

UNIVERZITET U NIŠU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU

**NAJČEŠĆE KORIŠĆENE BAZISNE
FUNKCIJE U IMPULSNOM PROSTORU**

M A S T E R R A D

Mentor:
Dr Ivan D. Mančev

Student:
Marko J. Rančić

Niš, 2012. godina

SADRŽAJ

1. Uvod	1
2. Furijeova transformacija u kvantnoj mehanici	3
3. Slejterove orbitale u impulsnoj reprezentaciji	5
4. Gausove orbitale u impulsnoj reprezentaciji	20
5. Atom vodonika u impulsnoj reprezentaciji	25
6. Kulonovi Sturmiani u impulsnoj reprezentaciji	37
7. Dodatak	39
8. Zaključak	41
Literatura	42

1. UVOD

Kvantna mehanika ostaje eksperimentalno najproverenija **moderna** teorija fizike, sa mnogobrojnim upotrebama u fizičkim naukama i tehnici. Širok dijapazon njenih primena na različite konkretne probleme, njena uspešnost u objašnjavanju prirodnih fenomena i matematička elegantnost dobijenih rešenja nesumnjivo su je postavile na pijedestal kraljice ljudskog saznanja. Ipak, interpretacija dobijenih rešenja, a još više njihovo razumevanje, kao i razumevanje osnovnih postavki ove grane fizike, zaokupljali su maštu istraživača poslednjih gotovo devedeset godina. Ovaj nesumnjivi jaz između rešavanja konkretnih problema i interpretacije samih implikacija dobijenog rešenja možda se najbolje može predstaviti stihom čuvenog naučnika Erika Hikela:

*Ervin može svojim psi
Svaki problem rešiti
Ali niko ne zna kasti
Šta funkcija sama znači.*

U uskoj klasi problema za koje kvantna mehanika može pružiti analitička rešenja, sigurno je da je najdalekosežnije posledice za fiziku imalo rešavanje problema atoma vodonika. Rešavanjem znamenite Šredingerove jednačine za atom vodonika pa daljom transformacijom dobijenih rešenja (računanjem očekivanih vrednosti), pokazalo se da Borov radijus ne predstavlja definitivno rastojanje protona i elektrona u osnovnom stanju atoma vodonika, već **najverovatnije** rastojanje na kome će se sistem proton-elektron naći.

Dalji pokušaji primene kvantne mehanike na složenije atomske i molekularne sisteme apsolutno su neostvarivi bez uvođenja daljih aproksimacija. Jedna od sigurno najrasprostranjenijih aproksimacija jeste **linearna kombinacija atomskih orbitala** (LKAO), čiji je jedan od idejnih tvoraca upravo gorepomenuti Erik Hikel.

Analitička mehanika u osnovi poznaje tri formalizma. To su: Njutnov, Lagranžev i Hamiltonov formalizam. U zavisnosti od matematičke forme datog problema za dobijanje njegovih jednačina kretanja, koristi se jedan od ova tri formalizma. Aktivne promenljive u Lagranževom formalizmu su generalisane koordinate, generalisane brzine i vreme dok su u Hamiltonovom formalizmu generalisane koordinate i impulsi. U kvantnoj mehanici takođe se u zavisnosti od matematičkih potreba mogu koristiti različite promenljive (to se pre svega odnosi na impuls i koordinate). Efikasni mehanizmi koji nam omogućavaju da načinimo promenu koordinate $\rightarrow$ impuls i obratno nazivaju se Furijeova i inverzna Furijeova transformacija respektivno.

U ovom radu biće izvršena upravo jedna takva transformacija nad Slejterovim orbitalama, Gausovim orbitalama, vodoničnim talasnim funkcijama i Kulonovim Sturmijskim funkcijama. Navedene funkcije su jedne od najčešće korišćenih bazisnih funkcija u atomskoj fizici i mnogim drugim oblastima fizike.

U ovom radu rezultati se ostvaruju sa dvojakim ciljem. Primarni cilj je pregledno predstaviti navedene funkcije u impulsnoj reprezentaciji. Sekundarni cilj je omogućiti studentima koji imaju elementarno poznavanje kvantne mehanike i matematičke fizike da uz pomoć ovog rada nauče kako da vrše nešto komplikovanija računanja, koristeći specijalne funkcije, a da pritom ne izlaze previše iz okvira svojih kurseva na master studijama teorijske fizike ili ekvivalentnim studijama.

U ovom radu korišćen je, iz razloga matematičke pogodnosti, atomski sistem jedinica. U ovom sistemu jedinica Kulonova konstanta, elementarno naelektrisanje elektrona, redukovana Plankova konstanta i masa elektrona jednake su jedinici:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = e = \hbar = m_e = 1.$$

2. FURIJEOVA TRANSFORMACIJA U KVANTNOJ MEHANICI

Talasna funkcija u impulsnom prostoru $\tilde{\Phi}(\vec{p})$ može se definisati kao Furijeova (Fourier) transformacija talasne funkcije $\Psi(\vec{r})$ u koordinatnom prostoru relacijom:

$$\tilde{\Phi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (2.1)$$

Talasna funkcija u koordinatnom prostoru $\Psi(\vec{r})$ može se dobiti iz talasne funkcije $\tilde{\Phi}(\vec{p})$ inverznom Furijeovom transformacijom:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \tilde{\Phi}(\vec{p}) d\vec{p}. \quad (2.2)$$

Ukoliko je talasna funkcija $\Psi(\vec{r})$ normirana na jedinicu, onda koristeći (2.2) imamo:

$$\int d\vec{r} \Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \int d\vec{p} \int d\vec{p}' e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} \tilde{\Phi}^*(\vec{p}') \tilde{\Phi}(\vec{p}) = 1. \quad (2.3)$$

Korišćenjem definicije Dirakove delta funkcije:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} e^{i(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} = \delta(\vec{p}-\vec{p}'), \quad (2.3a)$$

vidi se da je:

$$\int d\vec{p}' \delta(\vec{p}-\vec{p}') \tilde{\Phi}^*(\vec{p}') \tilde{\Phi}(\vec{p}) = 1,$$

odnosno:

$$\int |\tilde{\Phi}(\vec{p})|^2 d\vec{p} = 1. \quad (2.4)$$

Ovo nam govori da je talasna funkcija u impulsnom prostoru $\tilde{\Phi}(\vec{p})$ takođe normirana na jedinicu.

Na osnovu definicije Dirakove delta funkcije možemo da uvedemo razne varijante Furijeove transformacije. Navedimo sada neke od često korišćenih varijanti:

$$\tilde{F}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{r}), \quad (2.5a)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \tilde{F}(\vec{p}), \quad (2.5b)$$

$$\tilde{f}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \Psi(\vec{r}), \quad (2.6a)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} \tilde{f}(\vec{p}), \quad (2.6b)$$

$$\tilde{t}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \Psi(\vec{r}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{r}, \quad (2.7a)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \int \tilde{t}(\vec{p}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{p}, \quad (2.7b)$$

$$\tilde{\Theta}(\vec{p}) = \int \Psi(\vec{r}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{r}, \quad (2.8a)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{\Theta}(\vec{p}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{p}, \quad (2.8b)$$

$$\tilde{\Pi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \Psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{r}, \quad (2.9a)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \int \tilde{\Pi}(\vec{p}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{p}. \quad (2.9b)$$

Naravno svi ovi oblici u suštini su ekvivalentni. Ispravnost bilo koje varijante lako se opravdava korišćenjem relacije (2.3a).

3. SLEJTEROVE ORBITALE U IMPULSNOJ REPREZENTACIJI

Uopšteno o Slejterovim orbitalama

Slejterove orbitale nose ime po Džonu C. Slejteru (John C. Slater) koji ih je prvi definisao 1930. u skladu sa eksperimentalnim rezultatima. Radijalni deo Slejterovih orbitala definiše se na sledeći način [13]:

$$R_n(r) = Nr^{n-1}e^{-\zeta r}. \quad (3.1)$$

Oznake u ovoj formuli predstavljaju:

- N konstanta normalizacije;
- n glavni kvantni broj;
- r rastojanje između aktivnog elektrona i atomskog jezgra;
- ζ je konstanta povezana sa efektivnim naelektrisanjem jezgra;

Konstanta normalizacije računa se iz uslova:

$$\int_0^{\infty} R_n(r)^2 dr = \int_0^{\infty} N^2 r^{2n} e^{-2\zeta r} dr = 1,$$

odnosno:

$$N^2 = \frac{1}{\int_0^{\infty} r^{2n} e^{-2\zeta r} dr}.$$

Uopšteno važi sledeća jednakost:

$$\int_0^{\infty} x^a e^{-bx} dx = \frac{a!}{b^{a+1}},$$

odnosno kada se primeni na naš slučaj :

$$a = 2n,$$

$$b = 2\zeta,$$

dobija se:

$$N = \sqrt{\frac{(2\zeta)^{2n+1}}{(2n)!}} = (2\zeta)^n \sqrt{\frac{(2\zeta)}{(2n)!}}. \quad (3.2)$$

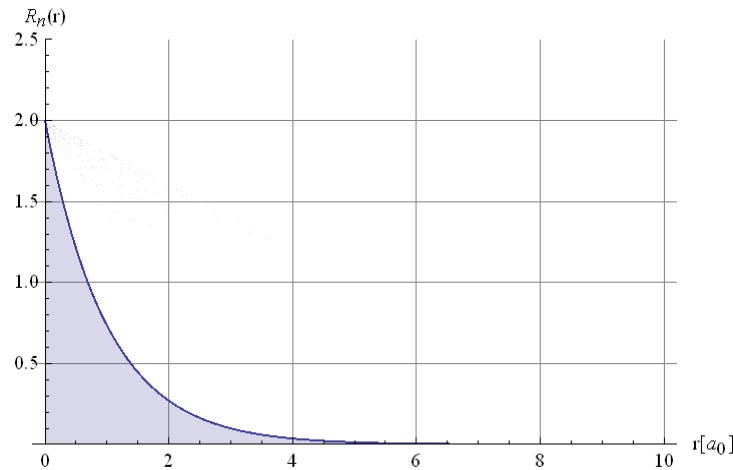
Ugaoni deo Slejterovih orbitala predstavljen je sfernim harmonicima:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad (3.2a)$$

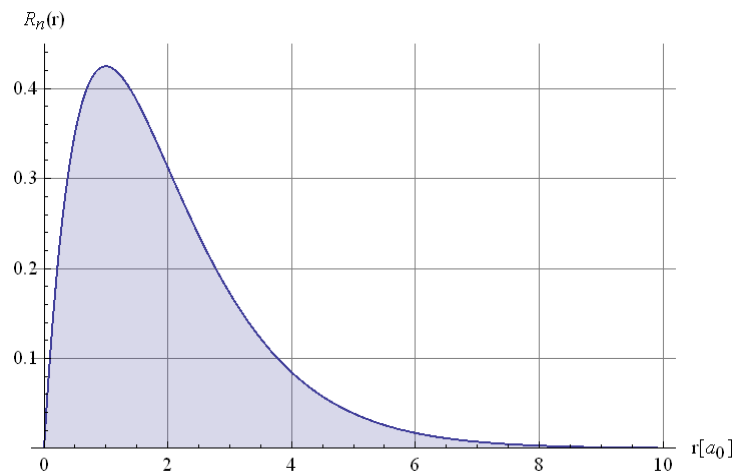
gde $P_l^m(\cos\theta)$ predstavlja asocirane Ležandrove polinome definisane sa [14]:

$$P_l^{|m|}(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l.$$

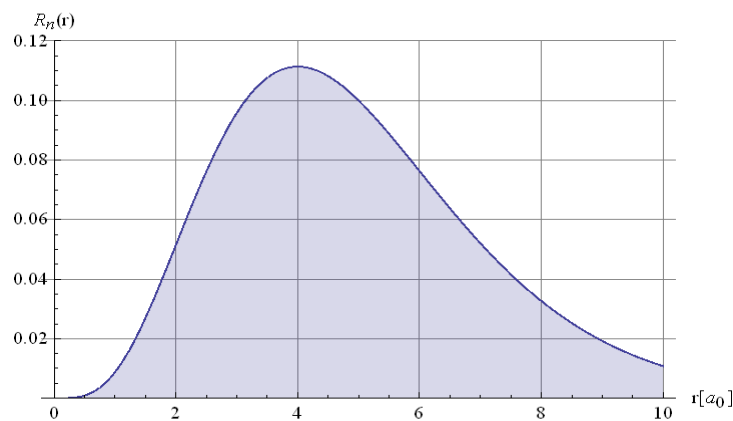
Nacrtajmo sada nekoliko Slejterovih orbitala sa parametrom $\zeta = 1$ koji odgovara slučaju atoma vodonika. Može se uočiti da svaka funkcija ima maksimum u $r = (n-1)a_0$:



Grafik 1. Radijalni deo Slejterovih orbitala u koordinatnoj reprezentaciji, $\zeta = 1, n=1$



Grafik 2 . Radijalni deo Slejterovih orbitala u koordinatnoj reprezentaciji, $\zeta = 1, n=2$



Grafik 3. Radijalni deo Slejterovih orbitala u koordinatnoj reprezentaciji, $\zeta = 1, n=5$

Slejterove orbitale u konkretnim problemima

Stanje elektrona u višeelektronskom atomu može se opisati preko Slejterovih orbitala. Tako, na primer, talasna funkcija određenih stanja neona može se predstaviti u bazu Slejterovih atomskih orbitala [7]:

$$u(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N c_i \chi_i(\vec{r}) \text{ ili konkretno:}$$

$$u_{1s} = 0.93717\chi_1 + 0.04899\chi_2 + 0.00058\chi_3 - 0.00064\chi_4 + 0.00551\chi_5 + 0.01999\chi_6,$$

$$u_{2s} = -0.23093\chi_1 - 0.00635\chi_2 + 0.18620\chi_3 + 0.66899\chi_4 + 0.30910\chi_5 - 0.13871\chi_6,$$

$$u_{2p} = 0.21799\chi_7 + 0.53338\chi_8 + 0.32933\chi_9 + 0.01872\chi_{10},$$

gde su u_{1s}, u_{2s}, u_{2p} talasne funkcije $1s, 2s, 2p$ stanja respektivno.

Veličine χ_i predstavljaju radijalni deo Slejterovih orbitala pomnožen odgovarajućim sfernim harmonikom sa različitim vrednostima parametra ζ i konstantom N izračunatom prema (3.2):

$$\chi_1 = N_1 e^{-9.48486r} Y_{00}(\theta, \phi),$$

$$\chi_2 = N_2 e^{-15.5659r} Y_{00}(\theta, \phi),$$

$$\chi_3 = N_3 r e^{-1.96184r} Y_{00}(\theta, \phi),$$

$$\chi_4 = N_4 r e^{-2.8423r} Y_{00}(\theta, \phi),$$

$$\chi_5 = N_5 r e^{-4.8253r} Y_{00}(\theta, \phi),$$

$$\chi_6 = N_6 r e^{-7.79242r} Y_{00}(\theta, \phi),$$

$$\chi_7 = N_7 r e^{-1.45208r} Y_{10}(\theta, \phi),$$

$$\chi_8 = N_8 r e^{-2.38165r} Y_{10}(\theta, \phi),$$

$$\chi_9 = N_9 r e^{-4.48489r} Y_{10}(\theta, \phi),$$

$$\chi_{10} = N_{10} r e^{-9.13464r} Y_{10}(\theta, \phi).$$

U poslednje vreme učestala je primena Slejterovih orbitala za opisivanje sudarnih procesa kao što su jonizacija i elektronski zahvat iz molekula [19-22]. Učestala je i primena u medicini gde se vezano stanje aktivnog (posmatranog) elektrona određenog molekula (recimo DNK ili RNK, videti primere u referencama [19,20]) opisuje korišćenjem bazisa Slejterovih orbitala $\chi_{h,j}^{STO}$ centriranih na svaki nukleus. Iz toga sledi da u molekularnom sistemu reference čiji početak je lociran u centru mase molekula i sa z' osom duž molekularne ose možemo da pišemo:

$$\varphi_{MO}(\vec{r}') = \sum_{h,j} \omega_{h,j} \chi_{h,j}^{STO}(\vec{x}_h'),$$

gde je h indeks koji označava nukleus molekula na koji je STO centrirana, dok j predstavlja kolektivnu oznaku za kvantne brojeve nlm .

Vektori $\vec{x}_h'$ i $\vec{r}'$ označavaju vektore položaja elektrona u odnosu na centar h i centar mase molekula respektivno. Smena koordinata sa laboratorijskog na molekularni sistem data je relacijom: $\vec{x}_h' = \tau \vec{x}_h$, gde je τ matrica rotacije. Vektori $\vec{x}_h'$ i $\vec{x}_h$ povezani su međusobno Ojlerovim uglovima.

Slejterove orbitale u impulsnoj reprezentaciji

Razmatraćemo slučaj Slejterovih orbitala kada je njihov ugaoni deo dat sfernim harmonicima. Ukupna talasna funkcija biće prosto proizvod radijalnog dela Slejterovih orbitala i sfernih harmonika:

$$\chi_{nlm}(\vec{r}) = \chi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_n(r) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.3)$$

Furijeovu transformaciju ovakvih orbitala definišaćemo na sledeći način (2.8a):

$$\tilde{\chi}_{nlm}(\vec{p}) = \tilde{\chi}_{nlm}(p, \theta_p, \phi_p) = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \chi_{nlm}(\vec{r}) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (3.4)$$

Iz razloga matematičke pogodnosti nije odgovarajuće koristiti Slejterove orbitale. Umesto njih potražićemo Furijeovu transformaciju pomoćnih funkcija:

$$\chi_{nlm}'(r, \theta, \phi) = \frac{e^{-\lambda r}}{r} \chi_{nlm}(r, \theta, \phi). \quad (3.5)$$

Pomoćna funkcija se diferenciranjem $-\frac{d}{d\lambda}$ pa traženjem $\lim_{\lambda \rightarrow 0}$ svodi na izraze za

$$\text{Slejterove orbitale } \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left(-\frac{d}{d\lambda} \chi_{nlm}'(r, \theta, \phi) \right) = \chi_{nlm}(r, \theta, \phi). \quad (3.5a)$$

Potražimo sada Furijeovu transformaciju izraza (3.4) koristeći funkciju $\chi_{nlm}'(r, \theta, \phi)$:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} R_n(r) Y_{lm}(\hat{r}) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (3.5b).$$

U cilju oslobađanja od skalarnog proizvoda u eksponentu učinićemo sledeću transformaciju [8]:

$$e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} = 4\pi \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} j_{l_1}(pr) Y_{l_1 m_1}(\hat{p}) Y_{l_1 m_1}^*(\hat{r}). \quad (3.6)$$

Izraz (3.5b) sada postaje:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{-\lambda r}}{r} 4\pi \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} j_{l_1}(pr) Y_{l_1 m_1}(\hat{\vec{p}}) Y_{l_1 m_1}^*(\hat{\vec{r}}) R_n(r) Y_{lm}(\hat{\vec{r}}) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi.$$

gde su j_l sferične Beselove funkcije definisane sa [3]:

$$\begin{aligned} j_l(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m+l+1+1/2)} \left(\frac{1}{2}x\right)^{2m+l+1/2} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! \Gamma(m+l+3/2)} \left(\frac{1}{2}x\right)^{2m+l+1/2} = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m! (m+l+1/2)!} \left(\frac{1}{2}x\right)^{2m+l+1/2}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Integracijom po uglovima i imajući u vidu da su sferni harmonici ortonormirani :

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l_1 m_1}^*(\hat{\vec{r}}) Y_{lm}(\hat{\vec{r}}) \sin(\theta) d\theta d\phi = \delta_{l_1 l} \delta_{m_1 m},$$

dobijamo sledeći izraz:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} 4\pi \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\lambda r}}{r} j_{l_1}(pr) R_n(r) r^2 dr Y_{l_1 m_1}(\hat{\vec{p}}) \delta_{l_1 l} \delta_{m_1 m}. \quad (3.8)$$

Predstavljanjem radijalnog dela Sletjerovih orbitala po definiciji (3.1) dobijamo:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} 4\pi N \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\lambda r}}{r} j_{l_1}(pr) r^{n-1} e^{-\zeta r} r^2 dr Y_{l_1 m_1}(\hat{\vec{p}}) \delta_{l_1 l} \delta_{m_1 m}.$$

Ovde su $\delta_{l_1 l}$, $\delta_{m_1 m}$ Kronekerove delte definisane sa:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ako je } i = j \\ 0, & \text{ako je } i \neq j. \end{cases}$$

Kronekerove delte, a samim tim i naša talasna funkcija, biće jednake nuli u svakom slučaju izuzev u slučaju kada je $l = l_1$ i $m = m_1$. Kako nam je slučaj kada je talasna funkcija jednaka nuli trivijalan, razmatraćemo samo slučaj $l = l_1$ i $m = m_1$. Ovo nam je inače jako pogodno jer nam omogućava da inače beskonačnu sumu ograničimo samo na jedan član:

$$\tilde{\chi}'_{nlm}(\vec{p}) = i^l 4\pi N \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\lambda r}}{r} j_l(pr) e^{-\zeta r} r^{n+1} dr Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (3.9)$$

Integral u formuli (3.9) nije jednostavno rešiti. Da bismo mogli da dodjemo do upotrebljivog rešenja, moramo primeniti još jednu transformaciju [1]:

$$j_l(pr) = \frac{1}{(3/2)_l} \left[\frac{pr}{2} \right]^l e^{-ipr} {}_1F_1(l+1, 2l+2, 2ipr). \quad (3.10)$$

Ovde je $(3/2)_l$ Počamerov (Pochhammer) simbol definisan sa [1]:

$$(x)_n = \frac{\Gamma(x+n)}{\Gamma(x)} = x(x+1)(x+2)\dots(x+n-1). \quad (3.11)$$

Sa ${}_1F_1(l+1, 2l+2, 2ipr)$ obeležena je konfluentna hipergeometrijska funkcija (Kumerova funkcija) definisana sa [17]:

$${}_1F_1(a, b, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!}. \quad (3.12a)$$

Uvrštavanjem izraza za sferične Beselove funkcije (3.10) u jednakost (3.9) dobijamo sledeći integral:

$$\tilde{\chi}'_{nlm}(\vec{p}) = N \frac{4\pi i^l p^l}{(3/2)_l 2^l} Y_{lm}(\hat{\vec{p}}) \int_0^{+\infty} e^{-r(\lambda+\zeta+ip)} r^{n+l} {}_1F_1(l+1, 2l+2, 2ipr) dr.$$

Rešenje ovakvog integrala ima uopšteno sledeći oblik [3]:

$$\int_0^{+\infty} e^{-st} t^{b-1} {}_1F_1(a, c, kt) dt = \Gamma(b) s^{-b} {}_2F_1(a, b, c, \frac{k}{s}),$$

gde je ${}_2F_1$ Gausova hipergeometrijska funkcija definisana sa [17]:

$${}_2F_1(a, b, c, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n} \frac{z^n}{n!}, \quad (3.12b)$$

odnosno kada to primenimo na naš konkretan slučaj:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = 4\pi N \frac{(n+l)!}{2^l (3/2)_l} \frac{i^l p^l}{(\zeta + \lambda + ip)^{n+l+1}} {}_2F_1(n+l+1, l+1, 2l+2, \frac{2ip}{\lambda + \zeta + ip}) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (3.13)$$

Kako je promenljiva u Gausovoj hipergeometrijskoj funkciji kompleksan broj moramo transformisati funkciju dalje.

Posmatrajmo sledeću formulu [3]:

$${}_2F_1(a, b, 2b, z) = (1 - \frac{z}{2})^{-a} {}_2F_1(\frac{a}{2}, \frac{a+1}{2}, b + \frac{1}{2}, \frac{z^2}{(2-z)^2}), \quad (3.14)$$

odnosno, kada (3.14) primenimo na (3.13) dobijamo:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = 4\pi N \frac{(n+l)!}{2^l (3/2)_l} \frac{i^l p^l}{(\zeta + \lambda)^{n+l+1}} {}_2F_1(\frac{n+l+1}{2}, \frac{n+l+2}{2}, l + \frac{3}{2}, -\frac{p^2}{(\zeta + \lambda)^2}) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (3.15)$$

Ovo već može predstavljati Slejterove orbitale u impulsnoj reprezentaciji. Ipak transformisaćemo ovu formulu dalje kako bismo ocenili validnost našeg rezultata.

Posmatrajmo sledeću formulu [1]:

$${}_2F_1(a, a + \frac{1}{2}, c, z) = (1 - z)^{-a} {}_2F_1(2a, 2c - 2a - 1, c, \frac{\sqrt{1-z}-1}{2\sqrt{1-z}}). \quad (3.16)$$

Kako je $b = a + 1/2$ u (3.15) možemo tu formulu transformisati prema formuli (3.16). Dobija se sledeći rezultat:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = 4\pi N \frac{(n+l)!}{2^l (3/2)_l} \frac{i^l p^l}{(\zeta + \lambda)^{n+l+1}} \frac{1}{(p^2 + (\zeta + \lambda)^2)^{\frac{n+l+1}{2}}} \times {}_2F_1\left(n+l+1, l+1-n, l+\frac{3}{2}, \frac{1 - \frac{\lambda + \zeta}{\sqrt{(\lambda + \zeta)^2 + p^2}}}{2}\right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}),$$

odnosno nakon preuređivanja dobija se:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = 4\pi N \frac{(n+l)!}{2^l (3/2)_l} i^l p^l \frac{1}{(p^2 + (\zeta + \lambda)^2)^{\frac{n+l+1}{2}}} \times {}_2F_1 \left(n+l+1, l+1-n, l+\frac{3}{2}, \frac{1 - \frac{\lambda + \zeta}{\sqrt{(\lambda + \zeta)^2 + p^2}}}{2} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (3.17)$$

Veza između Gegenbauerovih polinoma i Gausove hipergeometrijske funkcije data je sledećom formulom [1]:

$$C_\nu^\lambda(z) \frac{\Gamma(\nu+1)\Gamma(2\lambda)}{\Gamma(\nu+2\lambda)} = {}_2F_1(-\nu, \nu+2\lambda, \lambda + \frac{1}{2}, \frac{1-z}{2}). \quad (3.18)$$

Gegenbauerov polinom $C_n^\alpha(z)$ definisan je na sledeći način [17]:

$$\frac{1}{(1-2xt+t^2)^\lambda} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^\lambda(x) t^n.$$

Veza Gegenbauerovih polinoma i Gausovih hipergeometrijskih funkcija (3.18) može se primeniti i u našem slučaju (3.17). Nakon izmene prva dva indeksa u Gausovoj hipergeometrijskoj funkciji i primene formule (3.18) na (3.17) dobija se sledeća jednakost:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = 4\pi N \frac{(n+l)!}{2^l (3/2)_l} \frac{i^l p^l}{(p^2 + (\zeta + \lambda)^2)^{\frac{n+l+1}{2}}} \times \frac{\Gamma(n-l)\Gamma(2l+2)}{\Gamma(n+l+1)} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{\zeta + \lambda}{\sqrt{(\zeta + \lambda)^2 + p^2}} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}).$$

Imajući u vidu da je $(3/2)_l = \frac{(2l+1)!}{2^{2l} l!}$ i da je $N = (2\zeta)^n \sqrt{\frac{(2\zeta)}{(2n)!}}$ i nakon neznatnog sređivanja (kraćenja faktorjela i stepena broja 2) dobija se sledeći izraz:

$$\tilde{\chi}_{nlm}'(\vec{p}) = 4\pi (2\zeta)^{n+\frac{1}{2}} \frac{l!(n-l-1)!}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2^l i^l p^l}{(p^2 + (\zeta + \lambda)^2)^{\frac{n+l+1}{2}}} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{\zeta + \lambda}{\sqrt{(\zeta + \lambda)^2 + p^2}} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (3.20)$$

Setimo se sada da smo tokom celokupnog izvođenja koristili pomoćnu funkciju (3.5) koja se transformacijom (3.5a) svodi na izraz za Slejterove orbitale. Učinimo upravo navedene matematičke transformacije sa (3.20) :

Na kraju dobijamo rezultat koji je skoro u potpunosti identičan sa rezultatom [12]:

$$\tilde{\chi}_{nlm}(\vec{p}) = 4\pi(2\zeta)^{\frac{n+1}{2}} \frac{l!(n-l)!}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2^l i^l p^l}{(p^2 + \zeta^2)^{\frac{n+l+2}{2}}} C_{n-l}^{l+1} \left(\frac{\zeta}{\sqrt{\zeta^2 + p^2}} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (3.21)$$

Faktor 4π posledica je načina na koji smo definisali Furijeovu transformaciju (2.8b) i inverznu Furijeovu transformaciju (2.8a).

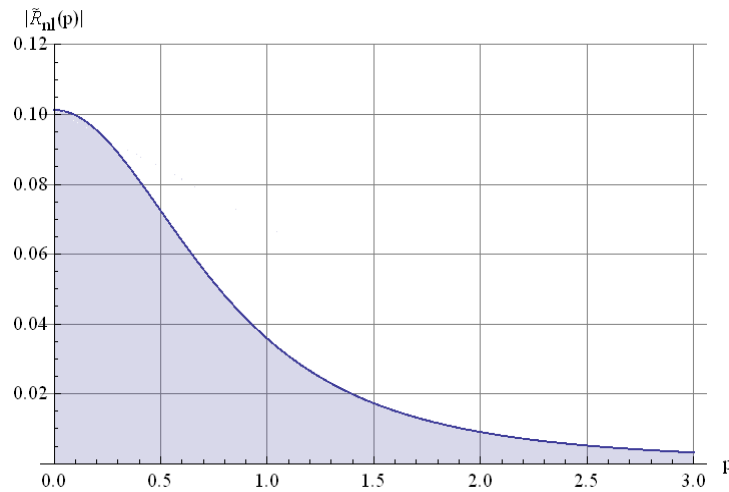
Deljenjem našeg izraza sa $\frac{1}{(2\pi)^3}$ (što je razlika između načina na koji smo mi računali i definicija (2.7)) dobijamo sledeći izraz:

$$\tilde{\chi}_{nlm}(p, \theta_p, \phi_p) = (2\zeta)^{\frac{n+1}{2}} \frac{1}{2\pi^2} \frac{l!(n-l)!}{\sqrt{(2n)!}} \frac{2^l i^l p^l}{(p^2 + \zeta^2)^{\frac{n+l+2}{2}}} C_{n-l}^{l+1} \left(\frac{\zeta}{\sqrt{\zeta^2 + p^2}} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}), \quad (3.22)$$

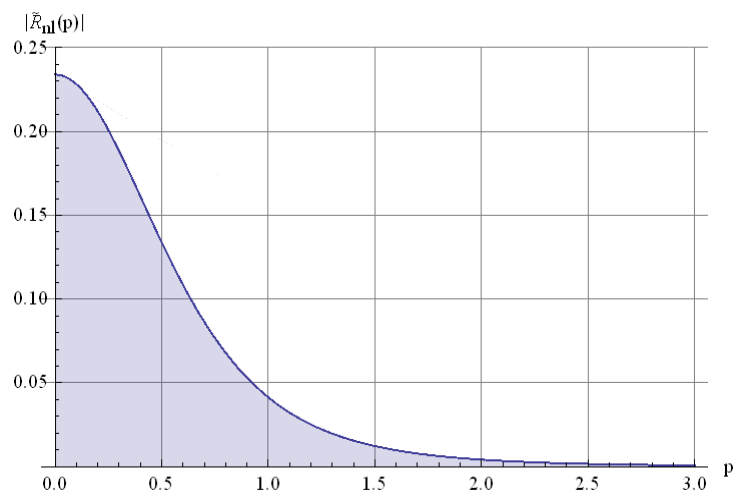
što je tačno izraz za Slejterove orbitale u impulsnoj reprezentaciji dobijen kod autora u referenci [12].

Grafičko predstavljanje dobijenih rezultata

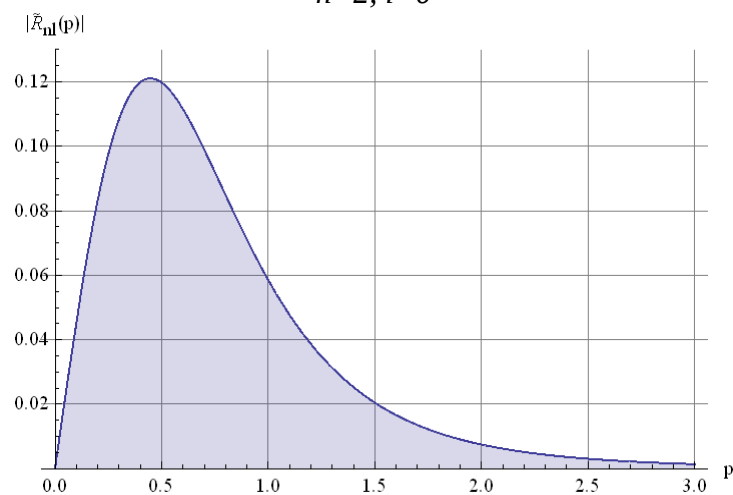
Predstavićemo sada grafički dobijene rezultate. Ono što se prvo može uočiti jeste da radijalni deo Slejterovih orbitala u koordinatnoj reprezentaciji ne zavisi od kvantnog broja l , dok u impulsnoj reprezentaciji to nije slučaj.



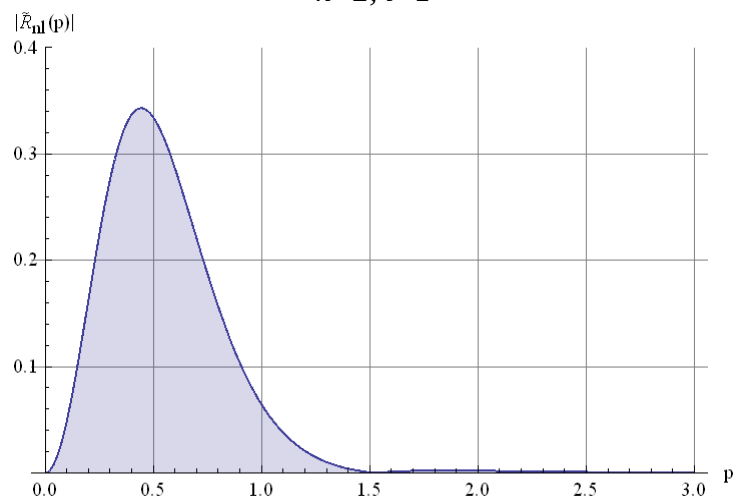
Grafik 4. Modul Radijalnog dela Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji $\zeta = 1$, $n=1, l=0$



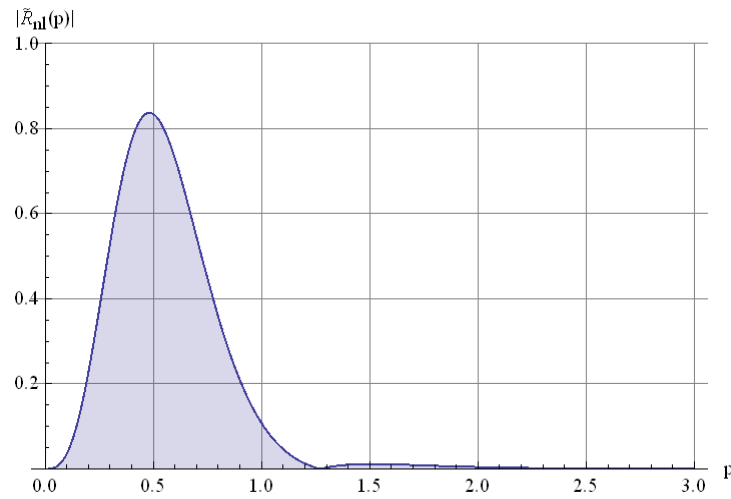
Grafik 5. Modul radijalnog dela Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji $\zeta = 1$,
 $n=2, l=0$



Grafik 6. Modul radijalnog dela Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji $\zeta = 1$,
 $n=2, l=1$

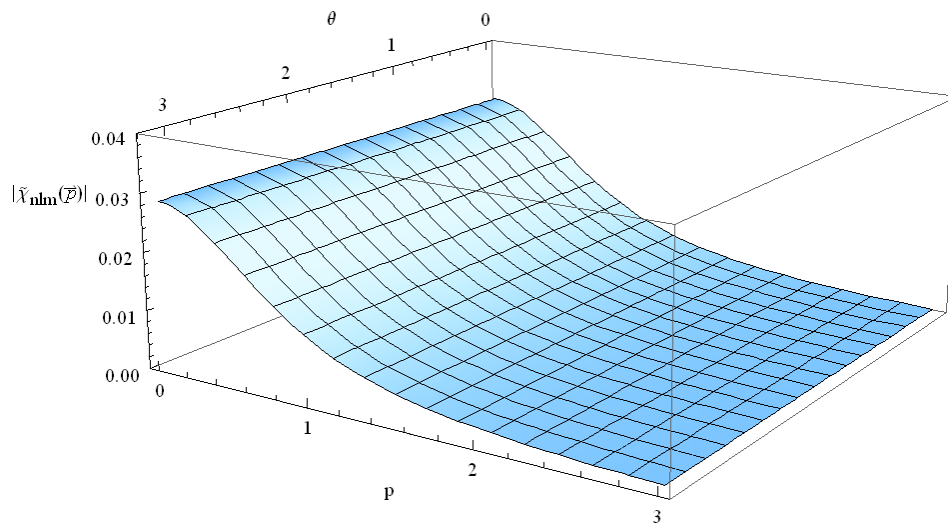


Grafik 7. Modul radijalnog dela Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji $\zeta = 1$,
 $n=4, l=2$



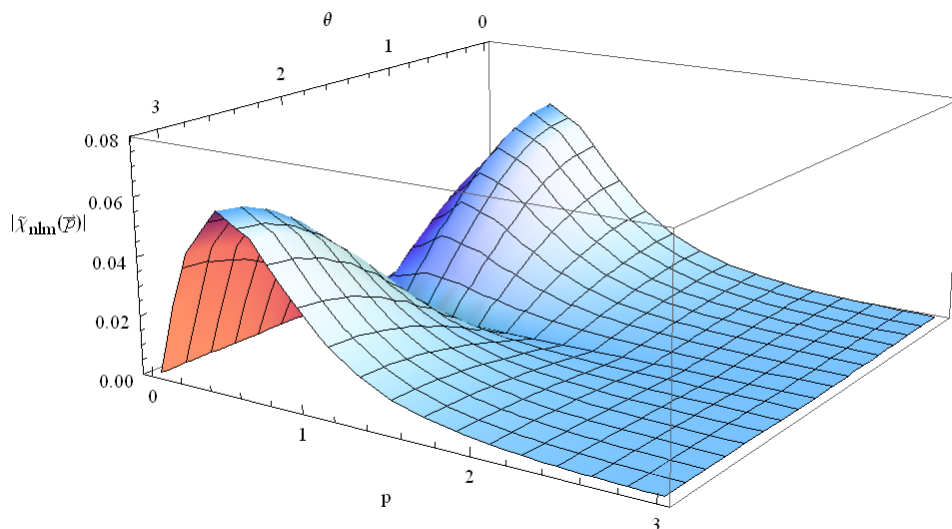
Grafik 8. Modul radijalnog dela Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji $\zeta = 1$, $n=5, l=0$

Slejterova orbitala u impulsnoj reprezentaciji sa fiksiranom vrednošću ugla ϕ_p

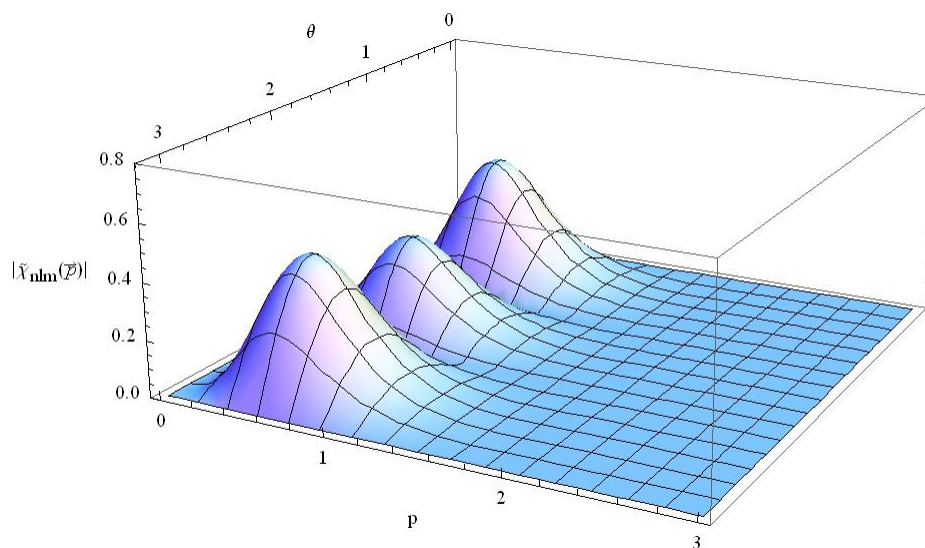


Grafik 9. Zavisnost modula Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji od p i θ sa fiksiranom vrednošću azimutalnog ugla $\phi = 0$, $n=1, l=0, m=0$,

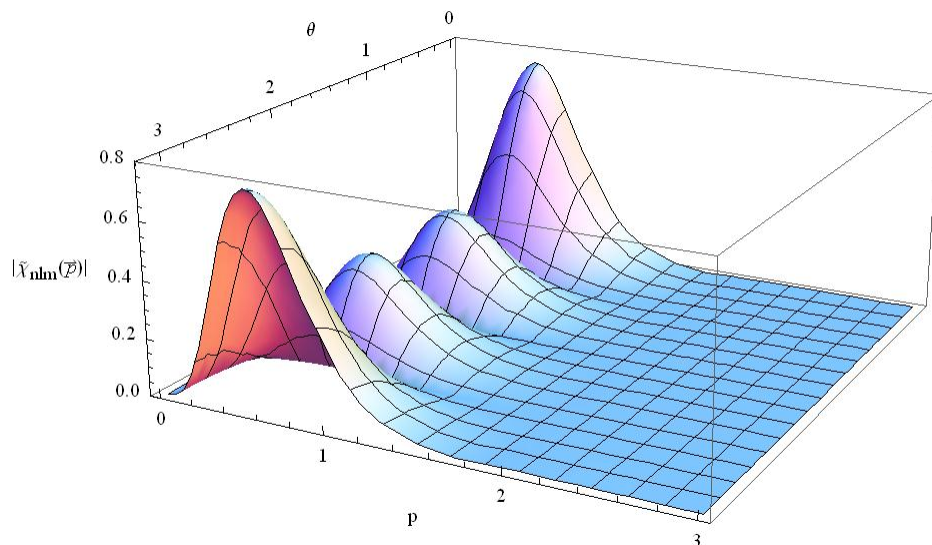
Primećujemo da talasna funkcija ima najveću vrednost u $p = 0$ za sve vrednosti polarnog ugla.



Grafik 10. Zavisnost modula Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji od p i θ sa fiksiranom vrednošću azimutalnog ugla $\phi = 0$, $n=2$, $l=1$, $m=1$

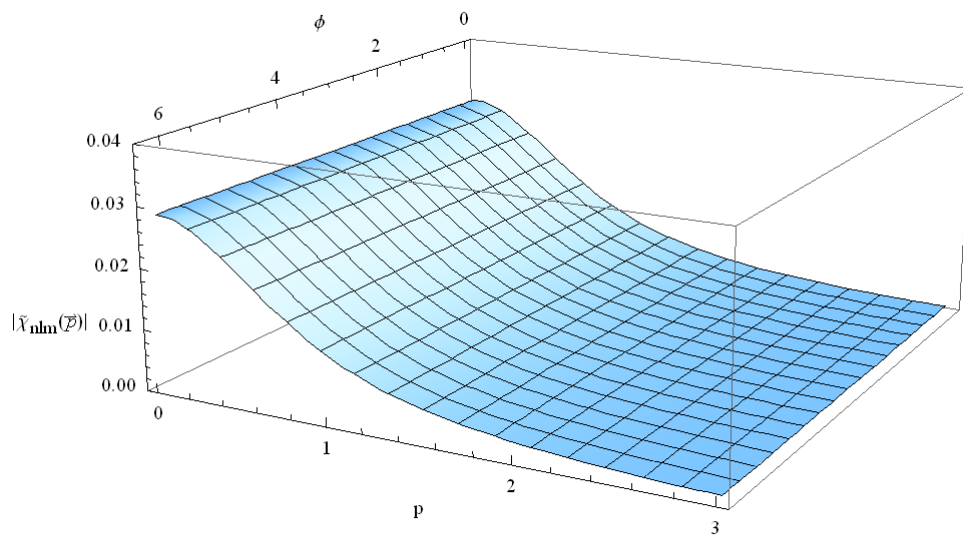


Grafik 11. Zavisnost modula Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji od p i θ sa fiksiranom vrednošću azimutalnog ugla $\phi = 0$, $n=4$, $l=3$, $m=-1$

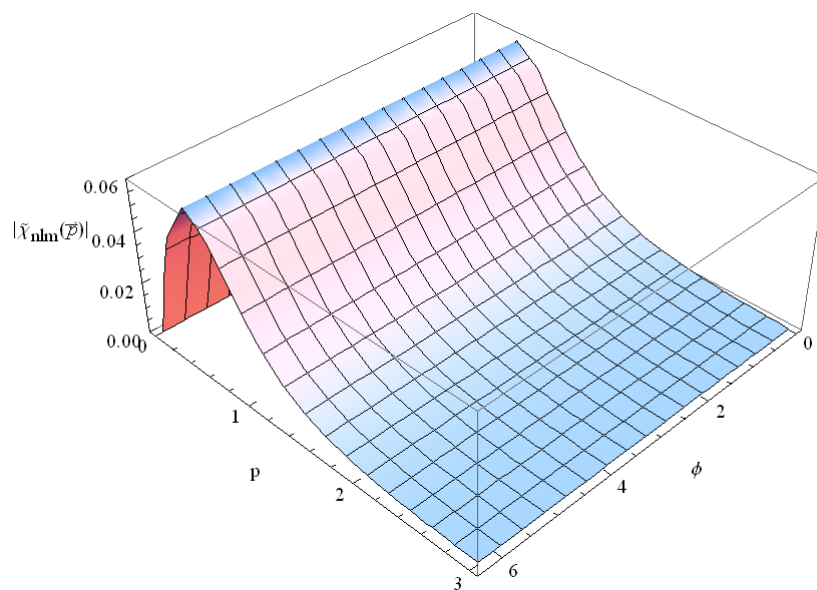


Grafik 12. Zavisnost modula Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji od p i θ sa fiksiranom vrednošću azimutalnog ugla $\phi = \frac{\pi}{3}$, $n=4$, $l=3$, $m=0$

Slejterova orbitala u impulsnoj reprezentaciji sa fiksiranom vrednošću polarnog ugla θ_p



Grafik 13. Zavisnost modula Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji od p i ϕ sa fiksiranom vrednošću polarnog ugla $\theta = \frac{\pi}{3}$, $n=1$, $l=0$, $m=0$



Grafik 14. Zavisnost modula Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji od p i ϕ sa fiksiranom vrednošću polarnog ugla $\theta=0$, $n=2$, $l=1$, $m=0$

4. GAUSOVE ORBITALE U IMPULSNOJ REPREZENTACIJI

Uopšteno o Gausovim orbitalama

Gausove orbitale takođe se koriste kao bazisne funkcije u raznim oblastima fizike i date su sa:

$$\Phi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A r^{n-1} e^{-\alpha r^2} Y_{lm}(\hat{r}). \quad (4.1)$$

Norma Gausovih Orbitala

Da bismo odredili normu Gausovih orbitala, potrebno je rešiti sledeći integral:

$$\int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} A^2 r^{2n-2} e^{-2\alpha r^2} r^2 \sin(\theta) Y_{lm}^*(\hat{r}) Y_{lm}(\hat{r}) dr d\theta d\phi = 1.$$

Uvođenjem smene:

$2\alpha r^2 = t$, integracijom po ugaonim promenljivima i imajući u vidu da je Gama funkcija definisana sa

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt, \quad (4.2)$$

dobijamo konačan izraz za normu Gausovih orbitala:

$$A = \sqrt{\frac{2(2\alpha)^{n+\frac{1}{2}}}{\Gamma(n+\frac{1}{2})}}. \quad (4.3)$$

Gausove orbitale u impulsnoj reprezentaciji

Furijeovu transformaciju Gausovih orbitala definisaćemo na sledeći način (2.6a):

$$\tilde{\Phi}_{nlm}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} R_n(r) r^2 \sin(\theta) Y_{lm}(\hat{r}) dr d\theta d\phi. \quad (4.4)$$

U eksponentu (4.4) učinićemo transformaciju (3.6):

$$\tilde{\Phi}_{nlm}(\vec{p}) = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} 4\pi \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} j_{l_1}(pr) Y_{l_1 m_1}^*(\hat{r}) Y_{l_1 m_1}(\hat{p}) R_n(r) Y_{lm}(\hat{r}) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (4.5)$$

Integracijom (4.5) po uglovima, imajući u vidu da su sferni harmonici ortonormirani dobijamo sledeći izraz i da je radijalni deo Gausovih orbitala dat sa (4.1) :

$$\tilde{\Phi}_{nlm}(\vec{p}) = \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} 4\pi \int_0^{+\infty} j_{l_1}(pr) e^{-\alpha r^2} r^{n-1} r^2 dr Y_{l_1 m_1}(\hat{\vec{p}}) \delta_{l_1 l} \delta_{m_1 m}, \quad (4.6)$$

gde su $\delta_{l_1 l}, \delta_{m_1 m}$ Kronekerove delte.

Dobijeni izraz svodi se na sledeći:

$$\tilde{\Phi}_{nlm}(\vec{p}) = i^l 4\pi A Y_{lm}(\hat{\vec{p}}) \int_0^{+\infty} j_l(pr) e^{-\alpha r^2} r^{n-1} r^2 dr. \quad (4.7)$$

Uopšteno integral koji sadrži sferičnu Beselovu funkciju, kvadrat promenljive u eksponentu i promenljivu na stepen dat je sa [2]:

$$\int_0^{+\infty} dx \cdot x^{2n+\nu+1} e^{-\alpha x^2} \sqrt{\frac{\pi}{2\beta x}} j_\nu(\beta x) = \frac{2^n n! \beta^\nu}{(2\alpha)^{n+\nu+2}} L_n^\nu \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}. \quad (4.8)$$

Kada (4.8) primenimo na (4.7) dobijamo:

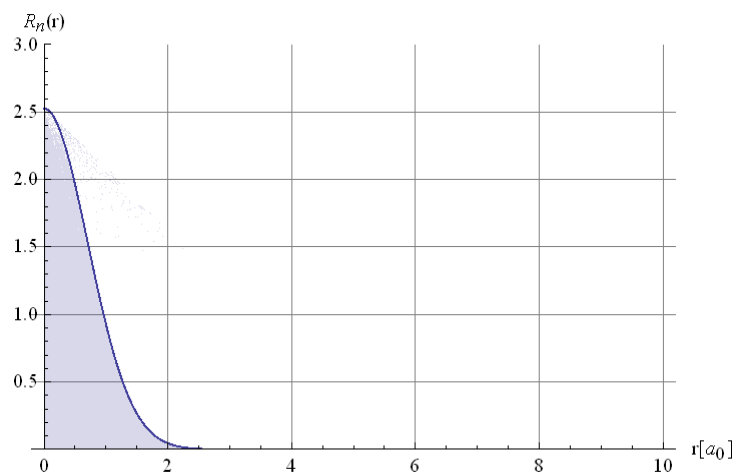
$$\tilde{\Phi}_{nlm}(\vec{p}) = A i^l 4\pi 2^{n-l-1} (n-l-1)! \frac{p^{l+1/2}}{(2\alpha)^{n+3/2}} L_{n-l-1}^{l+1/2} \left(\frac{p^2}{4\alpha} \right) e^{-\frac{p^2}{4\alpha}} Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (4.9)$$

Ovde su:

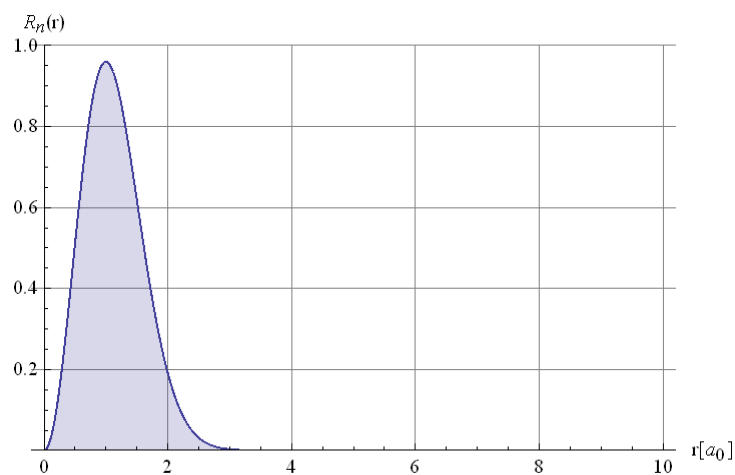
- n, l : Glavni i orbitalni kvantni broj respektivno,
- α : Konstanta koja zavisi od samih priroda pojedinačnih atoma u molekulu,
- $L_n^\alpha(x)$: Asocirani Lagerov polinom definisan sa:

$$L_n^\alpha(x) = \frac{x^{-\alpha} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}).$$

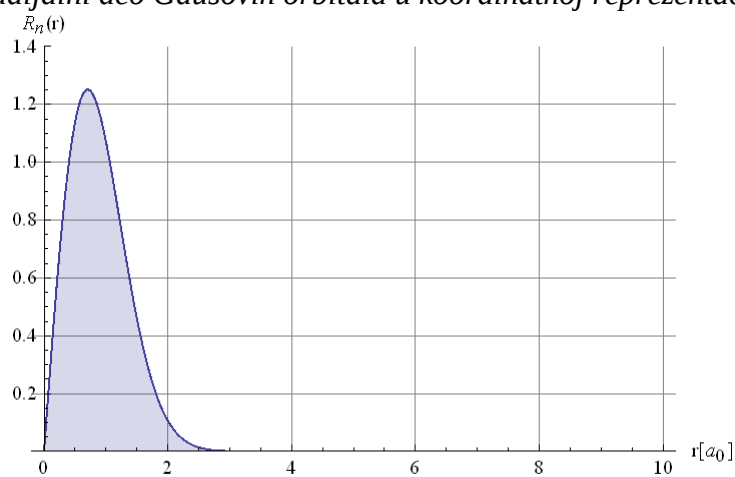
Grafičko predstavljanje dobijenih rezultata



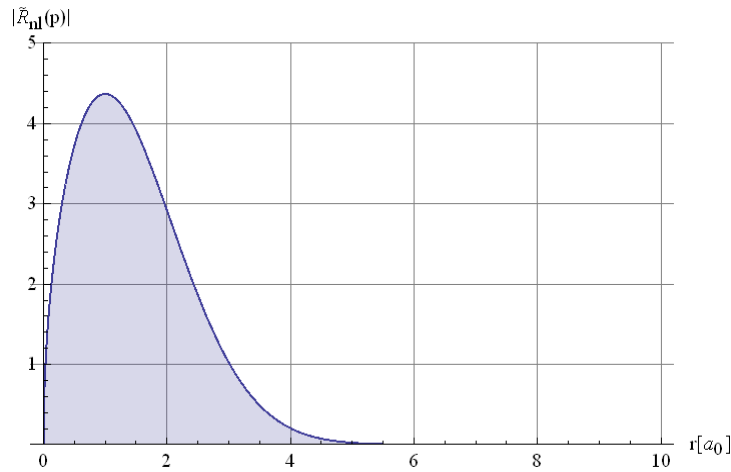
Grafik 15. Radijalni deo Gausovih orbitala u koordinatnoj reprezentaciji $n=1$, $\alpha=1$



Grafik 16. Radijalni deo Gausovih orbitala u koordinatnoj reprezentaciji $n=3$, $\alpha=1$

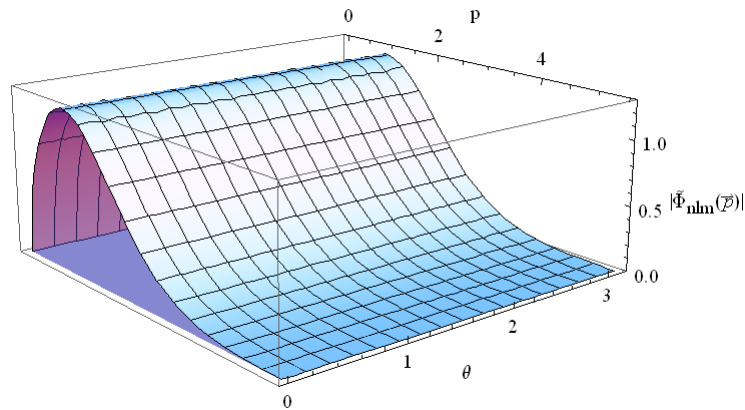


Grafik 17. Radijalni deo Gausovih orbitala u koordinatnoj reprezentaciji $n=2$, $\alpha=1$



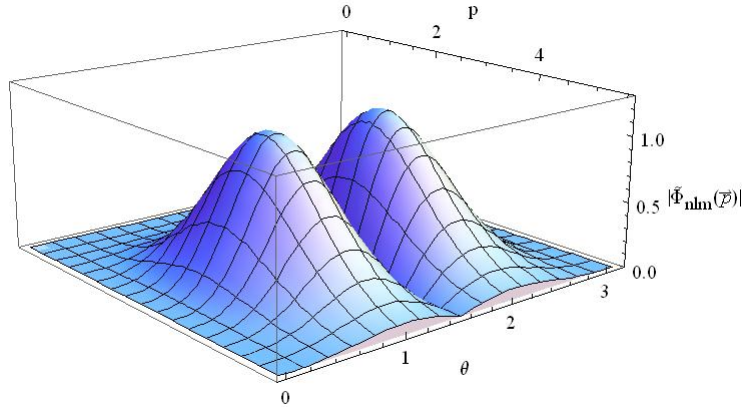
Grafik 18. Modul radijalnog dela Gausovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji $n=1, l=0$, $\alpha=1$

Gausove orbitale u impulsnoj reprezentaciji sa fiksiranom vrednošću ugla ϕ_p



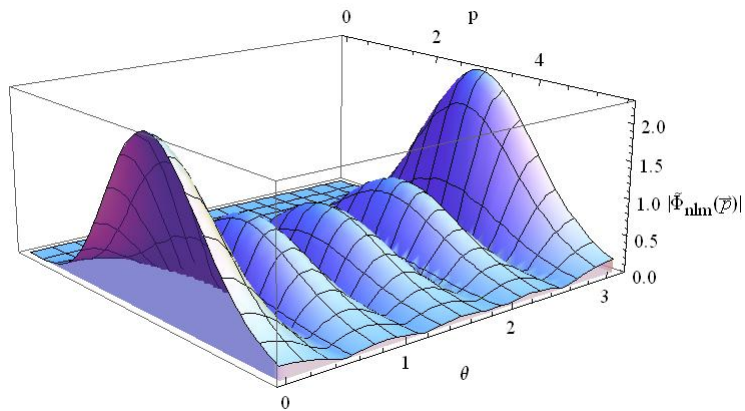
Grafik 19. Modul Gausovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji u zavisnosti od vrednosti p i θ sa fiksiranom vrednošću $\phi = \frac{\pi}{3}$, $n=1, l=0, m=0$,

Primećujemo jaku lokalizaciju gustine verovatnoće u tački $p \approx 1$ za sve vrednosti polarnog ugla.



Grafik 20. Modul Gausovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji u zavisnosti od vrednosti p i θ sa fiksiranom vrednošću $\phi = \frac{\pi}{3}$, $n=5$, $l=4$, $m=3$

Kako je kvadrat modula talasne funkcije u stvari gustina verovatnoće, u ovom slučaju postojaće dve ekvivalentne lokalizacije gustine verovatnoće.



Grafik 21. Modul Gausovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji u zavisnosti od vrednosti p i θ sa fiksiranom vrednošću $\phi = \frac{\pi}{3}$, $n=5$, $l=4$, $m=0$

5. ATOM VODONIKA U IMPULSNOJ REPREZENTACIJI

Uopšteno o atomu vodonika u kvantnoj mehanici

Rešenje Šredingerove jednačine za atom vodonika predstavlja jedan od najvažnijih rezultata kvantne mehanike. Šredingerova jednačina za atom vodonika glasi (u atomskom sistemu jedinica):

$$\frac{p^2}{2} \Psi(\rho, \theta, \phi) + V_{Coul.}(\rho) \Psi(\rho, \theta, \phi) = E \Psi(\rho, \theta, \phi) . \quad (5.1)$$

Rešenje ove jednačine je talasna funkcija sledećeg oblika [8]:

$$\psi_{nlm}(\rho, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) Y_{lm}(\theta, \phi) .$$

Ekvivalentno rešenje je [8]:

$$\Psi(\rho, \theta, \phi) = \frac{1}{(2l+1)!} \left\{ \left[\frac{2}{n} \right]^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right\}^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \rho) Y_{lm}(\theta, \phi) .$$

Ovde su :

$$\rho = \frac{2r}{n} ,$$

a energije atomskih nivoa date su sa:

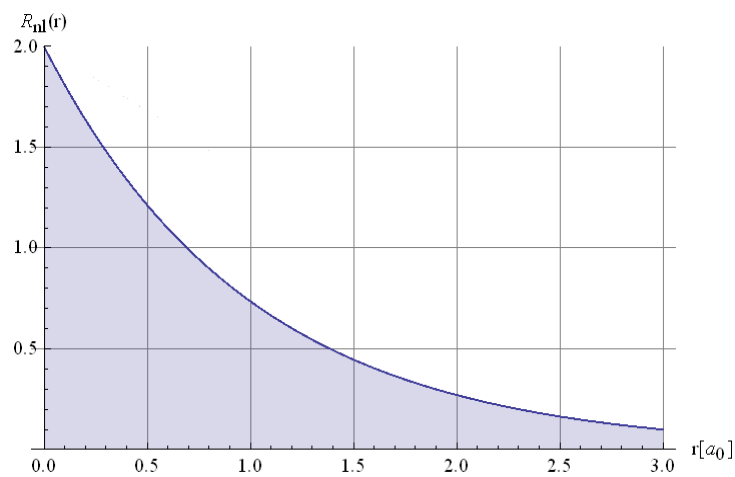
$$E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2} ,$$

odnosno u atomskom sistemu jedinica koji koristimo sa:

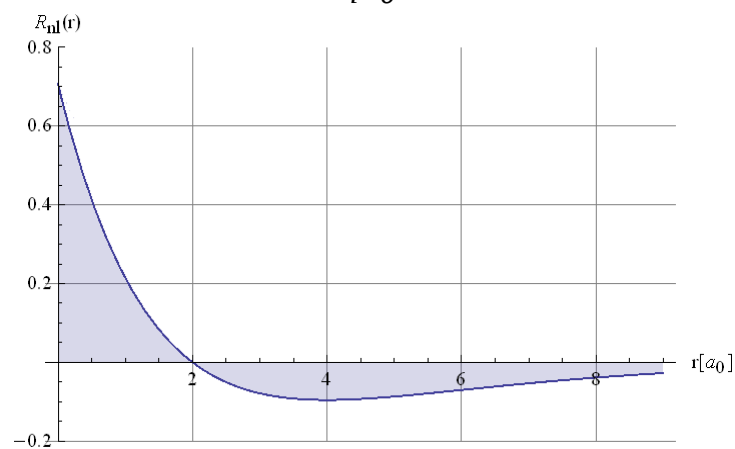
$$E_n = -\frac{1}{n^2} .$$

Za sam metod rešavanja Šredingerove jednačine i određivanja energijskih nivoa atoma vodonika mogu se konsultovati knjige [5,7,8,11,18].

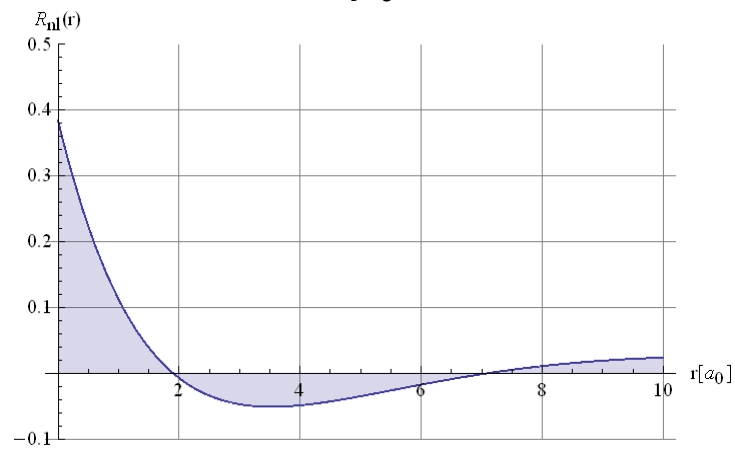
Radijalni delovi vodoničnih talasnih funkcija predstavljani grafički



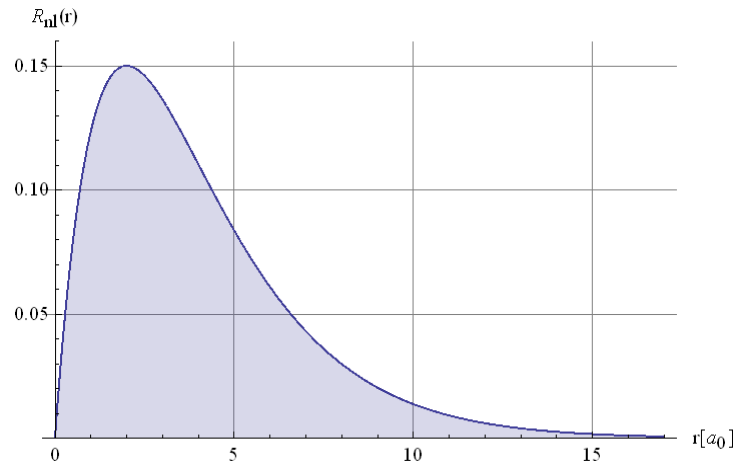
Grafik 22. Radijalni deo vodonične talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji $n=1$, $l=0$



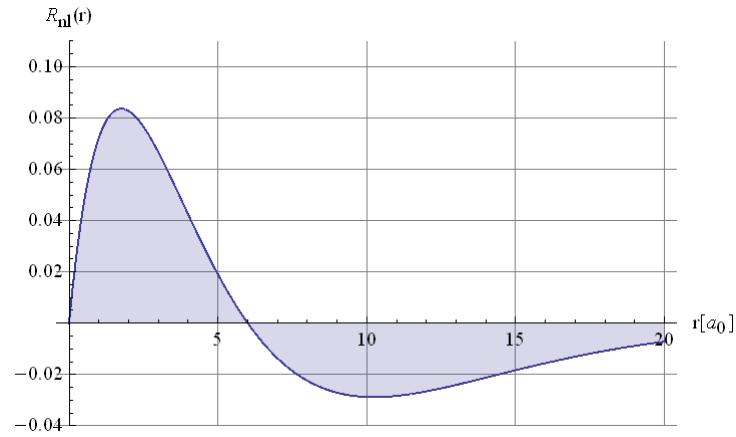
Grafik 23. Radijalni deo vodonične talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji $n=2$, $l=0$



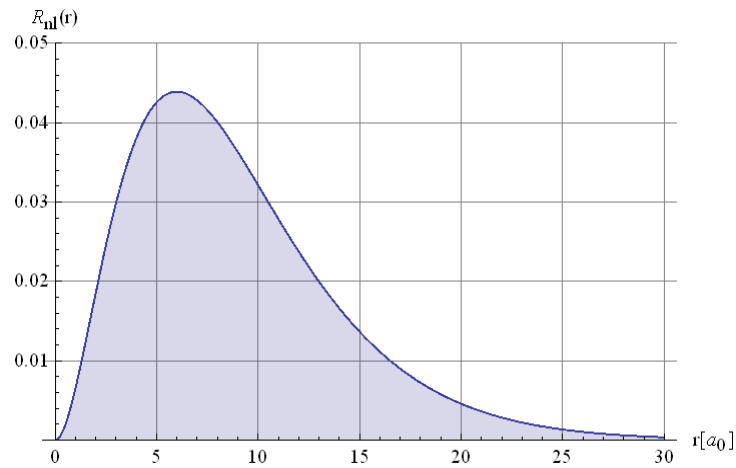
Grafik 24. Radijalni deo vodonične talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji $n=3$, $l=0$



Grafik 25. Radijalni deo vodonične talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji $n=2$, $l=1$



Grafik 26. Radijalni deo vodonične talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji $n=3$, $l=1$



Grafik 27. Radijalni deo vodonične talasne funkcije u koordinatnoj reprezentaciji $n=3$, $l=2$

Atom Vodonika u impulsnoj reprezentaciji

Šredingerova jednačina za atom vodonika glasi:

$$\frac{p^2}{2} \Psi_{nlm}(\rho, \theta, \phi) + V_{Coul.}(\rho) \Psi_{nlm}(\rho, \theta, \phi) = E \Psi_{nlm}(\rho, \theta, \phi).$$

Množenjem Šredingerove jednačine sa $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}$ pa kasnijom integracijom po celom prostoru dobija se sledeća jednakost [7]:

$$(2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = - \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} V_{Coul.}(\rho) \Psi_{nlm}(\rho, \theta, \phi) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (5.2)$$

Postoje razni načini da se ovaj integral reši. Istorijski, prvi su ovo učinili Pauling i Podolski 1929. godine, a iza njih Fok (Fock) koristeći $R^3 \rightarrow R^4$ preslikavanje. Prvi način rešavanja detaljnije je obrazložen u [9], a drugi način rešavanja u literaturi [4]. Ipak svi autori dobijaju ekvivalentno rešenje:

$$\tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \left(\frac{2}{\pi} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right)^{1/2} n^2 \frac{n^l p^l}{(1+p^2 n^2)^{l+1}} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{n^2 p^2 - 1}{n^2 p^2 + 1} \right) Y_{lm}(\hat{p}). \quad (5.3)$$

Pokušaćemo sada da reprodukujemo ovo rešenje koristeći znatno drugačiji metod za rešavanje ovog trostrukog integrala.

Atom vodonika u impulsnoj reprezentaciji korišćenjem Apelovog reda za rešavanje radijalnog integrala

Rešenje Šredingerove jednačine za atom vodonika koje ćemo koristiti glasi [8]:

$$\Psi_{nlm}(\rho, \theta, \phi) = \frac{1}{(2l+1)!} \left\{ \left[\frac{2}{n} \right]^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right\}^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \rho) Y_{lm}(\theta, \phi).$$

Uzevši u obzir da je : $\rho = \frac{2r}{n}$

i pisanjem jednačine koristeći r kao varijablu:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{(2l+1)!} \left\{ \left[\frac{2}{n} \right]^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right\}^{1/2} e^{-r/n} (2r/n)^l {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{n}) Y_{lm}(\hat{r}).$$

Zamenom poslednje jednačine u (5.2) dobija se:

$$\begin{aligned}
 (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\
 = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{r} \frac{1}{(2l+1)!} \left\{ \left[\frac{2}{n} \right]^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right\}^{1/2} e^{-r/n} (2r/n)^l {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{n}) \\
 \times e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} r^2 \sin(\theta) Y_{lm}(\hat{\vec{r}}) dr d\theta d\phi.
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Osnovni problem pri izračunavanju ovog integrala predstavlja vektorska priroda $\vec{p}$ i $\vec{r}$ koje se nalaze u eksponentu, kao i njihov skalarni proizvod. Da bismo uspešno izračunali ovaj integral, moramo na neki način transformisati ovaj član.

Kada na (5.4) primenimo formulu (3.6) dobija se:

$$\begin{aligned}
 (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\
 = \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{r} \frac{1}{(2l+1)!} \left\{ \left[\frac{2}{n} \right]^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right\}^{1/2} e^{-r/n} (2r/n)^l {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{n}) \\
 \times [4\pi \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} j_{l_1}(pr) Y_{l_1 m_1}^*(\hat{\vec{p}}) Y_{l_1 m_1}(\hat{\vec{r}})] \sin(\theta) r^2 Y_{lm}(\hat{\vec{r}}) dr d\theta d\phi.
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

U izrazu (5.5) prvo ćemo izvršiti integraciju po uglovima. Kako je ortonormiranost sfernih harmonika data sa:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l_1 m_1}^*(\hat{\vec{r}}) Y_{l_2 m_2}(\hat{\vec{r}}) \sin(\theta) d\theta d\phi = \delta_{l_1 l_2} \delta_{m_1 m_2},$$

jednačina (5.5) postaje:

$$\begin{aligned}
 (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\
 = \int_0^{+\infty} \frac{1}{r} \frac{1}{(2l+1)!} \left\{ \left[\frac{2}{n} \right]^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right\}^{1/2} e^{-r/n} (2r/n)^l {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{n}) \\
 \times [4\pi \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} i^{l_1} j_{l_1}(pr) Y_{l_1 m_1}(\hat{\vec{p}})] r^2 dr \delta_{l_1 l} \delta_{m_1 m}.
 \end{aligned}$$

Ovde su $\delta_{l,l}, \delta_{m,m}$ Kronekerove delte. Kronekerova delta biće različita od nule samo za one članove za koje je $l_1 = l$ i $m_1 = m$, tako da ćemo mi zadržati samo taj član u našem razvoju. Zbog dalje pogodnosti u pisanju obeležimo sa:

$$\tilde{N} = \frac{1}{(2l+1)!} \left\{ \left[\frac{2}{n} \right]^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right\}^{1/2}.$$

Šredingerova jednačina sada postaje:

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\ = 4\pi i^l \tilde{N} \left[\frac{2}{n} \right]^l \int_0^{+\infty} e^{-r/n} r^{l+1} {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{n}) j_l(pr) dr Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Nakon primene formule koja povezuje sferične Beselove funkcije i konfluentne hipergeometrijske funkcije (3.10) na izraz (5.6) dobijamo:

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\ = 4\pi i^l \frac{1}{(3/2)_l} \left[\frac{p}{2} \right]^l \tilde{N} \left[\frac{2}{n} \right]^l \int_0^{+\infty} e^{-r/n-ipr} r^{2l+1} {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{n}) {}_1F_1(l+1, 2l+l, 2ipr) dr Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \end{aligned} \quad (5.7)$$

U opštem slučaju integral oblika:

$$\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt,$$

jednak je

$$h^{-d} \Gamma(d) F_2(d; a, a'; b, b'; \frac{k}{h}, \frac{k'}{h}). \quad (5.8)$$

Dokaz ove jednakosti prikazan je u dodatku.

Kada (5.8) primenimo na (5.7) dobijamo:

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\ = 4\pi i^l \frac{1}{(3/2)_l} \left[\frac{p}{2} \right]^l \tilde{N} \left[\frac{2}{n} \right]^l \int_0^{+\infty} e^{-r/n-ipr} r^{2l+1} {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \frac{2r}{n}) {}_1F_1(l+1, 2l+l, 2ipr) dr Y_{lm}(\hat{\vec{p}}) \end{aligned}$$

$$= 4\pi i^l \frac{1}{(3/2)_l} \left[\frac{p}{2} \right]^l \tilde{N} \left[\frac{2}{n} \right]^l \left[\frac{n}{1+ipn} \right]^{2l+2} \Gamma(2l+2) F_2(2l+2; l+1-n, l+1; 2l+2, 2l+2; \frac{2}{1+ipn}, \frac{2ipn}{1+ipn}) \times Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (5.9)$$

Ovde je F_2 Apellov hipergeometrijski red definisan na sledeći način:

$$F_2(d; a, a'; b, b'; x, y) = \sum_{m,n=0}^{+\infty} \frac{(d)_{m+n} (a)_m (a')_n}{(b)_m (b')_n m! n!} x^m y^n. \quad (5.10)$$

Apellov red može se u specijalnim slučajevima svesti na hipergeometrijske funkcije. Upravo takav slučaj imamo u (5.9). Naime ukoliko je $d = b = b'$, ovaj red će se svesti na sledeću funkciju:

$$F_2(d; a, a'; d, d; x, y) = (1-x)^{-a} (1-y)^{-a'} {}_2F_1(a, a', d, \frac{xy}{(1-x)(1-y)}) \quad (5.11)$$

Primenom jednakosti (5.11) na (5.9) dati izraz će izgledati ovako:

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) &= \\ &= 4\pi i^l \frac{1}{(3/2)_l} \left[\frac{p}{2} \right]^l \tilde{N} \left[\frac{2}{n} \right]^l \left[\frac{n}{1+ipn} \right]^{2l+2} \left(\frac{ipn+1-2}{ipn+1} \right)^{n-l-1} \left(\frac{ipn+1-2ipn}{ipn+1} \right)^{-l-1} \Gamma(2l+2) \\ &\times {}_2F_1(l+1-n, l+1, 2l+2, \frac{-4ipn}{(ipn-1)^2}) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Nakon sređivanja jednačine (5.12) dobija se:

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) &= \\ &= 4\pi i^l \frac{\tilde{N}}{(3/2)_l} n^{n+2} p^l \frac{(ipn-1)^{n-2l-2}}{(ipn+1)^n} (-1)^{n-l-1} \Gamma(2l+2) {}_2F_1(l+1-n, l+1, 2l+2, \frac{-4ipn}{(ipn-1)^2}) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Sada je potrebno eliminisati kompleksnu jedinicu iz promenljive u Gausovoj hipergeometrijskoj funkciji. Ovo se najlakše postiže određenom klasom transformacija hipergeometrijskih funkcija koje se nazivaju kvadratične. Napomenimo da i iz same definicije hipergeometrijske funkcije sledi da je hipergeometrijska funkcija invarijantna u odnosu na izmenu prva dva indeksa. Imajući ovo u vidu, i imajući u vidu da je Počamerov simbol u imeniocu dva puta veći od jednog od Počamerovih simbola u brojiocu možemo pisati sledeću formulu [1]:

$${}_2F_1(a, b, 2b, z) = (1 - \frac{z}{2})^{-a} {}_2F_1(\frac{a}{2}, \frac{a+1}{2}, b + \frac{1}{2}, \frac{z^2}{(2-z)^2}), \quad (5.14)$$

odnosno kada u obzir uzmemo poznatu jednakost iz algebre kompleksnih brojeva:

$$(1 - ix)(1 + ix) = 1 + x^2. \quad (5.15)$$

Primenimo navedenu transformaciju za Gausovu hipergeometrijsku (5.14) funkciju na naš konkretan slučaj (5.13) i neznatno sredimo izraze:

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} (\frac{p^2}{2} - E) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\ = 4\pi i^l \frac{\tilde{N}}{(3/2)_l} n^{n+2} p^l \frac{(1 - p^2 n^2)^{n-l-1}}{(1 + p^2 n^2)^n} (-1)^{n-l-1} \Gamma(2l+2) {}_2F_1(\frac{l+1-n}{2}, \frac{l+2-n}{2}, l + \frac{3}{2}, \frac{-4p^2 n^2}{(1 - p^2 n^2)^2}) Y_{lm}(\hat{p}). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Na prvi pogled uočljiv problem sa ovakvom talasnom funkcijom jeste njena konačnost. Naime, jedan od postulata kvantne mehanike govori da talasna funkcija mora biti konačna u celom prostoru. To za ovu konkretnu talasnu funkciju nije ispunjeno i to u tački $p = 1/n$. Dakle, jasno zaključujemo da datu funkciju moramo transformisati dalje kako bismo dobili rešenje koje bi imalo fizičkog značenja.

Takođe, poređenjem sa rezultatima za atom vodonika u impulsnoj reprezentaciji (5.3), možemo zaključiti da data transformacija mora biti iz reda inverznih kvadratičnih, kakva je upravo transformacija [1]:

$${}_2F_1(a, a + \frac{1}{2}, c, z) = (1 - z)^{-a} {}_2F_1(2a, 2c - 2a - 1, c, \frac{\sqrt{1-z}-1}{2\sqrt{1-z}}). \quad (5.17)$$

Kada (5.17) primenimo na (5.16):

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} (\frac{p^2}{2} - E) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = \\ = 4\pi i^l \frac{\tilde{N}}{(3/2)_l} n^{n+2} p^l \frac{(1 - p^2 n^2)^{n-l-1}}{(1 + p^2 n^2)^n} \frac{(1 - p^2 n^2)^{l+1-n}}{(1 + p^2 n^2)^{l+1-n}} (-1)^{n-l-1} \Gamma(2l+2) \\ \times {}_2F_1(l+1-n, l+1+n, l + \frac{3}{2}, \frac{p^2 n^2}{(1 + p^2 n^2)^2}) Y_{lm}(\hat{p}). \end{aligned}$$

Kraćenjem članova u razlomcima dobija se sledeći izraz:

$$\begin{aligned}
(2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) &= \\
&= -4\pi i^l \frac{\tilde{N}}{(3/2)_l} n^{n+2} p^l \frac{1}{(1+p^2 n^2)^{l+1}} (-1)^{n-l-1} \Gamma(2l+2) \\
&\times {}_2F_1\left(l+1-n, l+1+n, l+\frac{3}{2}, \frac{p^2 n^2}{1+p^2 n^2}\right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}).
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Ne postoji fizička prepreka da ovo bude konačan izraz za atom vodonika u impulsnoj reprezentaciji. Pre nego što pređemo na sređivanje članova koji zavise isključivo od kvantnih brojeva, a sa ciljem dalje provere našeg rezultata, načinimo poslednju transformaciju. U posebnom slučaju Gegenbauerovi polinomi i Gausova hipergeometrijska funkcija povezani su sledećom relacijom [1]:

$${}_2F_1\left(-\nu, \nu+2\lambda, \lambda+\frac{1}{2}, \frac{1-z}{2}\right) = C_n^\lambda(z) \frac{\Gamma(\nu+1)\Gamma(2\lambda)}{\Gamma(\nu+2\lambda)}. \tag{5.19}$$

Kako je to i slučaj u našem izrazu (5.18), odnosno $b = -a + 2c$, možemo transformisati Gausovu hipergeometrijsku funkciju u skladu sa relacijom (5.19) :

$$\begin{aligned}
(2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) &= \\
&= 4\pi i^l \frac{\tilde{N}}{(3/2)_l} n^{n+2} p^l \frac{1}{(1+p^2 n^2)^{l+1}} (-1)^{n-l-1} \Gamma(2l+2) \\
&\times \frac{\Gamma(2l+2)\Gamma(n-l)\Gamma(2l+2)}{\Gamma(n+l+1)} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{1-n^2 p^2}{1+n^2 p^2} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}).
\end{aligned} \tag{5.20}$$

Imajući u vidu da je parnost Gegenbauerovih polinoma data sa :

$$C_n^\alpha(-z) = (-1)^n C_n^\alpha(z), \tag{5.21}$$

da je Počamerov simbol od $(3/2)_l = \frac{(2l+1)!}{2^{2l} l!}$ i predstavljanjem $\tilde{N}$ koristeći kvantne brojeve n i l dobijamo sledeću jednakost:

$$(2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E \right) \tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = 4\pi i^l \left(\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right)^{1/2} \frac{n^l p^l}{(1+p^2 n^2)^{l+1}} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{n^2 p^2 - 1}{n^2 p^2 + 1} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \tag{5.22}$$

$$\text{Napomenimo ovde da je u atomskom sistemu jedinica } E = -\frac{1}{2n^2} \tag{5.23}$$

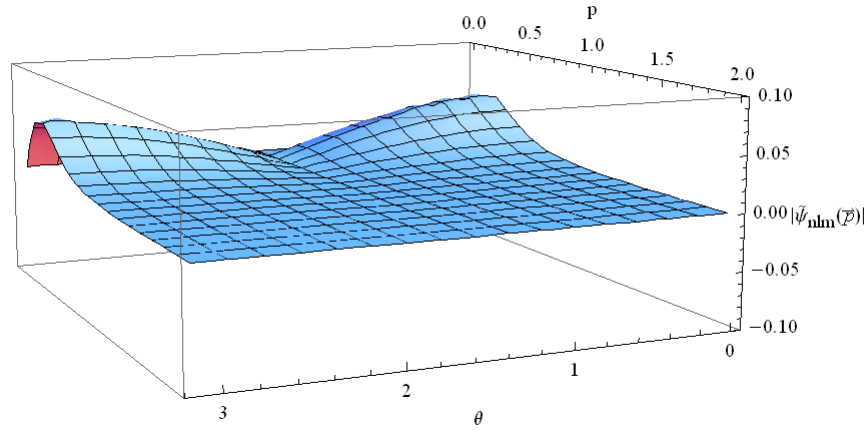
$$i \left(\frac{p^2}{2} - E \right) = \left(\frac{p^2}{2} + \frac{1}{2n^2} \right) = \frac{n^2 p^2 + 1}{2n^2}. \quad (5.24)$$

Zamenom (5.23) i (5.24) u (5.22) dobijamo konačan izraz za atom vodonika u impulsnoj reprezentaciji:

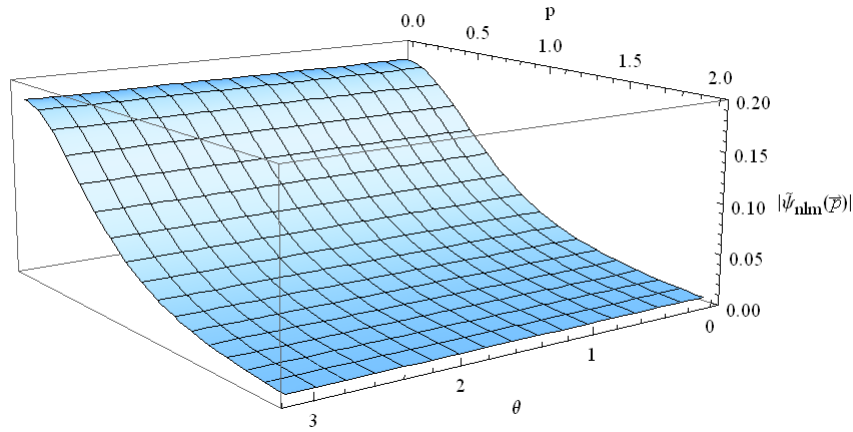
$$\tilde{\Psi}_{nlm}(\vec{p}) = i^l \left(\frac{2}{\pi} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right)^{1/2} n^2 \frac{n^l p^l}{(1 + p^2 n^2)^{l+1}} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{n^2 p^2 - 1}{n^2 p^2 + 1} \right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}) = \tilde{R}_{nl}(p) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (5.25)$$

Ovaj rezultat je skoro potpuno identičan rezultatu (5.3), sa izuzetkom člana i^l koji je posledica i načina na koji smo definisali Furiје transform (2.6a) i inverzni Furiје transform (2.6b), i ne utiče bitno na fiziku problema. Do rezultata koji su drugačiji od ovih ili su identični ovim rezultatima sa izuzetkom kompleksne jedinice na stepen l , dolazi više autora [6,9], a autor [15] objašnjava čisto kompleksnu ili čisto realnu prirodu talasne funkcije u impulsnoj reprezentaciji drugačijom prirodom p i d stanja u impulsnoj reprezentaciji.

Grafičko predstavljanje dobijenih rezultata

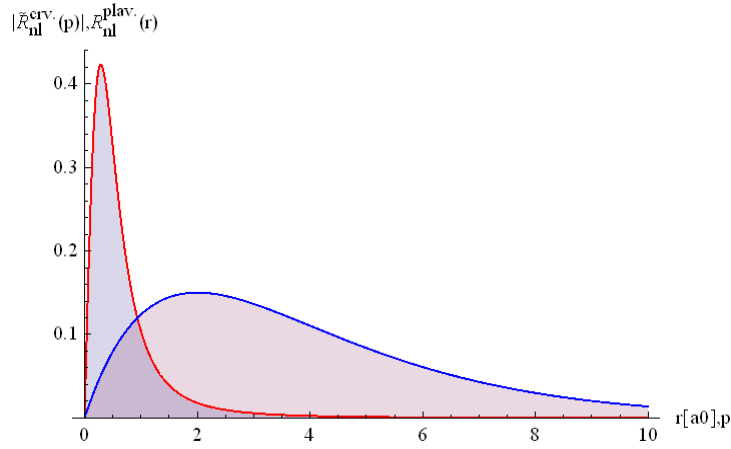


Grafik 28. Modul vodonične talasne funkcije u impulsnoj reprezentaciji predstavljen u zavisnosti od parametara p i θ sa konstantnom vrednošću parametra $\phi = \frac{\pi}{3}$, $n=2$, $l=1$, $m=0$

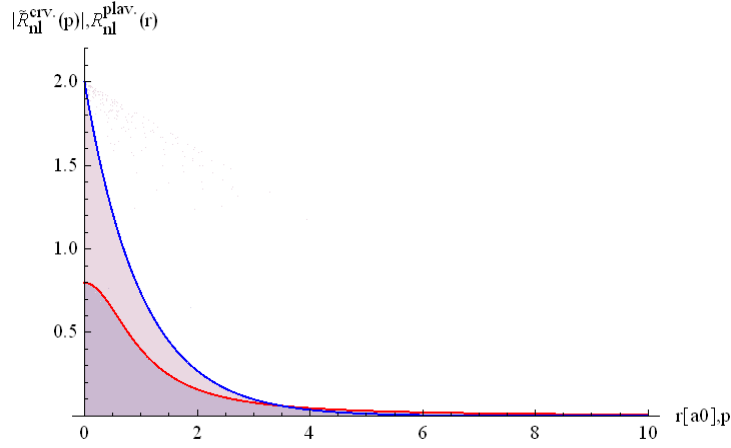


Grafik 29. Modul vodonične talasne funkcije u impulsnoj reprezentaciji predstavljen u zavisnosti od parametara p i θ sa konstantnom vrednošću parametra $\phi = \frac{\pi}{3}$, $n=1$, $l=0$, $m=0$

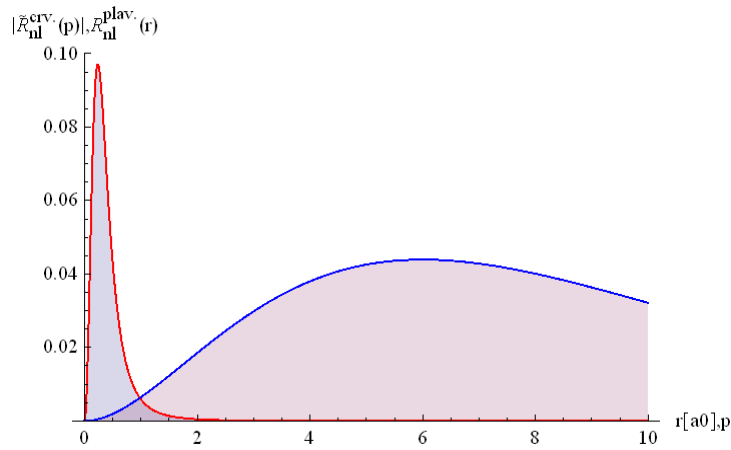
Poređenje dobijenih rezultata



Grafik 30. Poređenje modula radijalnog dela vodonične talasne funkcije u impulsnoj reprezentaciji i radijalnog dela koordinatne vodonične talasne funkcije $n=2, l=1, m=0$



Grafik 31. Poređenje modula radijalnog dela vodonične talasne funkcije u impulsnoj reprezentaciji i radijalnog dela koordinatne vodonične talasne funkcije $n=1, l=0, m=0$



Grafik 32. Poređenje radijalnog dela modula vodonične talasne funkcije u impulsnoj reprezentaciji i radijalnog dela koordinatne vodonične talasne funkcije $n=3, l=2, m=0$

6. KULONOVİ STURMIANI U IMPULSNOJ REPREZENTACIJI

Uopšteno o Kulonovim Sturmianima

Jedan od najranijih trijumfa kvantne teorije jeste rešavanje Šredingerove jednačine za vodoniku slične atome. Logično je bilo nadalje koristiti talasne funkcije vodoniku sličnih atoma kao gradivne delove talasnih funkcija složenijih atoma. Ovom tematikom za atom helijuma bavili su se Šal (Shull) i Luvdin (Löwdin). Naziv Sturmiani potiče od Rotenberg-a koji je želeo da naglasi njihovu vezu sa Šturm-Liuvilovom (Sturm-Liouville) teorijom.

Šturm-Liuvilova teorija je grana matematike osnovana od strane Šturma i Liuvila u kojoj centralno mesto zauzima Šturm-Liuvilova jednačina koja glasi:

$$-\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{dy}{dx}\right] + q(x)y = \lambda w(x)y.$$

U slučaju kada:

$$p(x) \rightarrow 1 \text{ i } q(x) \rightarrow \frac{k^2}{2} + \frac{l(l+1)}{r^2},$$

ova jednačina postaje:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{k^2}{2} + \frac{kn}{r}\right]u_{nl}(r) = 0.$$

Ukoliko zamenimo:

$u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ i $k = \frac{Z}{n}\left(\frac{1}{-2E}\right)^{1/2}$, dobijamo upravo Šredingerovu jednačinu za vodoniku slične atome, čije su rešenje Kulonovi Sturmiani [16]:

$$\frac{p^2}{2}\Psi'_{nlm}(\rho, \theta, \phi) + V_{H-like}(\rho)\Psi'_{nlm}(\rho, \theta, \phi) = E\Psi'_{nlm}(\rho, \theta, \phi). \quad (6.1)$$

U jednačini (6.1) član $V_{H-like}(\rho)$ odnosi se na potencijal vodoniku sličnog atoma koji poseduje više od jednog protona u jezgru odnosno može se reći da je Šredingerova jednačina za atom vodonika specijalan slučaj ovakve jednačine u kojoj je $Z=1$. Naša promenljiva ρ sada postaje:

$$\rho = \frac{2Zr}{n}. \quad (6.2)$$

Radijalni deo talasne funkcije dobija oblik:

$$R'_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na_\mu}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-Zr/na_\mu} \left(\frac{2Zr}{na_\mu}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_\mu}\right). \quad (6.3)$$

Kulonovi Sturmiani u impulsnoj reprezentaciji

Primenjivanjem istih jednostavnih transformacija iz poglavlja 5. dobijamo sledeću jednačinu:

$$(2\pi)^{3/2} \left(\frac{p^2}{2} - E\right) \tilde{\Psi}'_{nlm}(\vec{p}) = - \int_0^{+\infty} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} V_{H-like.}(\rho) \Psi'_{nlm}(\rho, \theta, \phi) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi. \quad (6.4)$$

Jednačina je ekvivalentna jednačini za atom vodonika (5.2), sa izuzetkom toga što je $Z > 1$ i ceo broj pa se mogu primeniti i potpuno iste transformacije kao za atom vodonika. Razlika će biti samo u sledećim postavkama problema :

a) Kulonovski potencijal biće zamenjen potencijalom oblika:

$$-\frac{n}{2r} \rightarrow -\frac{n}{2Zr}.$$

b) Energija u atomskom sistemu jedinica postaje:

$$E = -\frac{Z^2}{n^2}.$$

Rešenja koja se dobijaju primenom ekvivalentnih transformacija su:

$$\tilde{\Psi}'_{nlm}(\vec{p}) = i^l \left(\frac{2}{\pi} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}\right)^{1/2} \left(\frac{n}{Z}\right)^2 \frac{\left(\frac{n}{Z}\right)^l p^l}{\left(1 + p^2 \left(\frac{n}{Z}\right)^2\right)^{l+1}} C_{n-l-1}^{l+1} \left(\frac{\frac{n^2 p^2}{Z^2} - 1}{\frac{n^2 p^2}{Z^2} + 1}\right) Y_{lm}(\hat{\vec{p}}). \quad (6.5)$$

Što za $Z = 1$ korespondira rešenju za atom vodonika (5.25).

7. DODATAK

Lema: Integral $\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt$ jednak je

$$h^{-d} \Gamma(d) F_2(d; a, a'; b, b'; \frac{k}{h}, \frac{k'}{h}).$$

Dokaz: Iz same definicije Kumerovih hipergeometrijskih funkcija sledi sledeća jednakost:

$$\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt = \int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} \left[\sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(a)_m (a')_n}{(b)_m (b')_m} \frac{k^m}{m!} \frac{k'^n}{n!} t^{n+m} \right] dt.$$

Kako suma i integral mogu da zamene mesta možemo pisati (integral nije ništa no gama funkcija) :

$$\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt = \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} \left[\frac{(a)_m (a')_n}{(b)_m (b')_m} \frac{k^m}{m!} \frac{k'^n}{n!} t^{n+m} \right] dt,$$

odnosno:

$$\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt = \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(a)_m (a')_n}{(b)_m (b')_m} \frac{k^m}{m!} \frac{k'^n}{n!} \int_0^{+\infty} t^{d+n+m-1} e^{-ht} dt. \quad (7.1)$$

Integral u (7.1) jednak je:

$$\int_0^{+\infty} t^{d+n+m-1} e^{-ht} dt = h^{-(d+n+m)} \Gamma(d+n+m), \quad (7.2)$$

što se korišćenjem tzv. Počamerovog identiteta može svesti na:

$$\Gamma(d+n+m) = (d+m)_n \Gamma(d+m) = (d+m)_n (d)_m \Gamma(d). \quad (7.3)$$

Kada (7.3) zamenimo u (7.2), pa potom (7.2) u (7.1) dobijamo:

$$\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt = h^{-(m+n+d)} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(a)_m (a')_n}{(b)_m (b')_m} \frac{k^m}{m!} \frac{k'^n}{n!} (d+m)_n (d)_m \Gamma(d),$$

odnosno:

$$\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt = h^{-d} \Gamma(d) \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(a)_m (a')_n (d)_{m+n}}{(b)_m (b')_n m! n!} \left(\frac{k'}{h}\right)^n \left(\frac{k}{h}\right)^m.$$

Ovo nije ništa drugo do Apelov hipergeometrijski red F_2 iz relacije (5.11) pomnožen sa $h^{-d} \Gamma(d)$.

Sada možemo u konačnom obliku napisati:

$$\int_0^{+\infty} t^{d-1} e^{-ht} {}_1F_1(a, b, kt) {}_1F_1(a', b', k't) dt = h^{-d} \Gamma(d) F_2(d; a, a'; b, b'; \frac{k}{h}, \frac{k'}{h}). \quad (7.4)$$

Ovim je dokaz završen.

8. ZAKLJUČAK

Poznavanje vodoničnih talasnih funkcija i Slejterovih orbitala u impulsnoj reprezentaciji može predstavljati znatno olakšanje pri konkretnim računicama u raznim oblastima fizike. Potpuno je evidentno da formula za atom vodonika u impulsnoj reprezentaciji ima znatno jednostavniju matematičku formu od one u koordinatnoj reprezentaciji. Naravno, pod koordinatnom reprezentacijom podrazumevamo sferne koordinate. Formule za Slejterove orbitale, kao i Gausove orbitale deluju nešto složenije, ali ipak mogu biti od koristi u konkretnim izračunavanjima.

Dalji tok istraživanja u ovoj oblasti može se kretati ka nalaženju jednostavnijih oblika ili jednostavnijih načina za računanje raznih drugih funkcija koje se koriste u molekularnoj kvantnoj mehanici, teoriji rasejanja itd.

Literatura:

- [1] M. Abramowitz, I.A. Stegun, “*Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables*”, National bureau of standards, Applied mathematics, First edition (1964), Tenth printing, (1972)
- [2] A.P. Prudnikov, Yu.A. Bruckov, O.I. Maricev, “*Integrals and series, Volume II- Special functions*”, Overseas publisher association, Third printing (1992)
- [3] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, “*Table of integrals series and products*”, Six edition (1984)
- [4] V. A. Fock, “*Hydrogen atom and non Euclidian geometry*”, Z. Phys. 98, 145 (1935)
- [5] H.A. Bethe and E.E. Salpeter, “*Quantum Mechanics of One-And Two-Electron Atoms*”, Springer, Berlin, (1977)
- [6] J.R. Lombardi “*Hydrogen atom in momentum representation*”, Phy. Rev.A 22,797(1980)
- [7] B.H. Bransden, C.J. Joachain, “*Physics of atoms and molecules*”, Longman, First edition (1989)
- [8] B.H. Bransden, C.J. Joachain, “*Introduction to quantum mechanics*”, Longman, Second edition (2000)
- [9] B. Podolsky, L. Pauling, “*The momentum distribution in hydrogen-like atoms*”, Phys. Rev. 34-109 (1929)
- [10] M. Hage-Hassan, “*On the hydrogen wave function in Momentum-space, Clifford algebra and the Generating function of Gegenbauer polynomials*” Preprint math-ph/0807.4070
- [11] M. Weissbluth, “*Atoms and molecules*”, Academic press, London, First edition, 1978
- [12] Dz. Belkic, H.S. Taylor, “*A unified formula for the Fourier transform of Slater-type orbitals*”, Physica Scripta, Volume 39, Number 2, Str. 226
- [13] Slater, J.C. “*Atomic Shielding Constants*”. Phys. Rev. 36 (1930)
- [14] F. Herbut, “*Kvantna mehanika za istraživače*”, Univerzitet u Beogradu (1999)
- [15] B. Maksić, “*Pauling Legacy: Modeling of the chemical bond*”, Elsevier (1999)
- [16] James Avery, John Avery “*Generalised Sturmians and Atomic spectra*” World scientific (2006)

- [17] F.W.J. Oliver, D.W.Lozier, R.F.Boisvert, C.W.Clark, “*NIST Handbook of Mathematical functions*”, Cambridge press, First edition, (2010)
- [18] J.J. Sakurai, J. Napolitano, “*Modern quantum mechanics*”, Adison-Wesley, Second edition (2011)
- [19] C.Champion, H.Lekadir, M.E.Galassi, O.Fojon, R.D.Rivarola, J. Hanssen, “*Theoretical predictions for ionization cross sections of DNA nucleobases impacted by light ions*”, Phys. Med. Biol. **55** (2010) 6053-6067
- [20] M.E.Galassi, C.Champion, P.F.Weck, R.D. Rivaola, O.Fojon, J. Hanssen, “*Quantum-mechanical predictions of DNA and RNA ionization by energetic proton beams*”, Phys. Med. Biol. **57** (2012) 2081-2099
- [21] C.A.Tachino, F. Martin, R.D. Rivadola, “Theoretical study of interference effects in single electron ionization of N₂ molecules by proton impact” J.Phys.B:At. Mol. Opt. Phys. **45** (2012) 025201 (9pp)
- [22] S.Nandi, A.N, Agnihotri, S.Kasthurirangan, A.Kumar, C.A.Tachino, R.D.Rivarola, F.Martin, L.C.Tribedi, “*Impact ionization of molecular oxygen by 3.5-MeV/u bare carbon ions*”, Physical Review A **85**, 062705 (2012)