što je očigledno Lagerova jednačina sa parametrima

$$2\varepsilon=-\frac{1}{(1-A)^2} \qquad s^2=1-4B \qquad (2.16)$$

Rezimirajući, možemo reći da se generalisana Ojlerova jednačina (2.1), pod uslovom da je $a_2\neq 0$ $a_1b_2-a_2b_1\neq 0$ $\frac{a_1}{2a_2^2}\neq 1$, smenom

$$y=\left[\frac{(a_2b_1-a_1b_2)\left(x+\frac{b_2}{a_2}\right)}{a_2^3}\right]^{\frac{a_2^2-a_1}{2a_2^2}} e^{\frac{a_2^3}{2(a_2b_1-a_1b_2)}\frac{1}{x+\frac{b_2}{a_2}}}\cdot$$

$$\cdot Z\left[\frac{a_2(2a_2^2-a_1)}{4(a_2b_1-a_1b_2)}\,\frac{1}{x+\frac{b_2}{a_2}}\right] \qquad (2.17)$$

svodi na Lagerovu jednačinu, koja je oblika (2.10), pri čemu je

$$t=\frac{a_2(2a_2^2-a_1)}{4(a_2b_1-a_1b_2)}\,\frac{1}{x+\frac{b_2}{a_2}}\,;\quad 2\varepsilon=\frac{-4a_2^4}{(2a_2^2-a_1)^2} \qquad (2.18)$$

$$s^2=1-\frac{2a_1a_2^2+4b_0a_2^2-a_1^2}{a_2^4} \qquad (2.19)$$

Razmotrimo sada slučaj kada je $a_2b_1-a_1b_2=0$.
To znači da je

$$\frac{b_2}{a_2}=\frac{b_1}{a_1}=K \qquad (2.20)$$

Jednačinu (2.1) možemo napisati kao

$$\left(x+\frac{b_2}{a_2}\right)^2\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{a_1}{a_2^2}\left(x+\frac{b_1}{a_1}\right)\frac{dy}{dx}+\frac{b_0}{a_2^2}y=0 \qquad (2.21)$$

Uvodjenjem smene jednačina (2.21) postaje Ojlerova jednačina

$$\xi^2 \frac{d^2y}{d\xi^2} + \frac{a_1}{a_2^2}\xi \frac{dy}{d\xi} + \frac{b_0}{a_2^2}y = 0 \qquad \xi = x + \frac{b_2}{a_2} \tag{2.22}$$

koja se smenom $\xi = e^t$, svodi na jednačinu sa konstantnim koeficijentima

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \left(\frac{a_1}{a_2} - 1\right)\frac{dy}{dt} + \frac{b_2}{a_2^2}y = 0 \tag{2.23}$$

koja se lako rešava.

Razmotrimo još slučaj $A=1$ tj $a_1 = 2a_2^2$. U ovom slučaju jednačina (2.12) postaje

$$\frac{d^2z}{d\theta^2} + \frac{1}{\theta}\frac{dz}{d\theta} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{4B-1}{4}\frac{1}{\theta^2}\right)z = 0 \tag{2.24}$$

Množenjem ove jednačine sa θ^2, i smenom argumenta $\theta = 2it$, jednačina (2.24) postaje

$$t^2\frac{d^2z}{dt^2} + t\frac{dz}{dt} + (t^2 - p^2)z = 0 \tag{2.25}$$

što je očigledno Beselova jednačina. Pri tome je uvedena oznaka

$$p = \frac{1}{2}(1-4B)^{1/2} \tag{2.26}$$

Znači, da rezimiramo za slučaj da je $a_1 = 2a_2^2$, rešenje generalisane Ojlerove jednačine je dato preko rešenja Beselove jednačine (2.25), koja se iz jednačine (2.1) dobija smenom

$$y = t^{1/2}e^{it}z(t) \qquad t = \frac{a_2^3}{2i(a_2b_1 - a_1b_2)} \frac{1}{x + \frac{b_2}{a_2}} \tag{2.27}$$

§3. Laplasova jednačina

Laplasova jednačina se definiše kao

$$(a_1x+a_0)\frac{d^2y}{dx^2}+(b_1x+b_0)\frac{dy}{dx}+(c_1x+c_0)y=0 \qquad (3.1)$$

pri čemu je $a_1=0$. Posle deljenja sa a_1 i uvodjenja smene argumenta, jednačina (3.1) postaje

$$\xi\frac{d^2y}{d\xi^2}+(\beta\xi+\beta_0)\frac{dy}{d\xi}+(\gamma_1\xi+\gamma_0)y=0 \qquad \xi=x+\frac{a_0}{a_1} \qquad (3.2)$$

gde su uvedene oznake

$$\beta_1=\frac{b_1}{a_1} \qquad \beta_0=\frac{a_1b_0-a_0b_1}{a_1^2} \qquad \gamma_1=\frac{c_1}{a_1} \qquad \gamma_0=\frac{a_1c_0-a_0c_1}{a_1^2} \qquad (3.3)$$

Ako jednačinu (3.2) podelimo sa ξ, ona postaje

$$\frac{d^2y}{d\xi^2}+\left(\beta_1+\frac{\beta_0}{\xi}\right)\frac{dy}{d\xi}+\left(\gamma_1+\frac{\gamma_0}{\xi}\right)y=0 \qquad (3.4)$$

što nas navodi na pomisao da je možemo svesti na Lagerovu jednačinu, koja je oblika (2.10), paragraf dva. Da bi to postigli uvodimo novu funkciju

$$U(\xi)=\xi^{\frac{1-\beta_0}{2}}e^{-\frac{\beta_1}{2}\xi}Z(\xi) \qquad (3.5)$$

posle čega jednačina (3.4) postaje

$$\frac{d^2Z}{d\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{dZ}{d\xi}+\left[\gamma_1-\frac{\beta_1^2}{4}+\left(\beta_1+\gamma_1-\frac{\beta_1\beta_0}{2}\right)\frac{1}{\xi}-\frac{(\beta_0-1)^2}{4}\frac{1}{\xi^2}\right]Z=0 \qquad (3.6)$$

Radi potpunog poklapanja jednačina (3.6) i (2.10), uvodimo još jedan novi argument u jednačinu (3.6)

$$\xi = Kt \qquad K = \text{const.} \tag{3.7}$$

posle čega (3.6) prelazi u

$$\frac{d^2 z}{dt^2} + \frac{1}{t}\frac{dz}{dt} + \left[K^2\left(\gamma_1 - \frac{\beta_1^2}{4}\right) + K\left(\beta_1 + \gamma_1 - \frac{\beta_1\beta_0}{2}\right)\frac{1}{t} - \frac{(\beta_0 - 1)^2}{4}\frac{1}{t^2}\right]z = 0 \tag{3.8}$$

Odavde sledi da je

$$\begin{aligned} K^2\left(\gamma_1 - \frac{\beta_1^2}{4}\right) &= 2\varepsilon \\ K\left(\beta_1 + \gamma_1 - \frac{\beta_1\beta_0}{2}\right) &= 2 \\ \beta_0 - 1 &= s \\ \xi &= \frac{4t}{2(\beta_1 + \gamma_1) - \beta_1\beta_0} \end{aligned} \tag{3.9}$$

da bi (3.8) bilo svedeno na (2.10).

§ 4. Generalisana Gausova jednačina

Uopštena Gausova jednačina je definisana kao

$$(a_2 x^2 + a_1 x + a_0)\frac{d^2 y}{dx^2} + (b_1 x + b_0)\frac{dy}{dx} + c_0 y = 0 \tag{4.1}$$

Da bi smo je sveli na običnu Gausovu jednačinu,

$$x(x-1)\frac{d^2 y}{dx^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)x]\frac{dy}{dx} - \alpha\beta y = 0 \tag{4.2}$$

svodimo kvadratnu formu $a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ na kanonički oblik

$$a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = a_2\left[\left(x + \frac{a_1}{2a_2}\right)^2 - \frac{a_1^2 - 4a_0 a_2}{4a_2^2}\right] \tag{4.3}$$

tako da kad (4.3) uvrstimo u (4.1) i podelimo sa a_2, dobijamo

$$(x^2-K^2)\frac{d^2y}{dx^2}+\left(\frac{b_1}{a_2}x+\frac{b_0}{a_2}\right)\frac{dy}{dx}+\frac{c_0}{a_2}y=0 \tag{4.4}$$

gde je uvedena oznaka

$$K=\pm\frac{1}{2a_2}\left(a_1^2-4a_0a_2\right)^{1/2} \tag{4.5}$$

U jednačini (4.4) uvodimo smenu argumenta

$$\xi=x+K \tag{4.6}$$

pa (4.3) posle deljenja sa $-2K$ postaje

$$\xi\left(1-\frac{\xi}{2K}\right)\frac{d^2y}{d\xi^2}+\left(\frac{b_1}{2a_2}-\frac{b_0}{2Ka_2}-\frac{b_1}{2Ka_2}\xi\right)\frac{dy}{d\xi}+\frac{c_0}{a_2}y=0 \tag{4.7}$$

Uvodjenjem nove smene argumenta

$$\xi=2Kt \tag{4.8}$$

jednačina (4.7) postaje

$$t(1-t)\frac{d^2y}{dt^2}+\left(\frac{b_1}{2a_2}-\frac{b_0}{2Ka_2}-\frac{b_1}{a_2}t\right)\frac{dy}{dt}+\frac{2Kc_0}{a_2}y=0 \tag{4.9}$$

Jednačina (4.9) je očigledno Gausova. Veze izmedju koeficijenta su sledeće:

$$\begin{aligned}\frac{b_1}{2a_2}-\frac{b_0}{2Ka_2}&=\gamma\\ \frac{b_1}{a_2}&=\alpha+\beta+1\\ \frac{2Kc_0}{a_2}&=\alpha\beta\end{aligned} \tag{4.10}$$

a odavde je

$$\left.\begin{aligned} \alpha &= \frac{b_1-a_2}{2a_2} \pm \left[\left(\frac{b_1-a_2}{2a_2}\right)^2 - \frac{2Kc_0}{a_2}\right]^{1/2} \\ \beta &= \frac{b_1-a_2}{2a_2} \pm \left[\left(\frac{b_1-a_2}{2a_2}\right)^2 - \frac{2Kc_0}{a_2}\right]^{1/2} \\ \gamma &= \frac{b_1}{2a_2} - \frac{b_0}{2Ka_2} \end{aligned}\right\} \tag{4.11}$$

Rezimirajući dosadašnje izloženo, zaključujemo da se jednačina (4.1) smenom argumenta

$$X = 2K\left(t - \frac{1}{2}\right) \qquad K = \pm\frac{1}{2a_2}\left(a_1^2 - 4a_0a_2\right)^{1/2} \tag{4.12}$$

svodi na Gausovu

$$t(1-t)\frac{d^2Z}{dt^2} - \left[\gamma - (\alpha+\beta+1)t\right]\frac{dZ}{dt} - \alpha\beta Z = 0 \tag{4.13}$$

gde su veze izmedju koeficijenata jednačina (4.1) i (4.13) date u (4.10) i (4.11).

Rešenja jednačina (4.1) i (4.13) su povezana relacijom

$$y = Z\left(\alpha, \beta, \gamma, \frac{X}{2K} + \frac{1}{2}\right) \tag{4.14}$$

Na kraju treba napomenuti da zbog simetrije sa kojom koeficijenti α i β ulaze u Gausovu jednačinu za vrednosti α i β iz (4.11), ne treba razmatrati sve 4 mogućnosti koje dolaze od znaka $\pm$, već samo uzeti α sa znakom $+$, dok β onda mora imati znak $-$. Obrnuta kombinacije, kad α uzimamo sa znakom $-$, a β sa znakom $+$, daje isti rezultat.

III GLAVA

Rotacioni i vibracioni i rotaciono-vibracioni spektri dvoatomih molekula

Molekuli imaju složen spektar koji je rezultat tri vrste osnovnih kretanja i njihovih interakcija. Ove tri vrste osnovnih kretanja su rotacija, unutrašnje vibracije i kretanje elektronskog podsistema. Rotacioni, vibracioni i elektronski spektri nisu medjusobno nezavisni, jer su rotacije, vibracije i elektronska kretanja medjusobno korelisani. Najniže energije imaju rotacioni spektri (0,1 eV i manje), zatim dolaze vibracioni (1 eV i manje), dok su elektronske energije reda 10 eV .

Ovde će biti analizirani rotacioni spektri posebno, i to na modelu krutog rotatora i za dvoatomske molekule, i vibracioni posebno, na modelu sfernog oscilatora. Takodje će biti izvršena analiza rotaciono-vibracionih spektara i problem disocijacije molekula. Elektronski spektri biće analizirani odvojeno, i to u IV glavi, i to preko različitih oblika modelnih potencijala.

§ 1. KRUTI ROTATOR - ROTACIONI NIVOI

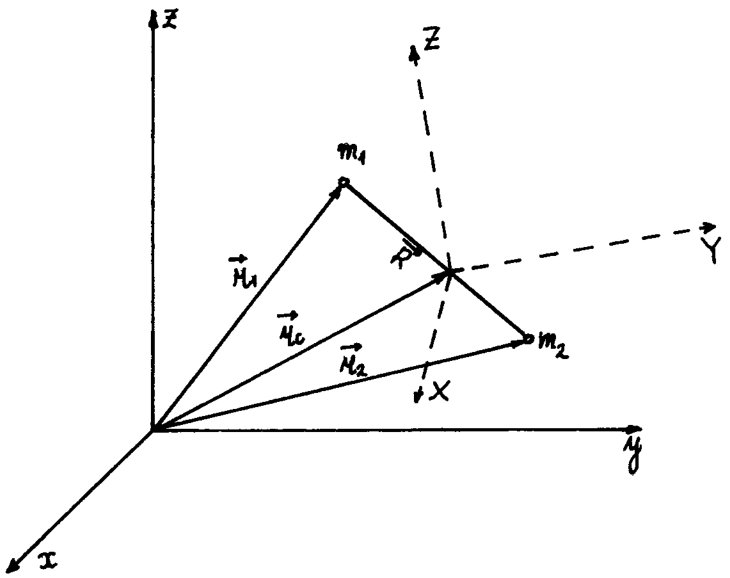
Svodjenje problema dve čestice na problem jedna čestice

Sistem od dve čestice ima šest stepeni slobode u laboratorijskom sistemu. Ovih šest stepeni slobode razbijaju se na $3+3$, od kojih tri stepeni slobode predstavljaju translatorno kretanje centra masa sistema od dve čestice, dok preostala tri stepena slobode opisuju rotaciju i vibraciju sistema. Ako nas ne interesuje kretanje molekula kao celine (tj. ako nas ne interesuje kako se u vremenu menjaju koordinate centra mase), onda se problem analizira ne u laboritorijskom sistemu, već u sistemu centra mase (koordinatni početak novog sistema nalazi se u centru mase). Uslov za prelazak iz laboratorijskog sistema u sistem centra mase je $\vec{R}_c=0$, gde je, $\vec{R}_c$ vektor položaja centra mase u laboratorijskom sistemu (slika 1).

U sistemu centra mase ponašanje sistema od dve čestice opisuje se preko jedne efektivne čestice, koja ima redukovanu masu i relativnu koordinatu $\vec{R}$, koja predstavlja razliku radijus vektora dveju čestica u laboratorijskom sistemu.

Kruti rotator

Sferne funkcije kao svojstvene funkcije momenta količine kretanja nalaze, pre svega, svoju primenu u kvantnoj teoriji rotatora, tj. u kvantnom tretiranju slobodnog kretanja materijalne tačke po sferi. Rezultati teorije rotatora mogu se neposredno iskoristiti pri proučavanju spektara dvoatomskih molekula, a kako se ugaoni deo talasne funkcije pri kretanju čestice u polju centralnih sila takodje opisuje sfernim funkcijama, mnogi zaključci teorije kretanja u polju centralne sile se u potpunosti odnose takodje i na teoriju rotatora (ugaona zavisnost talasne funkcije Ψ i pravila selekcije za kvantne brojeve l i m).



sl. 1.

Kruti rotator ima pet stepeni slobode. Masa m_1 ima tri stepena slobode, a i masa m_2 ima tri stepena slobode. Medjutim, rastojanje izmedju mase je konstantno

$$\left[(x_1-x_2)^2-(y_1-y_2)^2-(z_1-z_2)^2\right]^{1/2}=R=const \qquad (1.1)$$

pa imamo jedan stepen slobode manje. U laboratorijskom sistemu vektor položaja centra mase je dat kao

$$\vec{r}_c=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2} \qquad (1.2)$$

a vektor $\vec{R}$ kao

$$\vec{R}=\vec{r}_1-\vec{r}_2 \qquad (1.3)$$

Iz (1.2) i (1.3) nalazimo vektore položaja masa kao

$$\vec{r}_1=\frac{m_2\vec{R}}{m_1+m_2}+\vec{r}_c$$

$$\vec{r}_2=-\frac{m_1\vec{R}}{m_1+m_2}+\vec{r}_c \qquad (1.4)$$

U sistemu centra masa $XOYZ$, na osnovu predhodnog rečenog je $\vec{r}_c = 0$ pa su vektori položaja $\vec{r}_1$ i $\vec{r}_2$ u sistemu centra mase dati, na osnovu (1.4), kao

$$\vec{r}_1 = \frac{m_2}{m_1+m_2}\vec{R} \qquad \vec{r}_2 = -\frac{m_1}{m_1+m_2}\vec{R} \tag{1.5}$$

Kinetička energija za ovakav sistem je data kao

$$T = \frac{1}{2}m_1\dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2}m_2\dot{\vec{r}}_2^{\,2} = \frac{1}{2}\mu\dot{\vec{R}}^2 = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} \tag{1.6}$$

gde je, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 m_2}$ takozvana redukovana masa, a $P = \mu\dot{\vec{R}}$ gde je, $|\vec{R}| = R = const$. Uvešćemo operator kinetičke energije, koji izražen u sfernim koordinatama i uz uslov $R = const$ ima oblik

$$\hat{T}_{rot} = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{1.7}$$

Za ovaj slučaj se Šredingerova jednačina može napisati u obliku

$$\hat{T}_{rot}\Psi(\theta,\varphi) = T_{rot}\Psi(\theta,\varphi) \tag{1.8}$$

ili na osnovu (1.7)

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\Psi(\theta,\varphi) = \frac{2\mu R^2 T_{rot}}{\hbar^2}\Psi(\theta,\varphi) \tag{1.9}$$

Ako uvedemo oznaku

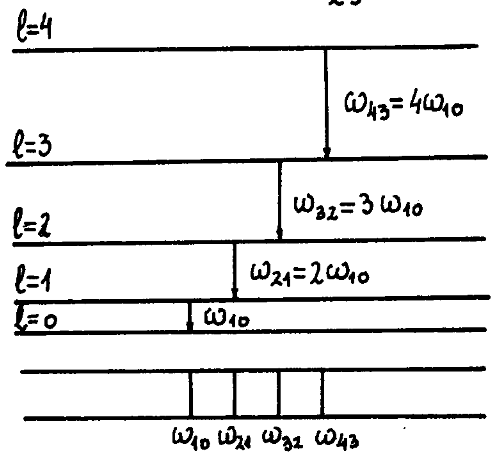
$$\frac{2\mu R^2 T_{rot}}{\hbar^2} = a = l(l+1) \tag{1.10}$$

gde je , a analogno sa (4.17), glava I, a l orbitalni kvantni broj, nalazimo izraz za rotacionu energiju

$$T_{rot} = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2J} \qquad l = 0,1,2\ldots \qquad (1.11)$$

gde je, $J = \mu R^2$ moment inercije u sistemu centra masa. Na osnovu (1.11) vidimo da je rotaciona energija sistema diskretna (kvantovana). Takodje se iz (1.11) vidi da spektri molekula, koji vrše rotacione prelaze (rotacioni spektri), predstavljaju skup medjusobno jednako udaljenih linija. Merenjem rastojanja medju linijama može se odrediti i moment inercije molekula. U slučaju, kada je zračenje uslovljeno samo rotacionim prelazima, njegova frekvencija će se odredjivati izrazom

$$\omega_{l,l-1} = 2Bl \qquad B = \frac{\hbar}{2J} \qquad (1.12)$$



Rotacioni spektar se nalazi u dalekoj infracrvenoj oblasti $(\lambda = 100 - 300\,\mu)$, pa je njegovo proučavanje povezano sa nizom teškoća. Slične linije su otkrivene u molekulu HCl, kao linije apsorpcije.

Na osnovu gore rečenog, znamo da je ugaoni deo talasne funkcije isti kao kod kretanja čestice u polju centralnih sila (taj problem smo rešavali u I glavi), pa odmah možemo napisati izraz za ugaoni deo talasne funkcije

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^{l+|m|}\,e^{im\varphi}}{(2\pi)^{1/2}\,2^{l}\,l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}\,(\sin\theta)^{|m|}\,\frac{d^{l+|m|}\,(\sin\theta)^{l}}{d(\cos\theta)^{l+|m|}} \qquad (1.13)$$

§ 2. Sferni oscilator - vibracioni nivoi

Hamiltonijan za sferni oscilator je dat kao

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{1}{2}m\omega^2 r \qquad (2.1)$$

pa Šredingerova jednačina ima oblik

$$\Delta\Psi+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega^2 r^2}{\hbar^2}\right)\Psi=0 \qquad (2.2)$$

Iz samog hamiltonijana vidimo da on ne utiče na izraz za ugaoni deo talasne funkcije, a kako je on isti kao u predhodnom slučaju, možemo odmah pisati

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^{l+|m|}\,e^{im\varphi}}{(2\pi)^{1/2}\,2^{l}\,l!}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}\,(\sin\theta)^{|m|}\,\frac{d^{l+|m|}(\sin\theta)^{l}}{d(\cos\theta)^{l+|m|}} \qquad (2.3)$$

Izraz za radijalni deo Šredingerove jednačine ima oblik

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega^2 r^2}{\hbar^2}\right]R-l(l+1)R=0 \qquad (2.4)$$

Uvodjenjem smene

$$R(\rho)=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\frac{e^{-\frac{1}{2}\rho^2}}{\rho}Z(\rho) \qquad r=\alpha\rho \qquad \frac{m\omega\alpha^2}{\hbar}=1 \tag{2.5}$$

ona prelazi u jednačinu

$$\frac{d^2Z}{d\rho^2}-2\rho\frac{dZ}{d\rho}+\left[\frac{2E}{\hbar\omega}-1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]Z=0 \tag{2.6}$$

Ovu jednačinu rešavamo pomoću potencijalnog reda

$$Z=\sum_{\nu=0}^{\infty}C_\nu\,\rho^{\nu+K} \tag{2.7}$$

Biramo vrednosti koje nam omogućavaju normiranje funkcije

$$K_1=l+1 \qquad \int_0^\infty d\rho\,\rho^2R^2(\rho)=1 \qquad K_2=l \tag{2.8}$$

(obe vrednosti daju isti rezultat).

Rekurentni obrazac koji dobijamo rešavajući jednačinu (2.6), pomoću potencijalnog reda (2.7), ima oblik

$$C_{2n}=\frac{(-2)^n(\lambda-l-1)[(\lambda-l-1)-2][(\lambda-l-1)-4]\ldots[(\lambda-l-1)-(2n-2)]}{[(l+2n)(l+2n+1)-l(l+1)]\ldots[(l+2)(l+3)\quad l(l+1)]}C_0 \tag{2.9}$$

gde je,

$$\frac{1}{2}\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-1\right)=\lambda \tag{2.10}$$

Traženjem asimptotskog rešenja, nalazimo da moramo tražiti rešenje u obliku polinoma, a ne reda. Kako se vidi na osnovu (2.9), red se prekida, ako je

$$\lambda=2n+l+1 \tag{2.11}$$

što znači da je energija data sa

$$E_{n,l}=\left(2n+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \qquad (2.12)$$

Iz (2.12) se vidi, da stacionarna stanja u oscilatornoj potencijalnoj jami obrazuju ekvidistantni (s rastojanjem $\hbar\omega$), niz energetskih stanja. Svako od stanja se karakteriše sa dva kvantna broja n i l . Energija zavisi samo od kombinacije kvantnih brojeva $2n+l=\Lambda$, zato Λ možemo nazvati glavnim kvantnim brojem. Energetski nivoi za $\Lambda\geqslant 2$ su degenerisani /4/.

Konačno rešenje za radijalni deo Šredingerove jednačine je dato kao

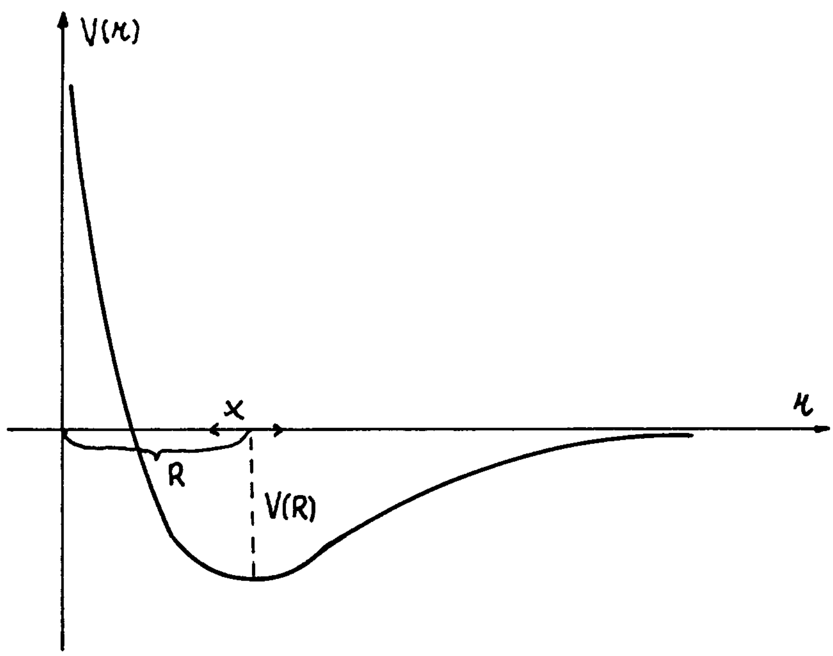
$$A_{n,l}(\rho)=C_{nl}\rho^{l}e^{-\frac{1}{2}\rho^{2}}\sum_{\nu=0}^{n}\frac{2n(2n-2)\ldots(2n-2\nu+2)}{[(l+2)(l+3)-l(l+1)]\ldots(l+2\nu)(l+2\nu+1)-l(l+1)}\rho^{2\nu} \qquad (2.13)$$

a ukupna talasna funkcija $\Psi(r,\theta,\varphi)$ je data kao proizvod izraza (2.4) i (2.13).

§ 3. Rotaciono-vibracioni spektri dvoatomskih molekula

Uporedo sa čisto rotacionim i čisto vibracionim spektrima, postoje još i rotaciono-vibracioni spektri, koji nastaju u takvim slučajevima kada se zajedno sa rotacijom molekula uzimaju u obzir još i unutrašnje oscilovanja molekula, tj. sada ni rastojanje medju atomima nije konstantno. U tom slučaju molekul predstavlja oscilujući rotator.

Dva molekula mase m_1 i m_2 približavaju se sa beskonačno dalekog rastojanja jedan drugom. Dok su beskonačno udaljeni, potencijalna energija interakcije je ravna nuli. Na bližim rastojanjima izmedju molekula počinju da deluju privlačne sile, tj. potencijalna energija interakcije je negativna i dostiže svoj minimum na nekom rastojanju R . Posle toga, počinju da deluju kratko dometne nuklearne odbojne sile, potencijalna energija raste i postaje pozitivna. U funkciji relativnog rastojanja $r=|\vec{r}_1-\vec{r}_2|$, potencijalna energija dvoatomih molekula ima oblik



sl.2.

Kako ćemo raditi u sistemu centra masa, na osnovu predhodno izloženog, radićemo sa redukovanom masom neke efektivne čestice μ i relativnim rastojanjem, r.

Molekuli osciluju oko ravnotežnog položaja. Za efektivnu česticu sa kojom radimo, to znači da se ravnotežni položaj R menja i prelazi u $R+x$. Znači relativni vektor r može se pisati kao $r=R+x$ $x \ll R$, pa potencijalnu energiju možemo razviti u red oko ravnotežnog položaja.

$$V(r)=V(R+x)=V(R)+x\left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r=R}+\frac{x^2}{2}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial r^2}\right)_{r=R}+\frac{x^3}{6}\left(\frac{\partial^3 V}{\partial r^3}\right)_{r=R}+\frac{x^4}{24}\left(\frac{\partial^4 V}{\partial r^4}\right)_{r=R}+\cdots \quad (3.1)$$

U $r=R$ potencijal ima minimum,pa je $V'(R)=0$. Odatle sledi

$$\left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r=R}=\left(\frac{\partial^3 V}{\partial r^3}\right)_{r=R}=0$$

$$\left(\frac{\partial^2 V}{\partial r^2}\right)_{r=R}=K=\mu\omega^2 \qquad \frac{1}{24}\left(\frac{\partial^4 V}{\partial r^4}\right)_{r=R}=-\alpha \quad (3.2)$$

Kao i u predhodnom paragrafu rešavaćemo samo radijalni deo Šredingerove jednačine,pošto je ugaoni deo talasne funkcije isti kao i u predhodnom paragrafu. Radijalni deo Šredingerove jednačine ima oblik

$$\frac{d^2A}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dA}{dr}+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]A(r)=0 \quad (3.3)$$

koji smenom $A(r)=r^{-1}B(r)$ i uvodjenjem zamene $r=R+x$ prelazi u oblik

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(R+x)-l(l+1)\frac{1}{R^2\left(1+\frac{x}{R}\right)^2}\right]B(x)=0 \quad (3.4)$$

Sada izraz $R^{-2}\left(1+\frac{x}{R}\right)^{-2}$ razvijamo u geometrijski red, zadržavajući se na članovima četvrtog stepena,pa se izraz (3.4) razdvaja na dva dela

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2}H_0=\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-E_{rot}+D)-\frac{l(l+1)x}{R^3}-\left(\frac{\mu^2\omega^2}{\hbar^2}-\frac{3l(l+1)}{R^4}\right)x^3 \quad (3.5)$$

$$-\frac{2\mu}{\hbar^2}H_{int}=\frac{4l(l+1)}{R^5}x^3-\left(\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}-\frac{5l(l+1)}{R^6}\right)x^4 \quad (3.6)$$

gde je uvedena oznaka

$$\frac{l(l+1)}{R^2}=E_{rot}\frac{2\mu}{\hbar^2} \qquad V(R)\equiv -D \quad D>0 \quad V(R)<0 \quad (3.7)$$

Izraz (3.5) sada transformišemo i dobijamo jednačinu

$$\frac{d^2B}{dt^2}-\left(\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2}-\frac{\mu^2\Omega^2}{\hbar^2}t^2\right)B=0 \tag{3.8}$$

U jednačinu (3.8) su uvedene sledeće oznake

$$E-E_{rot}-D-16\frac{E_{rot}}{J\Omega^2}=\varepsilon \tag{3.9}$$

$$x-\frac{l(l\;1)\hbar^2}{\mu^2\Omega^2R^3}=t \qquad \begin{matrix} x\in(-\infty,+\infty) \\ t\in(-\infty,+\infty)\end{matrix} \tag{3.10}$$

$$\Omega^2=\omega^2-\frac{12E_{rot}}{J} \tag{3.11}$$

Ovo je (jednačina 3.8) očigledno Ermit-Veberova jednačina (nju smo obradili u I glavi, paragraf 3). Kao što znamo, ona se uvek može transformisati u jednačinu oblika

$$\frac{d^2Z}{d\xi^2}-2\xi\frac{dZ}{d\xi}+\left(\frac{2\varepsilon}{\hbar\Omega}-1\right)Z=0 \tag{3.12}$$

koja ima konačno rešenja ako je

$$\frac{2\varepsilon}{\hbar\Omega}-1=2n \tag{3.13}$$

i ona su oblika

$$Z_n(\xi)=\frac{e^{-1/2\,\xi^2}}{(\pi^{1/2}2^n n!)^{1/2}}H_n(\xi) \qquad H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right) \tag{3.14}$$

Iz (3.13) dobijamo izraz za energiju u našoj akropsimaciji i on ima oblik

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\left(\omega^2-\frac{12E_{rot}}{J}\right)^{1/2}+E_{rot}-D-16\frac{E_{rot}^2}{J\Omega^2} \tag{3.15}$$

Izraz za energiju (3.15) ćemo transformisati, tako što ćemo se vratiti na stare promenljive i izvršiti odgovarajuće aproksimacije

$$\left(\omega^2-\frac{12E_{rot}}{J}\right)^{1/2}=\omega\left(1-\frac{12E_{rot}}{J\omega^2}\right)^{1/2}\approx\omega-\frac{6E_{rot}}{J\omega}-\frac{18E_{rot}^2}{J^2\omega^2} \qquad \frac{1}{\Omega^2}\approx\frac{1}{\omega^2} \qquad (3.16)$$

Konačno dobijamo izraz za energiju

$$E_n=E_{vib}+E_{rot}-D-\frac{6(n+1/2)\hbar^2}{J}\frac{E_{rot}}{E_{vib}}-\frac{16(n+1/2)^2\hbar^2}{J}\left(\frac{E_{rot}}{E_{vib}}\right)^2-\frac{18(n+1/2)^4}{J^2E_{rot}}\left(\frac{E_{rot}}{E_{vib}}\right)^3 \qquad (3.17)$$

gde je, $E_{rot}=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J}$; $E_{vib}=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$; D energija disocijacije za molekule. Vrednosti energije disocijacije uzetih iz /10/ predstavljene su u tabeli 1.

Molekul	D(eV)
Cl_2	2,49
H_2	4,47
O_2	5,08
NO	5,25
CO	8,43
N_2	9,73

TABELA 1

U najgrubljoj aproksimaciji energija ovakvog sistema je data kao:

$$E_n=E_{vib}+E_{rot}-D \qquad (3.18)$$

Napomenimo da za molekul postoji samo konačan broj diskretnih energetskih nivoa. To je povezano sa okolnošću što se za

$$B\hbar l(l+1)+\hbar\omega(n+\frac{1}{2})\geqslant D \qquad B=\frac{\hbar}{2J} \qquad (3.19)$$

molekul mora raspasti.

Raspadanje molekula za velike kvantne brojeve može se kvalitativno objasniti na sledeći način. Kada je $n \gg 1$, onda amplituda oscilacije može postati toliko velika, tako da atomi na tim rastojanjima praktično neće medjusobno delovati, pa će molekul kao vezani sistem prestati da postoji. Kada su suviše veliki orbitalni kvantni brojevi l , koji karakterišu energiju rotacije, onda i centrifugalne sile, takodje, mogu razbiti molekul. Iz ovoga sledi da, na osnovu (3.18), rotaciono - vibraciona interakcija stabilizuje molekul.

Istraživanje rotaciono - vibracionih spektara ima veliki značaj pri proučavanju strukture molekula. Pomoću njih se mogu odrediti momenti inercije molekula, njihov izotopski sastav, itd. (momenti inercije molekula koji se sastoje iz različitih izotopa ovog, ili onog, elementa svakako se unekoliko razlikuju).

§ 4. Prostorni oscilator

Sistem sa potencijalnom energijom

$$V(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2} \tag{4.1}$$

možemo razmatrati kao trodimenzionalni harmonijski oscilator, ili prostorni oscilator. Ovakav potencijal se koristi za opisivanje nekih osobina atomskih jezgara. Ako potencijal ovakvog oblika izrazimo preko dekartovih koordinata i uvrstimo u Šredingerovu jednačinu, ona će imati sledeći oblik:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)\right]\Psi=E\Psi \tag{4.2}$$

Ona se standardnom metodom razdvajanja promenljivih svodi na tri jednačine Ermit - Veberovog tipa (koje imamo za običan harmonijski oscilator) i one se uvodjenjem odgovarajućih smena

$$\xi=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x \qquad \eta=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}y \qquad \zeta=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}z \tag{4.3}$$

lako rešavaju, tako da izraz za talasnu funkciju možemo odmah napisati kao

$$\Psi(\xi,\eta,\zeta)=\frac{e^{-1/2(\xi^2+\eta^2+\zeta^2)}}{(2^n n!\,\pi^{1/2})^{3/2}}H_{n_x}(\xi)H_{n_y}(\eta)H_{n_z}(\zeta) \tag{4.4}$$

$$H_n(t)=(-1)^n e^{t^2}\frac{d^n}{dt^n}e^{-t^2}$$

Iz predhodnog sledi, da je izraz za energiju prostornog oscilatora dat kao

$$E_n=(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2})\hbar\omega \tag{4.5}$$

gde je, $E_0=\frac{3}{2}\hbar\omega$, nulta energija oscilatora. Na osnovu (2.12), glava III, sledi da je

$$2n_r+l=(n_x+n_y+n_z)=\Lambda \tag{4.6}$$

Stanje sa odredjenim n_x, n_y i n_z nema, uopšte govoreći, odredjene vrednosti l i m. Talasne funkcije koje odgovaraju svakoj trojki brojeva n_x, n_y, n_z, koji imaju sumu jednaku $\Lambda=2n_r+l$, odnose se na jedan energetski nivo. Dakle, spektar energije prostornog oscilatora je degenerisan, za razliku od ~~be~~ običnog oscilatora, gde je spektar nedegenerisan. Naprimer, za

$\Lambda=3 \quad E_n=\frac{9}{2}\hbar\omega$.

n_x	n_y	n_z
3	0	0
0	3	0
0	0	3
2	1	0
2	0	1
1	2	0
1	0	2
0	1	2
0	2	1
1	1	1

TABELA 2

U opštem slučaju stepen degenerisanosti nivoa, sa vrednošću ℓ, se izračunava kao

$$\frac{1}{2}(\Lambda+1)(\Lambda+2) \qquad (4.8)$$

IV GLAVA

MODELNI POTENCIJALI

Pre nego što predjemo na razmatranje modelnih potencijala, što je i tema ovog diplomskog rada, trebalo bi se malo zadržati i reći nešto, uopšte, o modelima.

U vezi s tim, možemo reći da se razvitak naučnih teorija ostvaruje pomoću uvodjenja i korišćenja različitih modela, koji su u završnim i jasnim slučajevima strogo definisani i koji se, u suštini, mogu posmatrati kao neke apstraktne matematičke šeme, koje odražavaju, u dovoljnom i neophodnom obliku, suštinu koja nas interesuje.

Postavlja se pitanje šta je to model? U konkretnom slučaju, model čini nekakav skup tvrdjenja, koji specifišu (grubo) prirodu osnovnog pojma teorije no preciznije od opštih (i zbog toga krajnje neodredjenih) predpostavki.

Navedimo nekoliko primera modela u fizici:

1. Model gasa kao skup krutih sfera,
2. Model Izinga za fazne prelaze, zasnovan na predpostavci da kod niza atoma, ili molekula, svaki od njih interaguje samo sa svojim najbližim susedom,
3. Klasični model tečnosti, kao neprekidne sredine sa datom gustinom i rasporedom napona,
4. Najprostiji model električne struje, kao, jedno-dimenzionog protoka beskonačne gustine,

5. Potencijalna barijera u svojstvu karakteristike nekek stalne sile i oblika potencijala,kao modela unutrašnjih sila privlačenja.

Svaki od gore navedenih modela,predstavlja tačno definisan objekat,uveden na osnovu idealnog šematizovanja primenjenog na realni prostor vremena i realna materijalna tela,koja učestvuju u realnim dogadjajima.

Da li modeli moraju,ili trebaju,biti očigledni?

"Osnovni prirodni zakoni ne upravljaju neposredno svetom naših očiglednih predstava,već se odnose na takve pojmove o kojima mi ne možemo da stvorimo očigledne predstave,a da ne upadnemo u protivrečnost. Nove teorije, nezavisno od njihove matematičke formulacije,izgradjene su na temelju takvih fizičkih pojmova,koji se ne mogu objasniti pomoću ranije poznatih pojmova i čak se ne mogu objasniti,adekvatno,rečima uopšte." (P.A.M. Dirak "The principles of quantum mechanics" Oxford 1958). Očiglednost - to je dobrodošla psihološka slučajnost, a ne i naučna neophodnost. Mali je broj modela koji su se pokazali kao očigledni. Pri tom,treba praviti razliku izmedju teorijskih modela i očiglednih analogija.

U prirodnim naukama formiranje teorijskih modela je povezano sa dostignućem dva osnovna cilja:

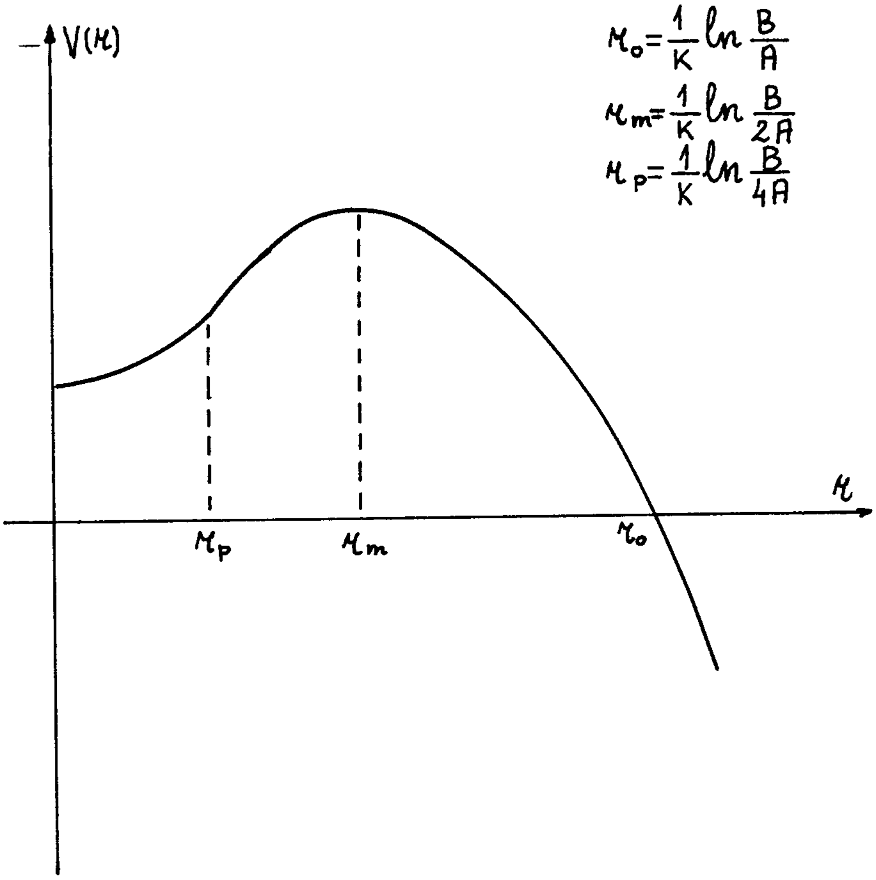
1. Za osmišljavanje i objašnjavanje rezultata posmatranja i različitih merenja u ogledima i sredini koja nas okružuje.
2. Za matematičku formulaciju odgovarajućih zadataka,koji omogućavaju da se dobiju,u posmatranim problemima,potrebni odgovori, teorijski, zatim putem istraživanja, ili rešavanjem tih zadataka pomoću matematičkih metoda.

Ipak, samo površan pogled dovoljan je da se shvati, da je oblast primene navedenih, i svih drugih, modela ograničen. Primena dobrih modela može nas zadovoljiti u dovoljno širokom dijapazonu problema, dok drugi, iako pravilno izgradjeni, mogu se pokazati kao neodgovarajući. S produbljivanjem saznanja potrebno je sve detaljnije modeliranje, no, ipak, na svakoj etapi to će modeliranje biti šematsko i moraće biti sposobno da prihvati sledeće, sve finije, izmene.

1. Potencijal tipa $V(r)=Ae^{2kr}-Be^{kr}$

Potencijal $V(r)=Ae^{2kr}-Be^{kr}$ ima oblik, kao na slici 1., gde je, $A>0$ $B>0$ $k>0$ $B>4A$

$$r_o=\frac{1}{k}\ln\frac{B}{A}$$
$$r_m=\frac{1}{k}\ln\frac{B}{2A}$$
$$r_p=\frac{1}{k}\ln\frac{B}{4A}$$



sl. 1.

Radijalni deo Šredingerove jednačine za potencijal ovog oblika je dat kao

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}+q^2e^{kr}-p^2e^{2kr}\right)\Psi=0 \tag{1.1}$$

gde su uvedene oznake

$$q^2=\frac{2\mu B}{\hbar^2} \qquad p^2=\frac{2\mu A}{\hbar^2} \tag{1.2}$$

Uvodjenjem smene

$$\Psi=\frac{K e^{-P\rho}}{\ln\rho}Z(\rho) \tag{1.3}$$

jednačina (1.1) prelazi u jednačinu

$$\frac{d^2Z}{d\rho^2}+\left(\frac{1}{\rho}-2P\right)\frac{dZ}{d\rho}+\left(\frac{Q^2-P}{\rho}+\frac{2\mu E}{\hbar^2K^2}\frac{1}{\rho^2}\right)Z=0 \qquad P^2=\frac{p^2}{K^2} \quad Q^2=\frac{q^2}{K^2} \tag{1.4}$$

Ako potražimo asimptocko rešenje ove jednačine (kad $\rho\to\infty$), videćemo da je $\varphi_\infty\sim e^{P\rho}$ $(\varphi=e^{-P\rho}Z(\rho))$, što znači da rešenje jednačine (1.4), koje ćemo potražiti u obliku reda, mora biti polinom, a ne red, jer će u tom slučaju rešenje divergirati.

Rešenje sada tražimo u obliku

$$Z=\sum_{\nu=0}^{\infty}C_\nu\rho^{\nu+\lambda} \tag{1.5}$$

Za slučaj $\lambda_1=a$, rekurentni obrazac ima oblik

$$C^{(1)}_{s+1}=\frac{1}{2P}\,\frac{S-\left(\frac{Q}{2P}-\frac{1}{2}-a\right)}{(S+1)(S+1+2a)}C^{(1)}_s \tag{1.6}$$

a za $\lambda_2=-a$, imamo da je

$$C^{(2)}_{s+2}=\frac{1}{2P}\,\frac{S-\left(\frac{Q}{2P}-\frac{1}{2}+a\right)}{(S+1)(S+1-2a)}C^{(2)}_s \tag{1.7}$$

gde je,

$$a=\left(-\frac{2\mu E}{\hbar^2 K^2}\right)^{1/2} \tag{1.8}$$

Prvi red se prekida za:

$$\frac{Q}{2P}-\frac{1}{2}-a=n \tag{1.9}$$

a drugi, u slučaju kad je

$$\frac{Q}{2P}-\frac{1}{2}+a=n \tag{1.10}$$

Oba izraza, (1.9) i (1.10), daju isto rešenje za energiju $\not{E}$ i ono je oblika

$$E_n=-\frac{\hbar^2K^2}{2\mu}\left[n-\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{B}{A}}-1\right)\right]^2 \tag{1.11}$$

Iz (1.11) vidimo da je energija, u slučaju potencijala $V(r)=Ae^{2Kr}-Be^{Kr}$, diskretna (kvantovana).

Rešenje jednačine (1.4) je dato kao:

$$\varphi_n=C_n e^{-P\varrho}\sum_{\nu=0}^{\infty}\binom{n}{\nu}\frac{1}{\Gamma(2n-\nu-2w)}\left(\frac{\varrho}{2P}\right)^{w+\nu-n} \qquad w=\frac{Q}{2P}-\frac{1}{2} \tag{1.12}$$

Konstanta C_n se odredjuje iz uslova normiranja

$$\int_0^\infty dr\, r^2\Psi^2(r)=\frac{1}{4\pi} \qquad \Psi(r)=\frac{\varphi(r)}{r} \tag{1.13}$$

i ona je data kao

$$C_n=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\left\{\int_1^\infty\frac{dx\, e^{-4P^2x}}{x}\left[\sum_{\nu=0}^{n}\binom{n}{\nu}\frac{1}{\Gamma(2n-\nu-2w)}x^{w+\nu-n}\right]^2\right\} \tag{1.14}$$

gde je, $x=\frac{\varrho}{2P}$

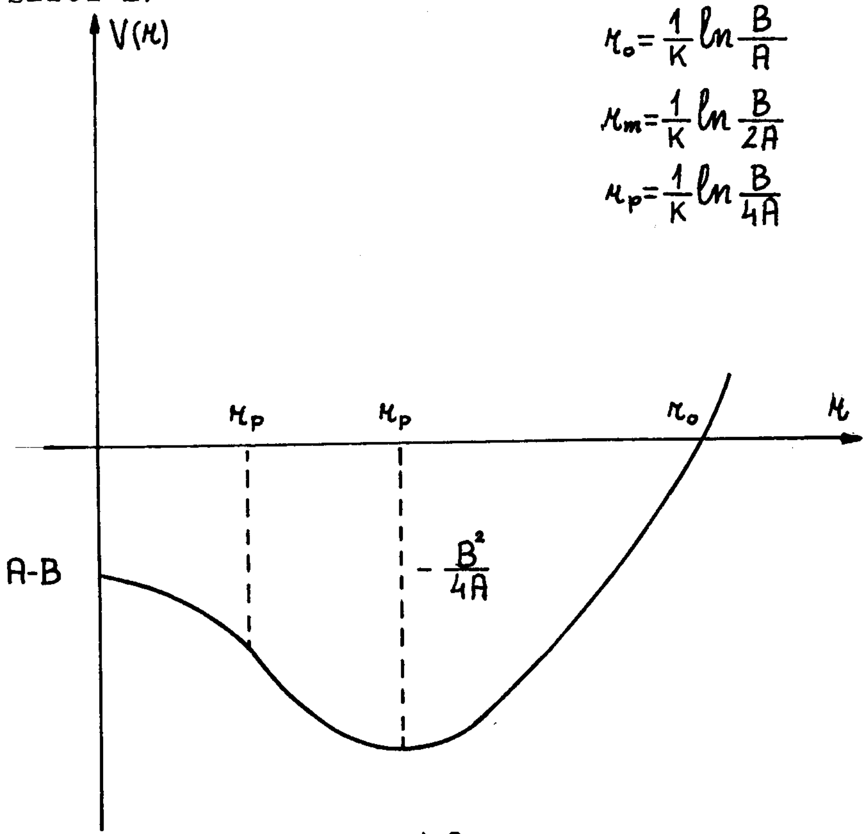
§ 2. Potencijal tipa $V(r)=Ae^{-2Kr}-Be^{-Kr}$

Potencijal ovakvog oblika je grafički predstavljen na slici 2.

$$r_o=\frac{1}{K}\ln\frac{B}{A}$$

$$r_m=\frac{1}{K}\ln\frac{B}{2A}$$

$$r_p=\frac{1}{K}\ln\frac{B}{4A}$$



sl.2.

gde je, $A>0$ $B>0$ $K>0$

Za ovaj oblik potencijala, radijalni deo Šredingerove jednačine je dat kao

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}+q^2e^{-Kr}-p^2e^{-2Kr}\right)\Psi=0 \qquad (2.1)$$

Uvodjenjem smena

$$\Psi_1=-K\frac{e^{-p\varrho}}{\ln\varrho}\theta_1 \qquad (2.2)$$

$$\Psi_2=-K\frac{e^{p\varrho}}{\ln\varrho}\theta_2 \qquad (2.3)$$

jednačina (2.1) prelazi u

$$\frac{d^2\theta_1}{d\rho^2}+\left(\frac{1}{\rho}-2P\right)\frac{d\theta_1}{d\rho}+\left[\frac{2mE}{K^2\hbar^2}\frac{1}{\rho^2}+\frac{Q^2-2P}{\rho}\right]\theta_1=0$$
$$\frac{d^2\theta_2}{d\rho^2}+\left(\frac{1}{\rho}+2P\right)\frac{d\theta_2}{d\rho}+\left[\frac{2mE}{K^2\hbar^2}\frac{1}{\rho^2}+\frac{Q^2+2P}{\rho}\right]\theta_2=0 \qquad (2.4)$$

Rešenje ovih jednačina potražićemo u obliku potencijalnog reda

$$\theta=\sum_{\nu=0}^{\infty}C_\nu\rho^{\nu+\lambda} \qquad (2.5)$$

Rešavanjem jednačina (2.4), pomoću reda (2.5), dobijamo isto rešenje za talasnu funkciju, kao u predhodnom paragrafu (jednačina 1.12), stim što je, u ovom slučaju, zadržan red, a ne polinom. Rešenje je konačno, jer je argument $\rho\in(0,1)$, pa nema potrebe za prekidanjem reda. Odatle sledi, da energija čestice u potencijalu ovakvog tipa, nije kvantovana, već kontinualna.

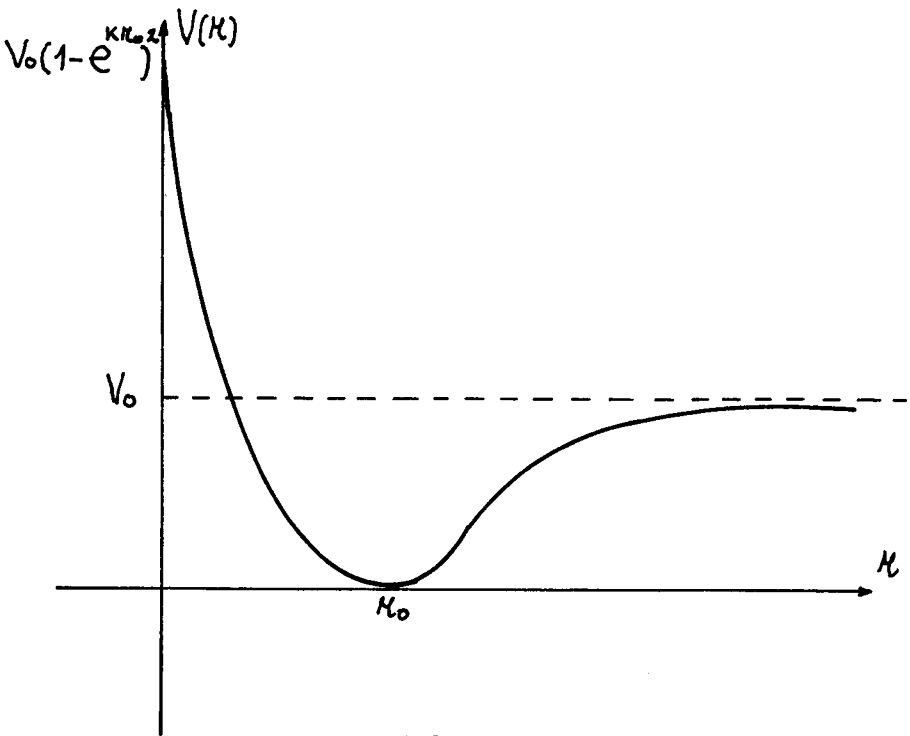
§ 3. Morzov potencijal

Ovaj potencijal ima oblik

$$V(r)=V_0\left[1-e^{-K(r-r_0)^2}\right] \qquad V_0>0 \quad K>0 \quad r_0>0 \quad r\in(0,\infty) \qquad (3.1)$$

(iako se u literaturi mogu naći pod ovim imenom i potencijali drugog oblika)

Grafički prikaz ovog potencijala je dat na slici 3.



sl. 3.

Za S česticu $(\ell=0)$, talasna funkcija se odredjuje iz jednačine

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\left[1-e^{-K(r-r_0)^2}\right]\right\}\Psi+\frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}=0 \qquad (3.1)$$

Ova se jednačina smenom $\varphi(r)=r^{-1}\Psi(r)$ transforimiše u jednačinu

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\left[1-e^{-K(r-r_0)^2}\right]\right\}\varphi=0 \qquad (3.2)$$

Pogodnom smenom $e^{-K\rho}=\xi$ jednačina (3.2) se transformiše u

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{d\varphi}{d\xi}+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2K^2}(E-V_0)\frac{1}{\xi^2}+2\frac{2\mu V_0}{\hbar^2K^2}\frac{1}{\xi}-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2K^2}\right\}\varphi=0 \qquad (3.3)$$

Ovu jednačinu pokušaćemo da svedemo na Vitekerovu (paragraf 5, glave I). U smislu gore navedenog cilja, uvodimo smenu

$$\varphi=\xi^{-1/2}W(\xi) \qquad (3.4)$$

posle čega (jednačina (3.3) postaje

$$\frac{d^2W}{d\xi^2}+\left\{-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2K^2}+\frac{4\mu V_0}{\hbar^2K^2}\frac{1}{\xi}+\frac{\frac{1}{4}-\frac{2\mu(V_0-E)}{\hbar^2K^2}}{\xi^2}\right\}W=0 \qquad (3.5)$$

U jednačinu (3.5) uvodimo smenu argumenta

$$\xi=\frac{1}{2}\frac{\hbar K}{\sqrt{2\mu V_0}}x \qquad (3.6)$$

tako da je konačno svodimo na Vitekerovu jednačinu

$$\frac{d^2W}{d\xi^2}+\left\{-\frac{1}{4}+\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar K}\frac{1}{x}+\frac{\frac{1}{4}-\frac{2\mu(V_0-E)}{\hbar^2K^2}}{x^2}\right\}W=0 \qquad (3.7)$$

Da bi se jednačina (3.7) potpuno poklopila sa Vitekerovom, očigledno, mora da je

$$K'=\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar K}$$
$$m=\frac{1}{\hbar K}\sqrt{2\mu(V_0-E)} \qquad (3.8)$$
$$\xi=\frac{1}{2K}x \qquad \xi\in(e^{K r_0},0) \quad x\in(2Ke^{K r_0},0)$$

Rešenja jednačine (3.7) su Vitekerove funkcije $W_{K,m}(x)$, tako da posle normiranja

$$N^2_{K,m}\int_0^{2Ke^{K r_0}}\frac{dx}{x^2}W^2_{K,m}(x)=1 \qquad (3.9)$$

Konačno možemo pisati talasnu funkciju u obliku

$$\Psi_{K,m}(r)=N_{K,m}r^{-1}e^{-Ke^{K(r_0-r)}}e^{mK(r_0-r)}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{\Gamma(2m+1)\,\Gamma(m-K+1/2+s)}{\Gamma(m-K+1/2)\,s!\,\Gamma(2m+1+s)}e^{sK(r_0-r)}(2K)^s \qquad (3.10)$$

§4. O Laplasovim transformacijama

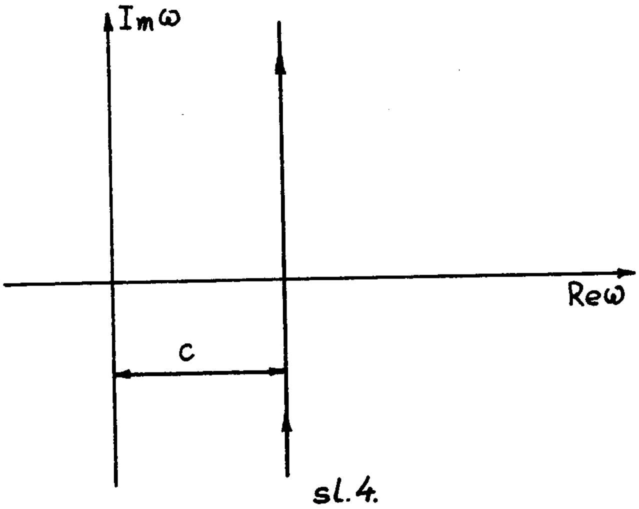
Lapalasova transformacija neke funkcije $y(x)$ je definisana kao

$$Y(\omega)=\int_0^\infty dx\, e^{-\omega x} y(x) \tag{4.1}$$

gde je, $\omega = c + is$, a inverzna Lap~~s~~lasova transformacija je definisana kao

$$y(x)=\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} Y(\omega)\, e^{\omega x} d\omega \tag{4.2}$$

Integracija se vrši duž prave linije $\mathrm{Re}\,\omega = c = const.$ ($c>0$ i treba da bude veće od realnih delova svih singulariteta)



sl.4.

Integral (4.1) postoji samo u desnoj poluravni ω $(\mathrm{Re}\,\omega > \alpha)$ gde je, α minimalna granica za c . U toj oblasti je transform $Y(\omega)$ analitičan, obično se $Y(\omega)$ u levoj poluravni može odrediti pomoću analitičkog produženja.

Integral (4.2) za $x>0$ daje y (ili $\frac{1}{2}\left[y(x+)+y(x-)\right]$, što je prediznije), a za $x<0$ on je automatski jednak nuli. Podrazumevaćemo da su sve funkcije, koje se mogu transformisati Laplasovom transformacijom, jednake nuli za negativne vrednosti argumenta.

Neke osobine Lap~~ł~~lasovih transformacija:

I Transformacija od izvoda

$$1.\quad Y=\int_0^\infty dx\, e^{-\omega x} y(x)=\omega Y-y(0) \tag{4.3}$$

$$2.\quad \frac{dY}{d\omega}=\int_0^\infty dx\, x\, e^{-\omega x} y(x)=-\omega\frac{dY}{d\omega}-Y \tag{4.4}$$

$$3.\quad \frac{d^2Y}{d\omega^2}=\int_0^\infty dx\, x^2 e^{-\omega x} y(x)=\omega\frac{d^2Y}{d\omega^2}+2\frac{dY}{d\omega} \tag{4.5}$$

$$4.\quad \int_0^\infty dx\, e^{-\omega x} y''(x)=\omega^2 Y-\omega y(0)-y'(0) \tag{4.6}$$

$$5.\quad \int_0^\infty dx\, x\, e^{-\omega x} y''(x)=-\omega^2\frac{dY}{d\omega}-2\omega Y+y(0) \tag{4.7}$$

$$6.\quad \int_0^\infty dx\, x^2 e^{-\omega x} y''(x)=\omega^2\frac{d^2Y}{d\omega^2}+4\omega\frac{dY}{d\omega}+2Y \tag{4.8}$$

II Transformacija od integrala

$$\int_0^\infty dx\, e^{-\omega x}\int_0^x y(t)\,dt=\frac{1}{\omega}Y \tag{4.9}$$

III

$$\int_0^\infty dx\, e^{-\omega x} y(x+a)=e^{a\omega}\left\{Y(\omega)-\int_0^a y(x)e^{-\omega x}dx\right\} \tag{4.10}$$

$$\int_0^\infty dx\, e^{-\omega x} y(x-a)=e^{-a\omega}Y(\omega) \tag{4.11}$$

IV Neka su $y_1(x)$ i $y_2(x)$ dve proizvoljne funkcije. Odredimo njihovu kontrakciju jednakošću

$$g(x)=\int_{-\infty}^{\infty} y_1(m)\, y_2(x-m)\,dm \tag{4.12}$$

onda je

$$G(\omega)=Y_1(\omega)\cdot Y_2(\omega) \tag{4.13}$$

V. Ako je Laplasova transformacija funkcije $y(x)$ racionalna funkcija $Y(\omega)=\frac{P_m(\omega)}{Q_n(\omega)}$, gde su $P_m(\omega)$ i $Q_n(\omega)$ polinomi reda n i m $(n>m)$, onda je inverzna Laplasova transformacija odredjena relacijom

$$y(x)=\sum_{k=1}^{l}\frac{1}{(n_k-1)!}\lim_{\omega\to a_k}\frac{d^{n_k-1}}{d\omega^{n_k-1}}\left\{(\omega-a_k)^{n_k}Y(\omega)e^{\omega x}\right\} \tag{4.14}$$

gde je, a_k nula n_k-tog reda polinoma $Q_n(\omega)$

$$Q_n(\omega)=A_n\prod_{k=1}^{l}(\omega-a_k)^{n_k} \qquad \sum_{k=1}^{n}n_k=n$$

Laplasova transformacija se vrlo često koristi u rešavanju diferencijalnih jednačina. Ako primenimo, sada, Laplasovu transformaciju na jednačine oblika

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\left(c^2+Ae^{\alpha x}+Be^{\beta x}\right)y=0 \tag{4.15}$$

dobijamo, na osnovu relacija (4.3) do (4.8),

$$\omega^2Y(\omega)-\omega y(0)-y'(0)+c^2Y(\omega)+AY(\omega-\alpha)+BY(\omega-\beta)=0 \tag{4.16}$$

Ako u (4.16) uvedemo operatore $\hat{T}_{-\alpha}$ i $\hat{T}_{-\beta}$ sa osobinom

$$\hat{T}_{-\alpha}f(\omega)=f(\omega-\alpha) \qquad \hat{T}_{-\beta}f(\omega)=f(\omega-\beta) \tag{4.17}$$

jednačina (4.16) postaje

$$Y(\omega)=\frac{\omega y(0)+y'(0)}{\left[A\hat{T}_{-\alpha}+B\hat{T}_{-\beta}+(\omega^2+c^2)\right]} \tag{4.18}$$

Operatori $\hat{T}_{-\alpha}$ i $\hat{T}_{-\beta}$ se nazivaju operatorima translacije. Na osnovu (4.2) i (4.18) nalazimo traženu funkciju kao

$$y(x)=\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} Y(\omega)\, e^{\omega x}\, d\omega \tag{4.19}$$

§ 5. Sistem od dve čestice u Jukavinom potencijalu

Jukavin potencijal je dat kao

$$V(r)=-V_0\frac{1}{Kr}e^{-Kr} \qquad V_0>0 \quad K=\frac{1}{r_0}>0 \tag{5.1}$$

Svojstveni problem hamiltonijana glasi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta-\frac{V_0}{Kr}e^{-Kr}\right)\Psi=E\Psi \tag{5.2}$$

gde je, $\mu=\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ i $r\equiv|\vec{r}_1-\vec{r}_2|$ redukovana masa dveju čestica i njihovo relativno rastojanje.

Radijalni deo jednačine (5.2), posle uvodjenja smene $d(r)=r^{-1}Z(r)$, postaje

$$\frac{d^2Z}{dr^2}+\left[-a^2+Q\frac{e^{-Kr}}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]Z=0 \tag{5.3}$$

gde je, $a^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ $\qquad Q=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 K}$

Ako nadalje u jednačinu (5.3) stavimo da je

$$Z = r^{\ell+1} y(r) \tag{5.4}$$

ona prelazi u

$$\frac{d^2 y}{dr^2} + \frac{2(\ell+1)}{r}\frac{dy}{dr} + \left(-a^2 + \frac{Q e^{-Kr}}{r}\right) y = 0 \tag{5.5}$$

Ako izvršimo Laplasovu transformaciju jednačine (5.5) i iskoristimo izraze iz predhodnih paragrafa, dobićemo

$$\frac{dY(\omega)}{d\omega} - \frac{2\ell\omega}{\omega^2 - a^2} Y(\omega) - \frac{Q}{\omega^2 - a^2} Y(\omega + K) = \frac{(2\ell+1)\, y(0)}{\omega^2 - a^2} \tag{5.6}$$

Rešenje jednačine (5.6) tražimo u obliku

$$Y(\omega) = (\omega^2 - a^2)^{\ell}\, C(\omega) \tag{5.7}$$

koji posle zamene u (5.6), daje

$$\frac{dC(\omega)}{d\omega} - Q A_\ell(\omega) C(\omega + K) = -y(0)\, B_\ell(\omega) \tag{5.8}$$

gde je,

$$A_\ell(\omega) = (\omega^2 - a^2)^{-1} \left[\frac{(\omega+K)^2 - a^2}{\omega^2 - a^2}\right]^{\ell} \qquad B_\ell(\omega) = \frac{2\ell+1}{(\omega^2 - a^2)^{\ell+1}} \tag{5.9}$$

Ako uvedemo operatore ~~se~~

$$\hat{D}_\omega f(\omega) = \frac{df(\omega)}{d\omega} \qquad \hat{D}_\omega^{-1} = \int d\omega f(\omega) \qquad \hat{T}_K f(\omega) = f(\omega + K) \tag{5.10}$$

$$\hat{A}_\ell(\omega) f(\omega) = A_\ell(\omega) f(\omega)$$

nalazimo da je

$$C(\omega) = \left[1 - Q \hat{D}_\omega^{-1} \hat{A}_\ell(\omega) \hat{T}_K\right] (-y(0))\, \hat{D}_\omega^{-1} B_\ell(\omega) \tag{5.11}$$

Iz (5.11) nalazimo

$$C_\ell(\omega)=-y(0)\sum_{n=0}^{\infty}Q^n\left[\hat{D}_\omega^{-1}\hat{A}_\ell(\omega)\hat{T}_k\right]^n\hat{D}_\omega^{-1}B_\ell(\omega) \tag{5.12}$$

pa možemo pisati konačno rešenje za $\alpha(\kappa)$

$$\alpha_\ell(\kappa)=\tilde{C}\kappa^\ell\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}d\omega\, e^{\kappa\omega}\left\{(\omega^2-a^2)^\ell\sum_{n=0}^{\infty}Q^n\left[\hat{D}_\omega^{-1}\hat{A}_\ell(\omega)\hat{T}_k\right]^n\hat{D}_\omega^{-1}B_\ell(\omega)\right\} \tag{5.13}$$

Najprostiji oblik dobija se za s česticu, kada je $\ell=0$. U tom slučaju je

$$\begin{aligned}A_0(\omega)&=(\omega^2-a^2)^{-1}\equiv R(\omega)\\ B_0(\omega)&=A_0(\omega)=(\omega^2-a^2)^{-1}\equiv R(\omega)\\ C_0(\omega)&=Y_0(\omega)\end{aligned} \tag{5.14}$$

$$Y_0(\omega)=-y(0)\sum_{n=0}^{\infty}Q^n\left[\hat{D}_\omega^{-1}R(\omega)\hat{T}_k\right]^n\hat{D}_\omega^{-1}R(\omega) \tag{5.15}$$

Uzastopni članovi reda (5.15) su dati kao

$$U_0(\omega)=\hat{D}_\omega^{-1}R(\omega)=\int d\omega\frac{1}{\omega^2-a^2}=\frac{1}{2a}\ln\frac{\omega-a}{\omega+a} \tag{5.16}$$

$$U_1(\omega)=\frac{1}{2a}\int d\omega(\omega^2-a^2)^{-1}\hat{T}_k\ln\frac{\omega-a}{\omega+a}=\frac{1}{2a}\int d\omega(\omega^2-a^2)^{-1}\ln\frac{\omega+k-a}{\omega+k+a} \tag{5.17}$$

$$U_2(\omega)=\int d\omega(\omega^2-a^2)^{-1}\hat{T}_k U_1(\omega)=\frac{1}{2a}\int d\omega(\omega^2-a^2)\int d\omega\left[(\omega+k)^2-a^2\right]\ln\frac{\omega-a+2k}{\omega-a+2k} \tag{5.18}$$

. . . .

$$2a\,U_n(\omega)=\hat{J}_\omega^n\prod_{\mu=0}^{n-1}\left[(\omega-\mu k)^2-a^2\right]\ln\frac{\omega-a+\mu k}{\omega-a+\mu k} \tag{5.19}$$

gde je, $\hat{J}_\omega^n=\int d\omega\int d\omega\cdots\int d\omega$

Znači, za S česticu je:

$$Y_0(\omega)=C_0\sum_{n=0}^{\infty}Q^n\,U_n(\omega;K;a)\qquad C_0=-\frac{y(0)}{2}\qquad \prod_{\nu=0}^{-1}=1$$

$$U_n(\omega;K;a)=\int d\omega\int d\omega\ldots\int d\omega\,\ln\frac{\omega-a+nK}{\omega+a+nK}\prod_{\mu=0}^{n-1}\left[(\omega+\mu K)^2-a^2\right] \tag{5.20}$$

a talasna funkcija je data kao

$$d_0(\varkappa)=C_0\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}d\omega\,e^{\varkappa\omega}\sum_{n=0}^{\infty}Q^n U_n(\omega;K;a)=C_0\sum_{n=0}^{\infty}Q^n\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}d\omega\,e^{\varkappa\omega}U_n(\omega;K;a) \tag{5.21}$$

Ovde treba učiniti jednu napomenu: Ne sme se izvršiti integralna transformacija funkcije $R(\omega)=\int_0^{\infty}d\varkappa\,e^{-\omega\varkappa}R(\varkappa)$ i integracija, jer je

$$\hat{D}_\omega^{-1}R(\omega)=\int d\omega\frac{1}{\omega^2-a^2}\neq\hat{D}_\omega^{-1}\int_0^{\infty}d\varkappa\,e^{-\omega\varkappa}R(\varkappa)=-\int_0^{\infty}d\varkappa\frac{e^{-\omega\varkappa}}{\omega}R(\varkappa) \tag{5.22}$$

Zaista, s jedne strane imamo

$$\hat{D}_\omega^{-1}R(\omega)=\int d\omega\frac{1}{\omega^2-a^2}=\frac{1}{2a}\ln\frac{\omega-a}{\omega+a} \tag{5.23}$$

a s druge strane je

$$R(\varkappa)=\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}d\omega\frac{e^{\varkappa\omega}}{\omega^2-a^2}=\frac{1}{2\pi i}2\pi i\sum\mathrm{Res}\frac{e^{\omega\varkappa}}{\omega^2-a^2}=\frac{1}{a}\,\mathrm{sh}\,a\varkappa \tag{5.24}$$

pa je

$$\hat{D}_\omega^{-1}\int_0^{\infty}d\varkappa\,e^{-\omega\varkappa}R(\varkappa)=-\frac{1}{\omega(\omega^2-a^2)} \tag{5.25}$$

Znači $\int\frac{d\omega}{\omega^2-a^2}=\frac{1}{2a}\ln\frac{\omega-a}{\omega+a}$

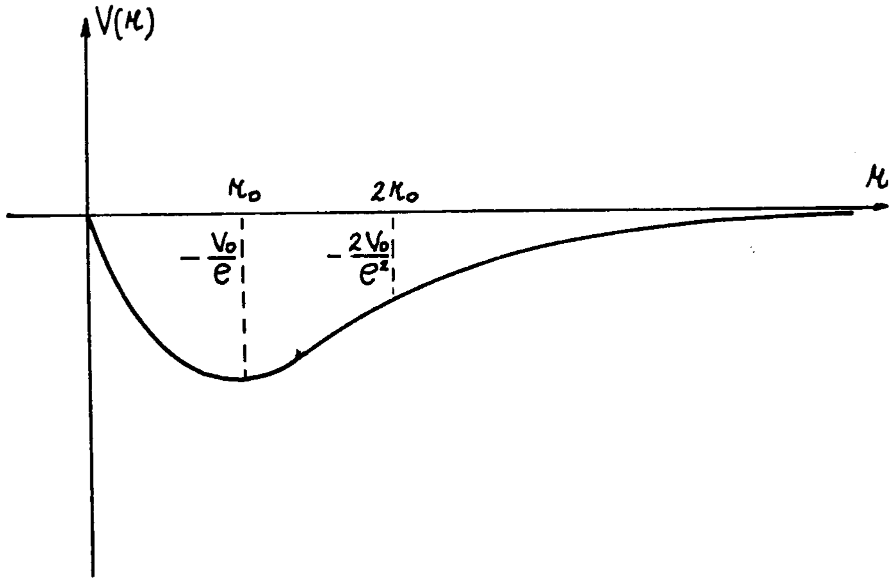
$$\int_0^{\infty}d\varkappa\,e^{-\omega\varkappa}\omega^{-1}R(\varkappa)=-\frac{1}{\omega(\omega^2-a^2)}$$

i sada je očigledno

$$\int\frac{d\omega}{\omega^2-\alpha^2}=-\int dr\, e^{-\omega r}\omega^{-1}R(r)$$

§ 6. Kretanje čestice u potencijalu $V(r)=-V_0\frac{r}{r_0}e^{-\frac{r}{r_0}}$

Grafički prikaz ovog potencijala je dat na slici.



sl.5.

Radijalni deo Šredingerove jednačine, za potencijal ovog tipa, ima oblik

$$\frac{d^2y}{dr^2}+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu V_0 K}{\hbar^2}r e^{-Kr}\right)y=0 \tag{6.1}$$

Ako sad primenimo Laplasovu transformaciju na jednačinu (6.1), dobijamo, saglasno sa izrazima (4.3) do (4.8) (glava IV),

$$\omega^2Y(\omega)+\frac{2\mu E}{\hbar^2}Y(\omega)-\frac{2\mu V_0 K}{\hbar^2}\frac{dY(\omega+K)}{d(\omega+K)}=\omega y(0)+y'(0) \tag{6.2}$$

Kako razmatramo slučaj $E<0$, onda uvodimo smenu

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2}=-a^2 \qquad \frac{2\mu V_0 K}{\hbar^2}=Q \tag{6.3}$$

i onda (6.2) postaje

$$Y(\omega)-Q\hat{A}_\omega\hat{T}_K\hat{D}_\omega Y(\omega)=\frac{\omega y(0)+y'(0)}{\omega^2-a^2} \tag{6.4}$$

Tražićemo rešenje takvo da je $y(0)=0$. Tada je

$$Y(\omega)=y'(0)\left[1-Q\hat{A}_\omega\hat{T}_K\hat{D}_\omega\right]^{-1}\frac{1}{\omega^2-a^2}=y'(0)\sum_{n=0}^{\infty}Q^n\left[\hat{A}_\omega\hat{T}_K\hat{D}_\omega\right]^n\frac{1}{\omega^2-a^2} \tag{6.5}$$

Razmatramo uzastopne članove reda

$$Y(\omega)=y'(0)\left\{\frac{-Q}{\omega^2-a^2}\frac{2(\omega+K)}{[(\omega+K)^2-a^2]}-Q^2\frac{1}{\omega^2-a^2}\hat{T}_K\frac{d}{d\omega}\frac{2(\omega+K)}{(\omega^2-a^2)[(\omega+K)^2-a^2]}+\cdots\right\} \tag{6.6}$$

$$y(r)=\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}d\omega\, e^{\omega r}Y(\omega) \qquad \overset{(0)}{Y}(\omega)=\frac{y'(0)}{\omega^2-K^2} \qquad \overset{(0)}{y}(r)=\frac{1\,\mathrm{sh}\,ar}{a} \tag{6.7}$$

Odavde se vidi, da se rešenje ne može normirati u intervalu $r\in(0,\infty)$, jer $\mathrm{sh}\,ar\to\infty$ $r\to\infty$. Takodje je jasno, da, ako uzmemo $y'(0)=0$ $y(0)\neq 0$, onda je $\overset{(0)}{Y}(\omega)=y(0)\frac{\omega}{\omega^2-a^2}$ $\overset{(0)}{y}(r)=\mathrm{ch}\,ar$, pa se rešenje opet ne može normirati.

Prema tome, mora se razmotriti slučaj $E>0$ (slučaj $E=0$ ne dolazi u obzir, jer je tada $y(r)=0$, a odatle je $\Psi=0$, što se kosi sa postulatima kvantne mehanike). Prema tome je

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2}=\alpha^2 \qquad y(0)=0 \qquad \hat{A}_\omega\to\hat{B}_\omega=\frac{1}{\omega^2+\alpha^2} \tag{6.8}$$

pa (6.5) postaje

$$Y(\omega)=y'(0)\left(\frac{1}{\omega^2+\alpha^2}+\frac{Q}{\omega^2+\alpha^2}\hat{T}_K\frac{d}{d\omega}\frac{1}{\omega^2+\alpha^2}+\frac{Q^2}{\omega^2+\alpha^2}\hat{T}_K\frac{d}{d\omega}\frac{1}{\omega^2+\alpha^2}\hat{T}_K\frac{d}{d\omega}\frac{1}{\omega^2+\alpha^2}+\right) \tag{6.9}$$

Traženjem inverznih Laplasovih transformacija za članove reda (6.9), uz uslov da je $\frac{1}{\omega^2 \alpha^2} = U_0 i$, nalazimo

$$U_0(r) = \frac{\sin \alpha r}{\alpha} \tag{6.10}$$

$$U_1(r) = -2Q\left\{\left[\frac{K^2+2\alpha^2}{K\alpha(K^2+4\alpha^2)} + \frac{4\alpha K^3 + 2\alpha r}{4\alpha^2 K^2 (K^2+4\alpha^2)^2} e^{-rK}\right]\sin \alpha r + \right.$$
$$\left. + \left[-\frac{1}{K^2+4\alpha^2} + \frac{12\alpha^2 K^2 + 16\alpha^4 + 4\alpha^2 r}{4\alpha^2 K^2 (K^2+4\alpha^2)^2} e^{-rK}\right]\cos \alpha r\right\} \tag{6.11}$$

Iz (6.11), a na osnovu,

$$Y^{(1)}(r) = y'(0)\left(\frac{\sin \alpha r}{\alpha} - U_1(r)\right) \qquad Y^{(1)}(0) = 0 \tag{6.12}$$

konačno nalazimo izraz za energiju

$$E = \frac{\hbar^2 K^2 (3-K^2)}{8\mu (K^2-1)} \tag{6.13}$$

odakle vidimo da je energija za kretanje čestice u potencijalu tipa $V(r) = -V_0 \frac{r}{r_0} e^{-\frac{r}{r_0}}$ kvantovana.

§ 7. Kretanje čestice u potencijalu tipa $V(r) = \frac{V_0}{r^2 \pm r_0^2}$

Opšta postavka problema

Šredingerova jednačina za radijalni deo, posle uvodjenja smene $\psi = r^{-1} Z(r)$, za ovaj slučaj postaje

$$\frac{d^2 Z}{dr^2} + \left[K^2 - W(r)\right] Z = 0 \tag{7.1}$$

gde je,

$$K^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \qquad W(r) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2} \tag{7.2}$$

Pri rešavanju moraju se uzeti u obzir neke predpostavke.

Predpostavka I

Kao prvo, predpostavićemo da se $W(r)$ može napisati u obliku

$$W(r)=\frac{a_1}{r-r_1}+\frac{a_2}{r-r_2}+\quad+\frac{a_n}{r-r_n}=\sum_{s=1}^{n}\frac{a_s}{r-r_s} \tag{7.3}$$

Brojevi r_s $s\in(1\ldots\ldots n)$ su realni, različiti i pozitivni. Dopušta se mogućnost, da jedan od r_s bude jednak nuli. Koeficijenti a_s se ra~~zlikuju~~čunaju, tako što se (7.3) pomnoži sa $r-r_s$ i pusti da $r\to r_s$

$$(r-r_s)W(r)=a_1\frac{r-r_s}{r-r_1}+\cdots+a_s+\cdots+a_n\frac{r-r_s}{r-r_n} \tag{7.4}$$

$$a_s=\lim_{r\to r_s}(r-r_s)\,W(r) \tag{7.5}$$

Sada jednačinu (7.1) možemo pisati

$$\frac{d^2 Z}{dr^2}+K^2 Z=\sum_{s=1}^{n}a_s\frac{1}{r-r_s} \tag{7.6}$$

U jednačini (7.6) se izvrše Laplasove transformacije i posle množenja sa $e^{r\omega}$ i integracije $\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}dr$, dobija se

$$(\omega^2+K^2)Z(\omega)=\sum_{s=1}^{n}a_s e^{r_s\omega}\int_0^{\infty}d\omega'\,Z(\omega')\,e^{-r_s\omega'}$$

$$Z(\omega)=\sum_{s=1}^{n}a_s C_s\frac{e^{\omega r_s}}{\omega^2+K^2}\qquad C_s=\int_0^{\infty}Z(\omega)\,e^{-\omega r_s}d\omega \tag{7.7}$$

Jednačina (7.7) zahteva sukcesivno množenje sa $e^{-\omega r_1}$, $e^{-\omega r_2}$, $e^{-\omega r_3}$ itd i integraciju $\int_0^{\infty}d\omega\frac{e^{\omega(r_s\ r_{s'})}}{\omega^2+K^2}$. Bar jedan od ovih integrala divergira, pa se može primeniti samo ako je, recimo, $r_1\neq 0$ a ostali ravni nuli, tj. $W(r)=\frac{a_1}{r-r_1}$.

Predpostavka II

Druga predpostavka, koju ćemo učiniti, je da se funkcija $W(r)$ može razviti na sledeći način

$$W(r)=\sum_{s=a}^{n}\frac{b_s}{r-ir_s}\qquad b_s=\lim_{r\to ir_s}(r-ir_s)W(r)\tag{7.8}$$

Isto kao kod prve predpostavke, svi r_s su realni i različiti i jedan od njih može da bude jednak nuli. Posle izvršenih Laplasovih transformacija, kao i u predhodnom slučaju, i posle množenja sa $e^{-i\omega r_{s'}}$ $s'\in(1,2,\dots n)$ i integracijom ~~je~~ sa $\int_0^\infty d\omega$, dobija se homogen sistem za odredjivanje konstante

$$C_{s'}=\sum_{s=0}^{n}M_{s's}C_s\tag{7.9}$$

$$M_{s's}=b_s\int_0^\infty d\omega\,\frac{e^{i\omega(r_s-r_{s'})}}{\omega^2+K^2}\tag{7.10}$$

Determinanta sistema (7.10) odredjuje dozvoljene vrednosti energije, dok je

$$Z(r)=\sum_{s=0}^{n}a_sC_s\int_0^\infty d\omega\,\frac{e^{-\omega(r-ir_s)}}{\omega^2+K^2}\tag{7.11}$$

pri čemu je jedna od konstanti C_s proizvoljna.

Uradimo sad konkretan problem za potencijal oblika

$$V(r)=V_0\frac{1}{r^2-r_0^2}\tag{7.12}$$

U ovom slučaju, i posle uvodjenja smene argumenta $r=i\varrho$, jednačina (7.1) postaje

$$\frac{d^2Z}{d\varrho^2}-K^2Z=\frac{W_0}{\varrho^2+r_0^2}\tag{7.13}$$

Ako izraz

$$\frac{W_0}{\rho^2+\kappa_0^2}=\frac{W}{2i\kappa_0}\left[\frac{1}{\rho-i\kappa_0}-\frac{1}{\rho+i\kappa_0}\right] \tag{7.14}$$

transformišemo i uvrstimo u (7.9), on postaje

$$Z(\omega)=\frac{W_0}{2i\kappa_0}\frac{e^{i\omega\kappa_0}}{\omega^2+K^2}-\frac{W_0}{2i\kappa_0}\frac{e^{-i\omega\kappa_0}}{\omega^2+K^2} \tag{7.15}$$

$$C_{s'}=\sum_s M_{s's}C_s \tag{7.16}$$

Ovde su

$$M_{11}=\frac{W_0}{2i\kappa_0}\int_0^\infty\frac{d\omega}{\omega^2+K^2} \qquad M_{22}=-\frac{W_0}{2i\kappa_0}\int_0^\infty\frac{d\omega}{\omega^2+K^2} \tag{7.17}$$

$$M_{12}=\frac{W_0}{2i\kappa_0}\int_0^\infty\frac{d\omega\, e^{2i\omega\kappa_0}}{\omega^2\ \ K^2} \qquad M_{21}=-\frac{W_0}{2i\kappa_0}\int_0^\infty\frac{d\omega\, e^{-2i\omega\kappa_0}}{\omega^2+K^2} \tag{7.18}$$

i odavde je za

$$K^2>0 \quad E>0 \qquad \int_0^\infty\frac{d\omega}{\omega^2+K^2}=\frac{\pi}{2K} \tag{7.19}$$

$$K^2<0 \quad E<0 \qquad \int_0^\infty\frac{d\omega}{\omega^2-K^2}=0$$

i

$$\begin{vmatrix} 1-M_{11} & -M_{12} \\ -M_{21} & 1-M_{22} \end{vmatrix}=0 \tag{7.20}$$

Takodje, iz (7.20) sledi da je za

$$K<0 \qquad M_{12}M_{21}=1$$

$$K>0 \qquad M_{12}M_{21}=1+\frac{W_0^2\pi^2}{16\kappa_0^2K^2}$$

§8. Uopštena primena Laplasovih transformacija

U praksi su najčešći tipovi potencijala uopšteno dati, kao polinom po stepenima r. Ovakvi problemi se, osim veoma malog broja slučajeva, teško mogu rešiti. U ovom delu, biće predpostavljeno da je potencijal dat kao polinom po stepenima r i da rešenje talasne jednačine $y(r)$ ima Laplasov transform, tj.

$$\left.\begin{aligned} &\lim_{r\to\infty} y(r)e^{-Kr}\to 0 \\ &\lim_{r\to\infty} y'(r)e^{-Kr}\to 0 \end{aligned}\right\} \quad K>0 \tag{8.1}$$

U ovakvom slučaju, može se dati šematski postupak za rešavanje date jednačine, pomoću koga se može naći i analitičko rešenje, ali uz veoma glomazan račun. S obzirom da računari sve više ulaze u upotrebu, postupak koji će biti prikazan daje gotov recept za rešenje, koje kompjuter lako može da nadje sa potrebnom tačnošću.

Neka je potencijal oblika

$$V(r)=r^n \qquad n\neq -2 \tag{8.2}$$

Radijalni deo talasne jednačine, posle uvodjenja smene funkcije $\Psi(r)=r^{-1}y(r)$ i smene argumenta $r=a\rho$, ima oblik

$$\frac{d^2y}{d\rho^2}+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}a^2+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 K_0^n}a^{n+2}(K_0\rho)^n\right]y=0 \tag{8.3}$$

U (8.3) ćemo staviti da je

$$a=\left(\frac{\hbar^2 K_0^n}{2\mu V_0}\right)^{\frac{1}{n+2}} \qquad \alpha=\frac{2\mu E a^2}{\hbar^2} \tag{8.4}$$

i posle uvodjenja nove smene argumenta $K_0\rho = e^{K_0x}$ $x\in(-\infty,\infty)$, ona postaje

$$\frac{d^2y}{dx^2} - K_0\frac{dy}{dx} + e^{2K_0x}\left(\alpha + e^{nK_0x}\right)y = 0 \tag{8.5}$$

Sada izvršimo Laplasovu transformaciju jednačine (8.5) i na osnovu (8.1) dobijamo

$$(K^2 - K_0K)Y(K) + \alpha Y(K-2K_0) + Y(K-2K_0-nK_0) = (K-K_0)y(0) + y'(0) \tag{8.6}$$

Uvodjenjem operatora translacije $\hat{T}_{-K_0}$, sa osobinama

$$\hat{T}_{-K_0} f(K) = f(K-K_0) \qquad \hat{T}_{-2K_0} = \hat{T}^2_{-K_0}$$
$$\hat{T}_{-nK_0} = \hat{T}^n_{-K_0} \qquad \hat{T}^n_{-K_0} = f(K-nK_0) \tag{8.7}$$

i operatora $\hat{A}(K)$, sa osobinama

$$\hat{A}(K) f(K) = A(K) f(K) \qquad A(K) \equiv \frac{1}{K(K-K_0)} \tag{8.8}$$

jednačinu (8.6) možemo napisati kao

$$\left[1 + \hat{A}\hat{T}^2(\alpha + \hat{T}^n)\right]Y(K) = \frac{y(0)}{K} + y'(0)\frac{1}{K(K-K_0)} \tag{8.9}$$

čije je rešenje

$$Y(K) = y(0)\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left[\hat{A}\hat{T}^2(\alpha+\hat{T}^n)\right]^n\frac{1}{K} - y'(0)\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\left[\hat{A}\hat{T}^2(\alpha+\hat{T}^n)\right]^n\frac{1}{K(K-K_0)} \tag{8.10}$$

Da bi se našla talasna funkcija, ostaje nam još da izvršimo inverznu Laplasovu transformaciju izraza (8.10).

Sve se ovo može primeniti i za potencijal tipa

$$V(r) = \sum_{n=1}^{m} a_n\left(\frac{r}{r_0}\right)^n \tag{8.11}$$

Radijalni deo talasne jednačine, za potencijal ovog oblika, je dat kao

$$\frac{d^2y}{d\rho^2}-K_0\frac{dy}{d\rho}+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}e^{2K_0\rho}+\sum_{n=1}^{m}b_n\,e^{(2+n)K_0\rho}\right]y=0 \qquad (8.12)$$

gde je, $b_n=\frac{2\mu a_n}{\hbar}$ $\qquad K_0\equiv\frac{1}{r_0}$

Primenom Lap~~l~~lasove transformacije i uz korišćenje osobina (4.3) do (4.8), (glava IV), i izraza (8.1) imamo da je

$$K(K-K_0)Y(K)+\hat{R}_{K_0}Y(K)=(K-K_0)y(0)+y'(0) \qquad (8.13)$$

gde je, $\hat{R}_{K_0}=\frac{2\mu E}{\hbar^2}\hat{T}_{-2K_0}+\sum_{n=1}^{m}b_n T_{-(n+2)K_0}$

Jednačina (8.13) se može napisati kao

$$\left[1+\hat{A}_K\hat{R}_{K_0}\right]Y(K)=\frac{1}{K}y(0)+\frac{1}{K(K-K_0)}y'(0) \qquad (8.14)$$

gde su korišćene oznake kao u predhodnom slučaju. Rešenje jednačine (8.14) je dato kao

$$Y(K)=y(0)\sum_{s=0}^{\infty}(-1)^s(\hat{A}_K\hat{R}_{K_0})^s\frac{1}{K}+\sum_{s=0}^{\infty}(-1)^s(\hat{A}_K\hat{R}_{K_0})^s\frac{1}{K(K-K_0)}y'(0) \qquad (8.15)$$

Odavde je konačno

$$y(\rho)=\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}dK\,e^{K\rho}Y(K) \qquad (8.16)$$

Kao što se vidi, osnovnu teškoću u računu predstavlja veoma brzo multipliciranje članova zbog uzastopne primene polinoma po translacionim operatorima $\hat{R}_{K_0}$, koji figurišu u rešenju.

Z A K L J U Č A K

Koliko je meni poznato, kao originalna dostignuća u procesu rešavanja diferencijalnih jednačina mogu se oceniti rezultati, koji su dobijeni u §1, §2, §4, glava II. Takodje, koliko mi je poznato, u literaturi nije analiziran potencijal tipa $\frac{V_0}{\kappa^2 \pm \kappa_0^2}$, obradjen u §7, glava IV.

Mišljenja sam, da su dva operatorska metoda koji su ovde izloženi veoma pogodni za traženje numeričkih rešenja uz upotrebu kompjutera, jer oni u sebi sadrže potpuni algoritam za rešavanje. Krug jednačina, koji se ovim metodama može rešiti analitički nije, nažalost, širok, tako da izložena metodika pretenduje samo da bude olakšica pri numeričkom rešavanju.

Na kraju treba reći (vidi §1, §2, §3, §5, §6; IV), da se može izvući jedan opšti zaključak o potencijalima koji su konstruisani od eksponencijalnih funkcija. Ako su u pitanju pozitivni eksponenti, energija se uvek kvantuje, dok se za negativne eksponente ona može kontinualno menjati. Pošto negativni eksponenti odgovaraju nultom potencijalu u beskonačnosti, odavde bi se mogao izvesti zaključak, da, ako čestica na beskonačnom rastojanju ne interaguje (što je i realno), a zatim izmedju njih nastupi interakcija sa eksponencijalnom zavisnošću od rastojanja, onda je njihov spektar dat u vidu kontinualne trake.

L I T E R A T U R A

1. Whittaker - Watson
Modern analysis - Gambridge university press 1952

2. D. S. Mitrinović
Uvod u specijalne funkcije - Beograd 1975

3. L. D. Landau - E. M. Lifšic
Kvantovaja mehanika - Moskva 1974

4. A. S. Davidov
Kvantovaja mehanika - Moskva 1973

5. A. N. Tihonov - A. A. Samarskij
Uravnenija matematičeskoj fiziki - Moskva 1977

6. V. I. Smirnov
Kurs viššef matematiki III - Moskva 1974

7. V. A. Ditkin - A. P. Prudnikov
Operacionoe isčislenije - Moskva 1975

8. L. I. Sedov
Teoretičeskie modeli - Skopje 1975

9. R. P. Fejnman
Fejnmanovskie lekciji po fizike, II - Moskva 1976

10. L. D. Landau - E. M. Lifšic
Statističeskaja fizika - Moskva 1976.

P R I M E Ć E N E   G R E Š K E

strana	red	stoji	treba da stoji
16	17		$\mathcal{U}(0)$
23	8	asimptockog	asimptotskog
28	20	da bi smo jednačinu /5.1/ ...	trebamo jednačinu /5.1/ ...
49	10,11, 12,	energije: 10eV; 0,1eV; 1eV	energije: 1eV; 0,01eV; 0,1eV
54	7	$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{1}{2}m\omega^2 r$	$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$
56	14	... kao proizvod izraza /2.4/ i /2.13/	... kao proizvod izraza /2.3/ i /2.13/
62	9	$\Psi(\xi,\eta,\zeta)=\frac{e^{-1/2(\xi^2\eta^2\zeta^2)}}{(2^n n!\,\pi^{1/2})^{3/2}}H_{n_x}(\xi)H_{n_y}(\eta)H_{n_z}(\zeta)$	$\Psi(\xi,\eta,\zeta)=\frac{e^{-1/2(\xi^2+\eta^2+\zeta^2)}}{(2^n n!\,\pi^{1/2})^{3/2}}H_{n_x}(\xi)H_{n_y}(\eta)H_{n_z}(\zeta)$
75	1	$Y(\omega)=\frac{\omega y(0)+y'(0)}{[A\hat{T}_{-\alpha}+B\hat{T}_{-\beta}+(\omega^2+C^2)]}$	$[A\hat{T}_{-\alpha}+B\hat{T}_{-\beta}+(\omega^2+C^2)]Y(\omega)=\omega y(0)+y'(0)$
82	11	$(r\ r_s)W(r)=a_1\frac{r-r_s}{r-r_1}+\cdots$	$(r-r_s)W(r)=a_1\frac{r-r_s}{r-r_1}+\cdots$
28	10,11	koeficijentna funkcija	konfluentna funkcija

Do 49 strane umesto sferni stoji sverni i umesto Šredinger stoji Šedinger /to je nepravilno/. Takođe grafici na stranama 66,68, nisu pravilno nacrtani.