

## *Modulul 6*

### **FIZICĂ CUANTICĂ**

**Conținutul modului:**

- 6.1 Bazele experimentale ale fizicii cuantice**
- 6.2 Dualismul undă-corpusul**
- 6.3 Relațiile de nedeterminare**
- 6.4 Ecuația lui Schrödinger**
- 6.5 Semnificația fizică a funcției de undă**
- 6.6 Aplicații ale ecuației lui Schrödinger**

**Evaluare:**

- 1. Definierea mărimilor fizice și precizarea unităților lor de măsură**
- 2. Enunțul și formula legilor fizice studiate**
- 3. Răspunsuri la întrebările finale**

#### **6.1 Bazele experimentale ale fizicii cuantice**

*Mecanica cuantică* se ocupă cu studiul legilor de mișcare ale microparticulelor (de exemplu, electroni, protoni, mezoni) sau al sistemelor de astfel de microparticule (de exemplu, nuclee atomice, atomi, molecule, ioni) și a interacțiunilor care guvernează această mișcare. Pentru a înțelege necesitatea și aria de interes a mecanicii cuantice, vom prezenta câteva fapte experimentale din care ea decurge.

Radiația termică este emisia de energie în mediul ambiant, sub forma undelor electromagnetice, pe care o realizează orice corp, indiferent de temperatura la care se află. Această emisie se face pe seama energiei interne a corpului și are loc în mod continuu, pe tot spectrul de lungimi de undă, dar cu intensitate diferită pentru diferite lungimi de undă și ea depinde în mod esențial de temperatura absolută  $T$  la care se află corpul.

Deoarece toate corpurile emit energie electromagnetică sub formă de radiație termică, se ajunge la un moment dat ca două sau mai multe corpuri să aibe aceeași temperatură, adică să fie la echilibrul termodinamic. În această situație, fluxul de energie emisă de corp sub formă de radiație termică este egal cu fluxul de energie absorbită de acesta.

În general, orice corp poate emite energie și poate absorbi energie, raportul dintre capacitatea sa de emisie și capacitatea de absorbție este același pentru toate corpurile, fiind o constantă universală  $f(\lambda, T)$  care depinde de lungimea de undă și de temperatura absolută a corpului. Acesta este conținutul *legii lui Kirchhoff*.

Pentru o studiere mai ușoară a radiației termice s-a imaginat un model de corp ideal, numit corpul absolut negru, care absoarbe toate radiațiile ce cad asupra sa, indiferent de lungimea lor de undă, iar

constanta universală din legea lui Kirchhoff este chiar capacitatea de emisie a corpului absolut negru.

În studiul radiației termice (deci și a radiației corpului absolut negru) se utilizează o serie de mărimi fizice. Cele mai uzuale sunt:

*Fluxul energetic radiant integral* sau *puterea radiantă* – reprezintă energia totală  $W$  emisă (radiată) de un corp în unitatea de timp, adică viteza (rata) de transmisie în timp a energiei radiate:

$$\Phi = \frac{dW}{dt}, \text{ cu unitatea: } [\Phi]_{SI} = 1 \frac{J}{s} = 1W. \quad (6.1)$$

*Fluxul energetic spectral* reprezintă energia emisă sau absorbită de un corp în unitatea de timp, dar numai în intervalul de lungimi de undă  $(\lambda, \lambda+d\lambda)$ :

$$\Phi_\lambda = \frac{d\Phi}{d\lambda}, \text{ de unde } \Phi = \int_0^\infty \Phi_\lambda d\lambda. \quad (6.2)$$

Această mărime arată faptul că energia radiată (radiația termică) este distribuită în funcție de lungimea de undă.

*Intensitatea energetică a unei surse punctiforme* reprezintă fluxul de radiație emis în unitatea de unghi solid:

$$I = \frac{d\Phi}{d\Omega}, \text{ cu unitatea: } [I]_{SI} = 1 \frac{W}{sr}. \quad (6.3)$$

Unghiul solid este elementul geometric sub care se vede dintr-un punct  $O$  o anumită suprafață de arie  $A$  și normală exterioară  $\vec{n}$ . În SI se măsoară în steradiani (sr). Elementul de unghi solid este:

$$d\Omega = \frac{\vec{r} \cdot d\vec{A}}{r^3} = \frac{dA}{r^2} \cos \theta, \quad (6.4)$$

unde  $\theta$  este unghiul făcut de vectorul de poziție  $\vec{r}$  al punctului de observație cu normala exterioară  $\vec{n}$  a suprafeței elementare  $dA$  din jurul acestui punct (fig. 6.1).

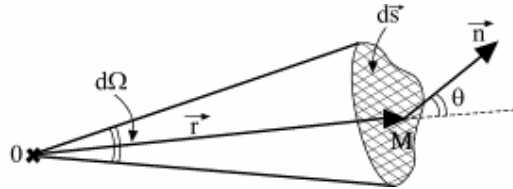


Fig. 6.1

*Radianța* sau *emitanța energetică* reprezintă fluxul energetic radiat (emis) în toate direcțiile de o suprafață oarecare  $A$ , raportat la unitatea de suprafață:

$$R = \frac{d\Phi}{dA}, \text{ cu unitatea: } [R]_{SI} = 1 \frac{W}{m^2}. \quad (6.5)$$

*Radianța spectrală* reprezintă fluxul energetic emis în toate direcțiile de o suprafață oarecare, raportat la unitatea de suprafață, dar numai în intervalul de lungimi de undă  $(\lambda, \lambda+d\lambda)$ :

$$R_\lambda = \frac{dR}{d\lambda}, \text{ de unde: } R = \int_0^\infty R_\lambda d\lambda. \quad (6.6)$$

*Densitatea de energie radiată* reprezintă energia electromagnetică medie radiată de un corp, în toate direcțiile, raportată la unitatea de volum:

$$w = \frac{dW}{dV}, \quad \text{cu unitatea: } [w]_{SI} = 1 \frac{J}{m^3}. \quad (6.7)$$

*Densitatea spectrală de energie radiată* reprezintă energia radiată de un corp, în toate direcțiile și în unitatea de volum, dar numai în intervalul de lungimi de undă ( $\lambda, \lambda+d\lambda$ ):

$$w_\lambda = \frac{dw}{d\lambda}, \quad \text{de unde: } w = \int_0^\infty w_\lambda d\lambda. \quad (6.8)$$

Ultima relație arată faptul că radiația termică este de fapt o suprapunere infinită de radiații monocromatice (cu  $\lambda = \text{const}$ ).

Studiul experimental al corpurilor (și a modelului de corp absolut negru) a condus la formularea a o serie de legi care vizau, pe de o parte, stabilirea naturii și a mecanismului intim al radiației termice, iar pe de altă parte, deducerea expresiei dependenței densității spectrale de energie de lungimea de undă și de temperatură. Vom aminti numai cele mai semnificative legi.

*Legea lui Stefan – Boltzmann* precizează că radianța integrală a corpului absolut negru depinde de puterea a patra a temperaturii sale absolute, adică:

$$R = \sigma T^4, \quad \sigma = 5,6687 \cdot 10^{-8} \text{ W } \cdot \text{m}^{-2} \text{ K}^{-4}, \quad (6.9)$$

unde constanta  $\sigma$  se numește constanta lui Stefan-Boltzmann.

Se poate demonstra că între radianța integrală  $R$  și densitatea integrală de energie radiată  $w$  există relația:

$$R = \frac{c}{4} w, \quad (6.10)$$

deci o altă variantă a legii lui Stefan – Boltzmann este:

$$w = \frac{4\sigma}{c} T^4 = a T^4, \quad a = 7,56 \cdot 10^{-16} \text{ J } \cdot \text{m}^{-3} \text{ K}^{-4}, \quad (6.11)$$

unde  $a$  este noua constantă universală, cu valoarea de mai sus. Această lege a fost verificată experimental, dovedindu-se foarte corectă.

*Legea lui Wien* stabilește pe cale semiempirică că densitatea spectrală de energie este o funcție care depinde de produsul dintre lungimea de undă și temperatură, adică  $\lambda T$ , împărțită la puterea a cincea a lungimii de undă:

$$w_\lambda = \frac{1}{\lambda^5} F(\lambda T). \quad (6.12)$$

Din această lege rezultă legea lui Stefan – Boltzmann:

$$w = \int_0^\infty w_\lambda d\lambda = \left[ \int_0^\infty \frac{1}{(\lambda T)^5} F(\lambda T) d(\lambda T) \right] \cdot T^4 \equiv a T^4, \quad (6.13)$$

unde, paranteza mare fiind o integrală definită, am notat-o cu  $a$  și ea este tocmai constanta lui Stefan – Boltzmann.

Importanța legii lui Stefan – Boltzmann este evidențiată și atunci când se calculează maximul densității spectrale de energie:

$$\frac{dw_\lambda}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda^6} \left[ \lambda T \frac{dF}{d(\lambda T)} - 5F(\lambda T) \right] \equiv \frac{1}{\lambda^6} G(\lambda T) = 0 . \quad (6.14)$$

Funcția din paranteza mare, notată cu  $G(\lambda T)$ , are o singură soluție reală, pe care o notăm astfel:

$$\lambda_{\max} T = b , \quad b = 2,89782 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K} \quad (6.15)$$

unde valoarea constantei  $b$  se determină experimental.

Raționamentul de mai sus constituie tocmai deducerea teoretică a *legii de deplasare a lui Wien*: produsul dintre lungimea de undă corespunzătoare maximului densității spectrale de radiație și temperatura absolută a corpului radiant este o constantă (fig. 6.2).

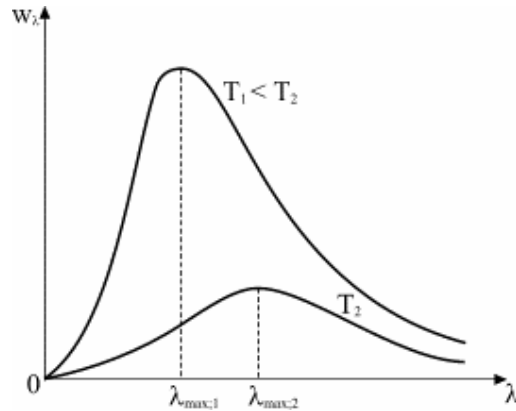


Fig. 6.2

Se observă că, dacă temperatura absolută a unui corp radiant crește, atunci lungimea de undă corespunzătoare maximului de radiație termică scade, adică se va deplasa înspre lungimi de undă mai mici (înspre ultraviolet).

*Legea lui Planck* a fost obținută pornind de la ipoteza conform căreia corpul negru este format din oscilatori elementari (atomi, molecule, ioni), care emit energie sub formă de radiație termică de echilibru. Distribuția după energii a numărului de oscilatori se admite că este o distribuție Maxwell-Boltzmann. Însă, Planck consideră că emisia de energie nu are loc în mod continuu, ci discontinuu sau discret, sub formă de porții minime de energie, numite *cuante de energie*:

$$\varepsilon = h\nu = h \frac{c}{\lambda} , \quad (6.16)$$

unde  $h = 6,62517 \cdot 10^{-34}$  J·s este constanta lui Planck, iar  $\nu$ , respectiv  $\lambda$  sunt frecvența, respectiv lungimea de undă a oscilatorului.

Deoarece energia unui oscilator se emite sub formă de cuante (porții elementare), ea nu poate avea orice valoare, ci doar valori care sunt multiplii întregi ai cuantei elementare:

$$E_n = nh\nu = n\hbar\omega , \quad (6.17)$$

cu  $n = 0, 1, 2, \dots$ , unde  $\hbar = h / 2\pi$  se numește constanta redusă a lui Planck, iar  $\omega$  este pulsația oscilatorului. Din acest motiv, energia medie a unui oscilator nu se va calcula cu ajutorul unei integrale, ci cu ajutorul unei sume:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n \rho_n}{\sum_{n=0}^{\infty} \rho_n} = h\nu \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}} = -h\nu \frac{d}{dx} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}, \quad (6.18)$$

unde am utilizat notația:  $x = \beta h\nu$ . Suma infinită este tocmai o progresie geometrică, astfel că energia medie a unui oscilator va fi:

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} = \frac{hc}{\lambda} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}. \quad (6.19)$$

Aici am indicat totodată și expresia în funcție de variabila lungime de undă. Pentru a afla densitatea de energie corespunzătoare intervalului de lungimi de undă  $(\lambda, \lambda + d\lambda)$ , vom înmulți energia medie a unui oscilator cu numărul de oscilatori care au lungimea de undă situată în acest interval. Se poate demonstra că acest număr este:

$$N_\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^4}. \quad (6.20)$$

Astfel, expresia densității spectrale de energie radiată, expresie cunoscută și sub numele de *legea de distribuție a lui Planck*, este:

$$w_\lambda = \frac{1}{\lambda^5} \frac{8\pi hc}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}. \quad (6.21)$$

Această expresie, dedusă din considerente pur teoretice, are tocmai forma cerută de legea lui Wien. Din ea va putea fi obținută valoarea exactă a constantei  $a$  din legea lui Stefan – Boltzmann și a constantei  $b$  din legea de deplasare a lui Wien. În plus, concordanța foarte bună dintre datele experimentale și dependența densității spectrale de energie de lungimea de undă, justifică pe deplin ipoteza cuantelor de energie a lui Planck.

Ipoteză cuantelor de energie permite, deci, explicarea completă a fenomenelor legate de radiația termică de echilibru.

Efectul fotoelectric reprezintă emisia de electroni de către un metal iradiat cu radiații monocromatice din domeniul ultraviolet (sau din domeniul vizibil, pentru metalele alcaline). Experimental se deduc următoarele legi:

*Legea I:* Intensitatea de saturație a curentului fotoelectric (deci când toți fotoelectronii emiși ajung la anod, fără a se crea o sarcină spațială în jurul catodului) este proporțională cu fluxul radiației monocromatice:  $I_S \sim \Phi$ .

*Legea a II-a:* Energia cinetică a fotoelectronilor extrași este direct proporțională cu frecvența radiației monocromatice:  $E_c \sim \nu$  și nu depinde de fluxul radiației incidente:  $E_c \neq f(\Phi)$ .

*Legea a III-a:* Efectul fotoelectric apare doar peste o anumită frecvență de prag  $\nu_p$ , specifică fiecărui metal:  $\nu = \nu_p$ .

*Legea a IV-a:* Efectul fotoelectric se produce într-un timp foarte scurt, practic instantaneu.

În anul 1905, Albert Einstein dă o explicație teoretică corectă acestor patru legi experimentale. El extinde și asupra radiației ipoteza cuantelor a lui Planck și admite că nu numai emisia de radiație este discontinuă, ci și radiația însăși, fiind formată din particule numite *fotoni*. Energia fotonului este dată de expresia lui Planck:

$$E_f = h\nu = \hbar\omega, \quad (6.22)$$

Fotonul este o particulă care se mișcă cu o viteză egală cu viteza luminii în vid  $c$ . Deci, având viteza  $v = c$ , fotonul nu se poate găsi în repaus ci doar în mișcare, adică masa sa de repaus este egală cu zero:

$$m_f = \frac{m_{of}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad \text{decî, rezultă: } m_{of} = 0. \quad (6.23)$$

Impulsul fotonului, conform teoriei relativității, este:

$$p_f = m_f c = \frac{E_f}{c^2} \cdot c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (6.24)$$

Einstein a explicat efectul fotoelectric astfel: fotonii radiației incidente pătrund în metal și se ciocnesc cu electronii liberi ai atomilor metalului, fiind absorbiți de aceștia. Energia absorbită de electroni servește la scoaterea electronului din metal, efectuându-se un lucru mecanic de extracție  $L_{ex}$ , iar restul de energie este transformat în energie cinetică a fotoelectronului extras.

Legea de conservare a energiei în cazul efectului fotoelectric se poate scrie astfel:

$$h\nu = L_{ex} + \frac{m_0 v^2}{2}. \quad (6.25)$$

Aici apare masa de repaus  $m_0$  a fotoelectronului, ceea ce înseamnă că efectul fotoelectric este un efect nerelativist, adică viteza  $v$  a fotoelectronului extras este cu mult mai mică decît viteza luminii în vid, adică este o viteză nerelativistă.

Cu legea de conservare scrisă de Einstein se pot explica foarte ușor legile experimentale ale efectului fotoelectric.

*Legea I*: Deoarece fiecare foton al radiației incidente scoate numai un singur electron din metal, la saturație numărul acestora fiind  $N_s$ , putem scrie:

$$I_s = \frac{dQ_s}{dt} = \frac{d}{dt}(N_s e) = \frac{dN_s}{dt} e. \quad (6.26)$$

Dar fluxul radiației incidente se poate scrie și astfel:

$$\Phi_s = \frac{dW_s}{dt} = \frac{d}{dt}(N_s h\nu) = \frac{dN_s}{dt} h\nu. \quad (6.27)$$

Radiația incidentă fiind monocromatică, frecvența ei este constantă și se obține tocmai dependența căutată:

$$I_s = \frac{e}{h\nu} \Phi_s, \quad \text{de unde: } I_s \sim \Phi_s. \quad (6.28)$$

*Legea a II-a* se obține ușor:

$$E_c = \frac{mv^2}{2} = h\nu - L_{ex}, \quad \text{de unde: } E_c \sim \nu. \quad (6.29)$$

Deci energia cinetică este proporțională cu frecvența.

*Legea a III-a* se obține ținând cont că energia minimă a fotoelectronului trebuie să asigure doar extragerea acestuia din metal. Punând condiția ca energia cinetică a fotoelectronului scos să fie nulă, din legea conservării rezultă valoarea frecvenței de prag:

$$E_c = 0, \quad h\nu_p = L_{ex}, \quad \text{de unde:} \quad \nu_p = \frac{L_{ex}}{h}. \quad (6.30)$$

Înlocuind această valoare în legea conservării energiei, obținem condiția:

$$h\nu - h\nu_p = \frac{mv^2}{2} \geq 0, \quad (6.31)$$

ceea ce arată că efectul fotoelectric are loc doar pentru o frecvență mai mare decât frecvența de prag:

$$\nu \geq \nu_p = \frac{L_e}{h}. \quad (6.32)$$

*Legea a IV-a* se explică prin faptul că procesul de absorbție a energiei fotonului de către electronul metalului durează extrem de puțin (câteva nanosecunde), ceea ce dă impresia de instantaneitate a producerii efectului fotoelectric.

Efectul Compton reprezintă difuzia sau ciocnirea unui foton din domeniul razelor X cu o țintă “fixă” (un electron “liber” sau o altă particulă), proces în care o parte din energia fotonului incident este transferată țintei. De la un tub Röntgen se trimite un fascicul de raze X spre un sistem de fante (cu rol de colimare), pentru a se obține un paralelism cât mai bun al razelor X. După colimare, fascicolul de raze X cade pe un cristal de grafit și suferă o deviație de unghi  $\theta$  față de direcția inițială. Fascicolul deviat (difuzat) este captat de un detector care înregistrează un curent a cărui intensitate este proporțională cu intensitatea fascicolului difuzat.

În concluzie, efectele fotoelectric și Compton confirmă faptul că radiația electromagnetică are și o natură corpusculară, fiind formată din particule numite fotoni, care posedă energie și impuls, la fel ca și oricare alt corp.

## 6.2 Dualismul undă-corpusul

Radiația electromagnetică are o natură dublă sau duală: ondulatorie și corpusculară. În unele fenomene (de exemplu, interferența și difracția) se manifestă mai pregnant caracterul ondulatoriu al radiației electromagnetice, iar în alte fenomene (de exemplu, efectele fotoelectric și Compton), iese în evidență caracterul corpuscular, adică faptul că radiația este formată din fotoni, particule cu masa de repaus zero. Aceste considerații sunt cunoscute sub denumirea de *dualismul undă-corpusul*.

Fiecărei microparticule  $i$  se asociază o undă (numită, ulterior, *unda de Broglie*), care are lungimea de undă și, respectiv frecvența:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}, \quad \nu = \frac{E}{h}, \quad (6.33)$$

în mod cu totul analog ca și pentru foton.

Deci microparticulei cu caracteristicile corpusculare: masa  $m$ , impulsul  $p=mv$  și energia  $E$ , i se asociază unda de Broglie, care este o undă plană monocromatică, de forma:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k} \vec{r})} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \vec{r})} . \quad (6.34)$$

Am ținut cont de relația dintre impulsul  $p$  al microparticulei și dintre modulul vectorului de undă  $k$ :

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k . \quad (6.35)$$

Când se calculează viteza de propagare a undei de Broglie (adică viteza de fază), se constată o contradicție cu teoria relativității. Faza undei este:

$$\alpha(r, t) = \frac{1}{\hbar}(Et - pr) = \text{const.}, \text{ deci: } d\alpha(r, t) = 0 . \quad (6.36)$$

Deci, viteza de fază a undei monocromatice de Broglie este definită în mod obișnuit, ținând cont de relația precedentă:

$$v_f = \frac{dr}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v} > c . \quad (6.37)$$

Acest rezultat contravine teoriei relativității: nici un corp (și, deci, nici unda asociată lui) nu se poate mișca cu o viteză mai mare decât viteza luminii în vid. Pentru rezolvarea acestei contradicții s-a asociat unei microparticule nu o undă monocromatică plană de Broglie, ci o mulțime infinită de unde monocromatice plane, foarte puțin diferite una de alta, prin valoarea modulului vectorului de undă, mulțime infinită numită *grup de unde* sau *pachet de unde*. Drept urmare, particula va avea o mișcare rectilinie și uniformă cu viteza:

$$v_g = \frac{dr}{dt} = \frac{d\omega}{dk} , \quad (6.38)$$

numită viteza de grup. Ținând cont de relația dintre energie și pulsație, respectiv dintre impuls și modulul vectorului de undă, viteza de grup va fi:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} (p^2 c^2 + m_0^2 c^4)^{\frac{1}{2}} = \frac{pc^2}{E} = v < c , \quad (6.39)$$

unde am utilizat expresia relativistă a energiei.

Deci, viteza de grup este egală cu viteza de mișcare a particulei însăși, ceea ce dovedește justetea ipotezei de a asocia unei particule nu o singură undă de Broglie, ci un grup de unde.

### 6.3 Relațiile de nedeterminare

Fie un grup de unde cu deplasare de-a lungul axei  $Ox$ . Se poate stabili o relație între localizarea spațială a grupului de unde (deci și a particulei), adică  $\Delta x$  și intervalul  $\Delta p_x$  unde se situează valorile impulsului acesteia. Produsul acestor mărimi, numite nedeterminări sau imprecizii nu poate lua orice valoare, ci este de ordinul de mărime al constantei lui Planck:

$$\Delta x \Delta p_x \sim h . \quad (6.40)$$



Această relație se mai poate scrie și astfel:

$$\Delta x \Delta p_x = \hbar, \quad \text{sau:} \quad \Delta x \Delta p_x = \hbar/2. \quad (6.41)$$

Relații asemănătoare se pot scrie și pentru celelalte variabile spațiale  $y$  și  $z$  și ele se numesc *relațiile de nedeterminare* sau *relațiile de incertitudine* sau *relațiile de imprecizie* ale lui Heisenberg. Ne arată că produsul dintre nedeterminările sau impreciziile de măsurare simultană a poziției și impulsului microparticulei trebuie să fie de ordinul de mărime al constantei lui Planck.

În fizica clasică, măsurarea mărimilor fizice nu este limitată principial, ci doar de precizia instrumentelor de măsură utilizate. Deci, cel puțin din punct de vedere teoretic, imprecizia de măsurare poate fi egală cu zero, adică se obține valoarea exactă a mărimii de măsurat. În fizica microparticulelor această concluzie este valabilă, în principiu, atunci când se măsoară o singură mărime fizică. Dar dacă dorim să măsurăm simultan două mărimi fizice, numite mărimi canonic conjugate, atunci situația este principial diferită. După concepția lui Heisenberg, nu este posibilă măsurarea simultană, cu orice precizie dorită, a două mărimi canonic conjugate, căci, prin măsurarea oricăreia din aceste două mărimi, se ajunge la un contact cu sistemul fizic (particula), cu care ocazie are loc o interacțiune între aparatul de măsură și particulă, ceea ce face ca să se modifice starea sistemului (starea particulei), deci se modifică și valoarea mărimii canonic conjugate. De exemplu, prin măsurarea poziției particulei (a coordonatei sale) are loc un transfer de energie (impuls) către particulă și, evident, se perturbă determinarea exactă a valorii impulsului particulei.

Considerând o undă monocromatică (deci cu  $\lambda = \text{const}$ , adică cu  $\Delta k = 0$ , sau  $\Delta p_x = 0$ ), din relațiile de nedeterminare rezultă  $\Delta x \rightarrow \infty$ , deci particula nu poate fi localizată spațial (poate fi situată oriunde în spațiu). Înseamnă că unda monocromatică nu poate descrie un proces localizat în spațiu, deci nu este adecvată pentru a fi asociată unei microparticule.

În mod analog, presupunând că am putea localiza perfect poziția microparticulei (în sens clasic), deci  $\Delta x = 0$ , din relațiile de nedeterminare rezultă că  $\Delta p_x \rightarrow \infty$ , deci impulsul microparticulei ar fi complet nedeterminat, în sensul că am ști nimic despre valoarea posibilă a impulsului, imprecizia fiind oricât de mare. Acesta înseamnă că, în mecanica cuantică, datorită valabilității relațiilor de nedeterminare, noțiunea clasică de traiectorie nu are sens, adică nu putem vorbi în mecanica cuantică de o linie oarecare ce ar reprezenta urma drumului străbătut de particulă (traiectoria particulei).

Relațiile de nedeterminare sub forma precedentă (referitoare la perechea de variabile canonic conjugate coordonată-impuls), conduc la relațiile de nedeterminare în variabilele canonic conjugate energie-timp:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar, \quad \text{sau} \quad \Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (6.42)$$

Această nouă formă a relațiilor de nedeterminare arată că produsul dintre nedeterminarea de măsurare a energiei particulei  $\Delta E$

înmulțită cu intervalul de măsurare  $\Delta t$  este de ordinul de mărime al constantei lui Planck. Intervalul de timp  $\Delta t$  se interpretează uneori și ca timp de viață al microparticulei (timpul cât microparticula se situează pe un anumit nivel energetic).

Relațiile de nedeterminare trebuie privite în ideea că microparticulele au un caracter dual (corpular și ondulatoriu). Ele nu arată că este imposibil de determinat simultan coordonata și impulsul particulei (ceea ce ar fi însemnat că particula nu poate fi cunoscută în întregime), ci arată că este imposibil să determinăm cele două mărimi simultan și cu orice precizie dorită (ca în mecanica clasică). Precizia nu este determinată de posibilitățile tehnice limitate ale aparatului de măsurat, ci are caracter principial, fiind legată de existența constantei lui Planck. La limita  $h \rightarrow 0$ , s-ar ajunge la relația  $\Delta x \Delta p_x \rightarrow 0$ , adică la situația din mecanica clasică.

## 6.4 Ecuația lui Schrödinger

Deoarece mișcarea microparticulelor nu putea fi descrisă cu ajutorul ecuației lui Newton din mecanica clasică (am văzut că noțiunea clasică de traiectorie nu are sens în mecanica cuantică), se pune problema găsirii unei ecuații careia să i se supună mișcările microparticulelor. Aceasta este *ecuația lui Schrödinger*.

Schrödinger a asociat mișcării microparticulelor o funcție de coordonate și de timp, pe care a denumit-o *funcție de undă* sau *funcție de stare* (pentru că ea înglobează informațiile în legătură cu starea microparticulei). Ea este chiar funcția grupului de unde de Broglie:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\vec{k}) e^{-i[\omega(\vec{k})t - \vec{k} \cdot \vec{r}]} d\vec{k}. \quad (6.43)$$

Să găsim ecuația diferențială a cărei soluție ar fi chiar funcția de undă de mai sus. Ținând cont de relația:

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z, \quad (6.44)$$

iar pe de altă parte, de faptul că pulsația undei este legată de energia totală a particulei (energia cinetică plus energia potențială  $U$ ), care este o mărime constantă (se conservă):

$$\omega(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} E(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + U(\vec{r}) \right], \quad (6.45)$$

putem deriva funcția de undă a grupului de unde o dată în raport cu timpul, apoi, separat, de două ori în raport cu fiecare variabilă spațială.

După calcule elementare, vom ajunge la următoarea relație între derivatele parțiale ale funcției de undă:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t). \quad (6.46)$$

Această relație este tocmai *ecuația temporală a lui Schrödinger*, care este ecuația fundamentală a mecanicii cuantice nerelativiste.

Observație: În general un operator  $A$  indică o operație matematică (adunare, înmulțire, derivare, integrare etc.), prin care o funcție oarecare  $f$  se pune în corespondență cu o altă funcție  $g$ . Acest fapt se scrie astfel:  $Af = g$  și se citește: operatorul  $A$  aplicat funcției  $f$  este egal cu funcția  $g$ . Evident că operatorul în sine nu are sens, ci numai dacă este aplicat unei funcții.

Se observă că în ecuația lui Schrödinger apar doi operatori: unul de derivare parțială în raport cu variabila temporală, precum și operatorul lui Laplace  $\Delta$ , care are următoarea semnificație:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} , \quad (6.47)$$

adică este egal cu suma derivatelor parțiale de ordinul doi ale funcției de undă, după toate cele trei variabile spațiale.

Dacă energia potențială a particulei (sau, în general, a sistemului cuantic) nu depinde explicit de timp, atunci funcția de undă se poate scrie ca un produs de două funcții care depind separat de timp, respectiv de variabilele spațiale. Se demonstrează ușor că în acest caz avem de a face, din punct de vedere matematic, cu o ecuație cu variabile separabile, iar partea de dependență temporală va fi întotdeauna de tip armonic, adică:

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \Psi(\vec{r}) . \quad (6.48)$$

Dacă înlocuim această expresie în ecuația temporală a lui Schrödinger și efectuăm operațiile corespunzătoare, vom obține tocmai *ecuația atemporală a lui Schrödinger* sau *ecuația lui Schrödinger a stărilor staționare*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) , \quad (6.49)$$

unde  $m$  este masa particulei, iar  $E$  este energia sa totală.

Ecuația lui Schrödinger, sub ambele forme prezentate, este o ecuație diferențială de ordinul doi cu derivate parțiale. Rezolvarea ei ține cont de condițiile inițiale și la limită și conduce la găsirea soluției, adică a expresiei concrete a funcției de undă (sau, cum se mai numește, a funcției de stare)  $\Psi$ , corespunzătoare problemei examinate.

În fiecare stare a sistemului cuantic, o mărime fizică oarecare  $A$ , ce caracterizează sistemul, mărime numită *observabilă*, are o anumită valoare. Aceste stări în care mărimea observabilă are o anumită valoare, se numesc *stări proprii* ale observabilei  $A$ , iar valoarea  $a$  pe care o are observabila se numește *valoare proprie*. Funcția de stare se numește *stare proprie* și se notează cu  $\Psi_a$ . Ea este o soluție a unei ecuații de forma următoare, numită *ecuația valorilor proprii* sau *ecuația de valori proprii*:

$$A \Psi_a = a \Psi_a . \quad (6.50)$$

Dintre toate funcțiile matematice care satisfac ecuația valorilor proprii, nu toate au sens fizic, adică nu toate pot fi funcții de stare, ci numai acele funcții  $\Psi$  care satisfac condițiile standard:

1. să fie univoce (în fiecare punct să aibă o singură valoare);
2. să fie funcții continue și să aibă derivate continue;
3. să fie funcții mărginite, iar la infinit să se anuleze;

4. să fie funcții de pătrat integrabil.

De aceea parametrul  $a$  din ecuația de valori proprii nu poate avea orice valoare, ci numai anumite valori, numite valori proprii. Fiecărei valori proprii îi corespunde una sau mai multe funcții proprii, deci una sau mai multe stări ale sistemului.

Dacă unei singure valori proprii îi corespunde o singură funcție proprie, starea se numește nedegenerată, iar dacă unei singure valori proprii îi corespund mai multe funcții proprii, aceste stări se numesc stări degenerate, iar numărul lor se numește multiplicitate sau grad de degenerare.

În mecanica cuantică este valabil *principiul de corespondență*, conform căruia, fiecărei mărimi observabile  $A$  din mecanica clasică îi corespunde în mecanica cuantică un operator care satisface o ecuație de valori proprii de tipul indicat mai sus.

Observăm că și ecuația lui Schrödinger a stărilor staționare poate fi scrisă sub forma unei ecuații de valori proprii:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad , \quad (6.51)$$

unde în membrul stâng al ecuației apare *operatorul energiei totale* sau *operatorul lui Hamilton* sau *operatorul hamiltonian*, notat cu  $H$ :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \quad , \quad (6.52)$$

primul termen reprezentând *operatorul energiei cinetice*:

$$E_c = \frac{1}{2m} p^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla)(-i\hbar \nabla) \quad , \quad (6.53)$$

iar cel de al doilea este *operatorul energiei potențiale*:

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r}) \quad . \quad (6.54)$$

Acesta din urmă coincide cu însăși energia potențială, deci acțiunea lui asupra funcției de undă reprezintă o simplă înmulțire. Energia potențială depinzând numai de variabila vectorul de poziție, este lesne de tras concluzia că operatorul coordonată este egal cu el însuși, deci tot un operator de înmulțire. Din modul cum am scris expresia operatorului energiei cinetice se poate observa că operatorul impuls se exprimă în funcție de operatorul vectorial  $\nabla$  (nabla):

$$\vec{p} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left( \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad . \quad (6.55)$$

În felul acesta, apelând la conținutul principiului de corespondență, se pot deduce operatorii tuturor mărimilor observabile ce caracterizează sistemul cuantic examinat.

Produsul scalar a două funcții de stare, notat  $(\Psi_1, \Psi_2)$  este un număr egal cu integrala de mai jos:

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(\vec{r}) \Psi_2(\vec{r}) d\vec{r} \quad , \quad (6.56)$$

unde simbolul \* reprezintă operația de conjugare complexă, adică înlocuirea unității imaginare  $i$  cu  $-i$ , iar integrala de volum se face peste tot spațiul variabilelor spațiale.

Ținând cont de această definiție, să punctăm și o proprietate importantă a operatorilor cuantici: ei trebuie să fie *operatori autoadjuncți* sau *operatori hermitici*, adică trebuie să satisfacă următoarea relație referitoare la produsul scalar:

$$(\Psi_1, A\Psi_2) = (A\Psi_1, \Psi_2), \quad (6.57)$$

relație în care în primul produs scalar operatorul acționează numai asupra funcției notată cu indicele 2, iar în cel de al doilea produs scalar operatorul acționează numai asupra funcției notată cu indicele 1.

### 6.5 Semnificația fizică a funcției de undă

Pătratul modulului funcției de undă reprezintă densitatea de probabilitate  $\rho(\vec{r}, t)$  de a găsi particula la un moment oarecare de timp  $t$  în domeniul delimitat de coordonatele  $(x, x + dx)$ ,  $(y, y + dy)$ ,  $(z, z + dz)$ , adică în volumul elementar (infinitesimal)  $dV = dx dy dz$ :

$$\frac{dP}{dV} \equiv \rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi(\vec{r})|^2 \equiv \rho(\vec{r}). \quad (6.58)$$

Condiția de normare a probabilităților va conduce la condiția de normare a densității de probabilitate:

$$\int_0^1 dP = \int_D \rho(\vec{r}) dV = 1. \quad (6.59)$$

Deci, funcția de undă sau funcția de stare nu are o interpretare fizică nemijlocită, ci sens fizic are doar pătratul modulului acesteia. Din sensul fizic al funcției de undă rezultă că mecanica cuantică are un *caracter statistic*. Ea nu permite să se determine locul exact din spațiu în care se găsește o microparticulă sau traiectoria ei. Cu ajutorul funcției de undă se poate doar prevedea cu ce probabilitate se poate găsi microparticula în diferite puncte (regiuni) ale spațiului.

Având în vedere caracterul statistic al mecanicii cuantice, dacă asupra unei observabile  $A$  se efectuează mai multe măsurători, obținându-se valoarea  $a$ , cu o densitate de probabilitate  $\rho$ , atunci valoarea medie de apariție a acestui rezultat este dată de integrala (vezi capitolul de fizică statistică):

$$\langle a \rangle = \int_D a \rho(\vec{r}) dV = \int_D \Psi^*(\vec{r}) a \Psi(\vec{r}) dV. \quad (6.60)$$

Ținând cont de ecuația de valori proprii, această relație se mai poate scrie ca și cum am înlocui, formal, valoarea proprie  $a$  cu operatorul  $A$  asociat observabilei respective:

$$\langle A \rangle = \int_D \Psi^*(\vec{r}) A \Psi(\vec{r}) dV. \quad (6.61)$$

Relația de mai sus reprezintă valoarea medie a unui operator în starea  $\Psi$ . Se observă că putem identifica valoarea medie a operatorului într-o stare cu valoarea medie a măsurătorilor în acea stare și care reprezintă chiar valoarea proprie a operatorului în acea stare:

$$\langle A \rangle = \langle a \rangle = a. \quad (6.62)$$

Valorile medii, fiind valori măsurabile, sunt valori reale, deci:

$$a = a^*, \quad \text{de unde rezultă: } \langle A \rangle = \langle A \rangle^*. \quad (6.63)$$

Această condiție este îndeplinită numai de operatorii hermitici și de aceea este nevoie ca operatorii cuantici să fie operatori hermitici, iar funcția de stare  $\Psi$  în care se face măsurătoarea să fie neapărat o funcție proprie a operatorului  $A$ .

Dacă funcția de stare în care se face măsurătoarea, notată cu  $\Phi$ , nu este o funcție proprie a operatorului  $A$ , atunci sigur nu se va obține, drept rezultat al măsurătorii, valoarea proprie  $a$ , ci o altă valoare. Aceasta este cu atât mai "depărtată" de valoarea  $a$ , cu cât este mai "depărtată" funcția  $\Phi$  de funcția  $\Psi$ . Ca o măsură a acestei deosebiri se utilizează incertitudinea sau nedeterminarea mărimii  $A$ , definită ca rădăcina pătrată din abaterea pătratică medie:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} . \quad (6.64)$$

Funcțiile proprii ale operatorilor hermitici trebuie să fie funcții ortogonale, adică produsul lor scalar să fie egal cu zero.

Aceasta înseamnă că putem scrie relația de ortonormare:

$$\int_D \Psi_n^*(\vec{r}) \Psi_m(\vec{r}) dV = \delta_{nm} , \quad (6.65)$$

unde  $\delta_{nm}$  este simbolul lui Kronecker, ale cărui valori sunt următoarele: dacă  $n = m$ , atunci  $\delta_{nm} = 1$  și avem relația de normare, iar dacă  $n \neq m$ , atunci  $\delta_{nm} = 0$  și avem relația de ortogonalitate.

## 6.6 Aplicații simple ale ecuației lui Schrödinger

Ecuația lui Schrödinger este implicată în numeroase fenomene cuantice, dintre care vom examina câteva. Pentru ușurința calculului vom considera doar problema unidimensională, deci funcția de undă va depinde doar de variabila  $x$ , iar operatorul lui Laplace  $\Delta$  se va reduce la derivata a doua în raport cu  $x$ .

a. Groapa de potențial de adâncime infinită. Prin acest concept se înțelege o distribuție de potențial de forma (fig. 6.3):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, l] \\ \infty, & x \in (-\infty, 0) \cup (l, +\infty) \end{cases} . \quad (6.66)$$

Să examinăm comportarea unei microparticule de masă  $m$ , care se găsește în interiorul gropii. Deci funcțiile de undă din exteriorul gropii vor fi zero, adică  $\Psi_1(x) = \Psi_3(x) = 0$ , iar  $\Psi_2(x) \equiv \Psi(x) \neq 0$ .

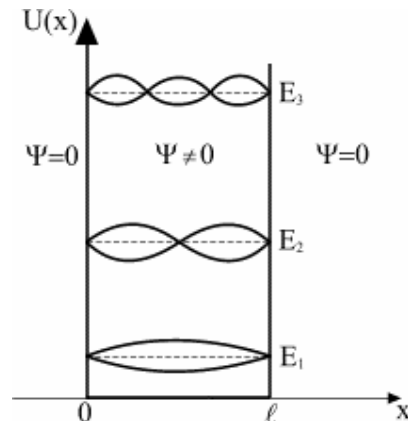


Fig. 6.3

Ecuția lui Schrödinger a stărilor staționare, pentru particula aflată în groapa de potențial este:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0 \quad . \quad (6.67)$$

Mărimea din fața funcției de undă are dimensiunile pătratului modulului vectorului de undă și de aceea o vom nota cu  $k^2$ :

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad . \quad (6.68)$$

Se verifică prin calcul direct, că soluția ei generală este:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad . \quad (6.69)$$

Din punct de vedere fizic, această soluție generală este o suprapunere de două unde armonice plane au același modul al vectorului de undă (au aceeași pulsație): una de amplitudine  $A$ , care se deplasează în sensul pozitiv al axei  $x$  (unda directă) și cealaltă, de amplitudine  $B$ , care se deplasează în sensul negativ al axei  $x$  (unda reflectată).

Condiția de continuitate în punctul  $x = 0$  (peretele din stânga):

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) = 0 \quad , \quad \text{conduce la: } A = -B \quad , \quad (6.70)$$

ceea ce face ca expresia funcției de undă să devină:

$$\Psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin kx \quad , \quad (6.71)$$

unde am ținut cont de formulele lui Euler referitoare la exprimarea funcțiilor trigonometrice prin exponențiale complexe.

Condiția de continuitate la peretele din dreapta, situat în punctul  $x = l$  conduce la relația:

$$\Psi(l) = \Psi_3(l) = 0 \quad , \quad \text{de unde se obține: } 2iA \sin kl = 0 \quad . \quad (6.72)$$

Deoarece amplitudinea  $A$  a undei directe trebuie să fie diferită de zero, rezultă următoarea condiție:

$$\sin kl = 0 \quad , \quad \text{de unde: } k = \frac{n\pi}{l} \quad , \quad (6.73)$$

unde  $n = 0, 1, 2, \dots$  este un număr întreg. Deci modulul vectorului de undă nu poate lua orice valoare, ci numai anumite valori specificate de numărul întreg  $n$ . De aceea, pentru a deosebi diferitele funcții de undă, corespunzătoare diferitelor valori ale numărului întreg  $n$ , îi vom atașa acesteia indicele  $n$ . Deci funcțiile de undă vor fi:

$$\Psi(x) = \Psi_n(x) = 2iA \sin \frac{n\pi}{l} x \quad . \quad (6.74)$$

Valoarea constantei  $A$  se găsește din condiția de normare:

$$\int_0^l \Psi_n^*(x) \Psi_n(x) dx = 1 \quad , \quad (6.75)$$

astfel că expresia finală a funcției de undă va fi:

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{2}{l}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n\pi}{l} x \quad . \quad (6.76)$$

Ea reprezintă o undă staționară (o undă a cărei amplitudine este exprimată printr-o funcție periodică de variabila spațială  $x$ ), care are un număr de  $n + 1$  noduri (puncte unde amplitudinea este egală cu zero),

dintre care două noduri la pereții gropii și restul în interior și are un număr de  $n - 1$  ventre (puncte unde amplitudinea este maximă).

Modulul vectorului de undă, fiind legat de energia totală a microparticulei:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E = \left( \frac{n\pi}{l} \right)^2, \text{ rezultă: } E_n = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi\hbar}{l} \right)^2 n^2. \quad (6.77)$$

Ultima relație arată că energia microparticulei aflate într-o groapă de potențial infinit de adâncă nu poate lua orice valoare, ci numai anumite valori discontinue sau discrete, care depind de numărul întreg  $n$ . Se spune că energia microparticulei aflate în interiorul gropii de potențial infinit de adânci este *cuantificată*, iar numărul întreg  $n$ , care cuantifică energia, se numește *număr cuantic principal*.

Spectrul energetic nu este, deci, în acest caz, un spectru continuu, ci un *spectru discontinuu* sau un *spectru discret*. Nivelele energetice nu sunt echidistante, ci distanța dintre ele crește aproximativ proporțional cu numărul cuantic principal  $n$ :

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi\hbar}{l} \right)^2 (2n+1) \cong 10^{-39} \left( n + \frac{1}{2} \right) \text{ J.} \quad (6.78)$$

Ultimul calcul numeric l-am făcut pentru masa  $m$  a unei microparticule de ordinul de mărime al masei unei molecule ( $\sim 10^{-26}$  kg), iar lărgimea gropii  $l$  de ordinul de mărime al unui vas obișnuit ( $\sim 0,1$  m). Se observă că distanța  $\Delta E_n$  dintre două nivele energetice vecine, exprimată în J, este extrem de mică, cu mult mai mică decât eroarea de măsurare a energiei cu ajutorul celor mai pretențioase aparate. Ori, pentru a putea fi evidențiată cuantificarea energiei, deci pentru a putea distinge două nivele energetice vecine, trebuie ca diferența dintre două nivele energetice vecine să fie cel puțin de același ordin de mărime ca și eroarea de măsură a aparatului de măsură. Nivelele energetice sunt foarte apropiate, ele sunt practic percepute ca o distribuție continuă de energie. De aceea, chiar dacă cuantificarea energiei în principiu are loc și la nivel microscopic, ea nu are influență asupra mișcării unei particule macroscopice. Deci, cu atât mai mult, pentru corpurile macroscopice cuantificarea energiei nu se poate observa.

b. Barierea de potențial de lărgime și înălțime finită este o distribuție de potențial de forma (fig. 6.4):

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \in [0, l] \\ 0, & x \in (-\infty, 0) \cup (l, +\infty) \end{cases} \quad (6.79)$$

Să considerăm că o microparticulă de masă  $m$  se mișcă în sensul pozitiv al axei  $Ox$ , venind din regiunea I, situată în partea stângă. Din punctul de vedere al mecanicii clasice, dacă energia totală  $E$  a microparticulei este mai mică decât înălțimea  $U_0$  a barierei de potențial, particula nu poate pătrunde în interiorul barierei de potențial (regiunea II), ci suferă fenomenul de reflexie totală la peretele din stânga a barierei, situat în punctul  $x = 0$ .

Din punctul de vedere al mecanicii cuantice, există o probabilitate diferită de zero ca microparticula, deși are energia mai mică decât înălțimea barierei, adică  $E < U_0$ , să traverseze bariera de potențial și să ajungă în regiunea III, dincolo de peretele din dreapta,



situat în punctul de coordonată  $x = l$ . Acest fenomen de traversare a barierei de potențial se numește efectul tunel și a fost descoperit în 1928 de George Gamow. Ecuațiile lui Schrödinger pentru regiunile I și III, unde potențialul este zero, respectiv regiunea II unde este situată bariera de potențial, sunt:

$$\frac{d^2\Psi_{1,3}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_{1,3} = 0, \quad (6.80)$$

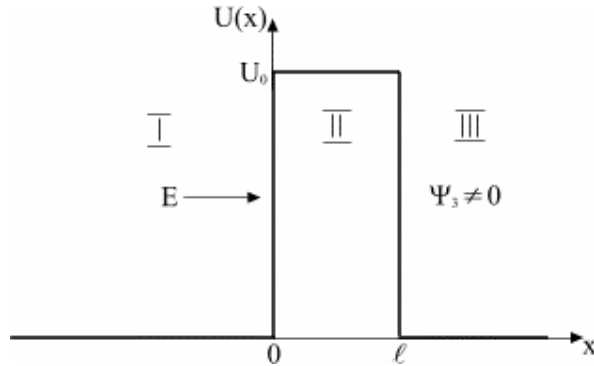


Fig. 6.4

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\Psi_2 = 0. \quad (6.81)$$

Utilizând notațiile consacrate pentru cazul de interes practic, când energia microparticulei este mai mică decât înălțimea barierei, atunci mărimea  $k_2$  este imaginară, iar partea ei reală se notează cu  $\kappa_2$ :

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \quad ; \quad i k_2 = \kappa_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}, \quad (6.82)$$

astfel că soluțiile generale ale acestor ecuații vor fi:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= \Psi_{1d}(x) + \Psi_{1r}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \\ \Psi_2(x) &= \Psi_{2t}(x) + \Psi_{2r}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \end{aligned} \quad (6.83)$$

$$\Psi_3(x) = \Psi_{3t}(x) = A_3 e^{ik_1 x},$$

în care indicii 1, 2 și 3 se referă la regiunea respectivă de potențial, iar  $d$  se referă la unda directă (incidentă),  $r$  – la unda reflectată, iar  $t$  – unda transmisă (refractată).

Să scriem condițiile de continuitate în punctele  $x = 0$  și  $x = l$  ale funcțiilor de undă și ale derivatelor acestora:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \quad ; \quad \Psi_2(l) = \Psi_3(l), \quad (6.84)$$

$$\left(\frac{d\Psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\Psi_2}{dx}\right)_{x=0} \quad ; \quad \left(\frac{d\Psi_2}{dx}\right)_{x=l} = \left(\frac{d\Psi_3}{dx}\right)_{x=l}. \quad (6.85)$$

Acestea conduc la următorul sistem de ecuații algebrice:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ A_2 e^{\kappa_2 l} + B_2 e^{-\kappa_2 l} = A_3 e^{ik_1 l}, \\ ik_1(A_1 - B_1) = \kappa_2(A_2 - B_2), \\ \kappa_2(A_2 e^{\kappa_2 l} - B_2 e^{-\kappa_2 l}) = ik_1 A_3 e^{ik_1 l} \end{cases} \quad (6.86)$$

În acest sistem algebric de 4 ecuații, amplitudinea  $A_1$  a unei directe (incidente) este o mărime cunoscută, iar cele 4 amplitudini necunoscute sunt:  $B_1$  – amplitudinea unei reflectate de peretele din stânga al barierei;  $A_2$  – amplitudinea unei transmise în regiunea barierei de potențial;  $B_2$  – amplitudinea unei reflectate de peretele din dreapta al barierei și  $A_3$  – amplitudinea unei transmise în regiunea III, dincolo de bariera de potențial. Sistemul este compatibil, însă, pentru studiul efectului tunel ne interesează să exprimăm doar raportul dintre amplitudinea unei transmise în mediul III și amplitudinea unei incidente:

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4ik_1\kappa_2 e^{-ik_1 l}}{(\kappa_2 + ik_1)^2 e^{-\kappa_2 l} - (\kappa_2 - ik_1)^2 e^{\kappa_2 l}}. \quad (6.87)$$

O mărime caracteristică pentru descrierea efectului tunel este transparența barierei de potențial, definită ca modulul raportului dintre densitatea superficială a curentului de probabilitate transmis în regiunea a III-a și densitatea superficială a curentului de probabilitate incident:

$$D = \left| \frac{\vec{j}_{3t}}{\vec{j}_{1d}} \right| = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \left( \frac{A_3}{A_1} \right) \left( \frac{A_3}{A_1} \right)^*, \quad (6.88)$$

relație în care am indicat că este necesară și conjugarea complexă a raportului amplitudinilor.

În practică, efectul tunel se produce dacă este realizată condiția  $2\kappa_2 l \gg 1$ , caz în care exponențiala cu acest exponent este cu mult mai mare decât 1 și acesta poate fi neglijat. Condiția de mai sus nu este artificial impusă, ci ea este legată de relațiile de nedeterminare coordonată - impuls. Consecința directă a valabilității ei este o simplificare considerabilă a expresiei transparenței barierei de potențial:

$$D = \frac{16k_1^2 \kappa_2^2}{(\kappa_2^2 + k_1^2)^2} e^{-2\kappa_2 l} \equiv D_0 e^{-2\kappa_2 l}. \quad (6.89)$$

Se observă, deci, că transparența barierei scade exponențial cu lățimea acesteia și, bineînțeles, cu energia microparticulei.

Expresia de mai sus a transparenței barierei poate fi generalizată și pentru o barieră de o formă oarecare, descrisă de funcția energiei potențiale de forma generală,  $U = U(x)$ , definită pe domeniul  $[x_1, x_2]$ . După calcule similare, se ajunge la formula integrală:

$$D = D_0 \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right]. \quad (6.90)$$

Cu ajutorul efectului tunel pot fi explicate o serie de fenomene cum ar fi: emisia la rece a electronilor din metale, dezintegrearea  $\alpha$ , reacțiile termonucleare etc.

c. Oscilatorul armonic liniar cuantic. Dacă o microparticulă cuantică de masă  $m$  se mișcă într-o groapă de potențial de formă parabolică, cu pereți impenetrabili, definită de funcția (fig. 6.5):

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2, \quad (6.91)$$

se spune că avem de a face cu un *oscilator armonic liniar cuantic*. Ecuația lui Schrödinger corespunzătoare este:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \Psi(x) = 0. \quad (6.92)$$

Rezolvarea acestei ecuații presupune un calcul mai lung pe care nu-l vom reproduce aici, ci vom indica doar concluziile care rezultă.

Funcțiile proprii ale operatorului Hamiltonian, adică funcțiile de stare ale oscilatorului liniar armonic cuantic sunt:

$$\Psi_n(x) = \left( \frac{1}{2^n n!} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} H_n(\sqrt{\alpha}x), \quad (6.93)$$

unde am notat:  $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ , iar  $H_n$  sunt polinoamele lui Hermite.

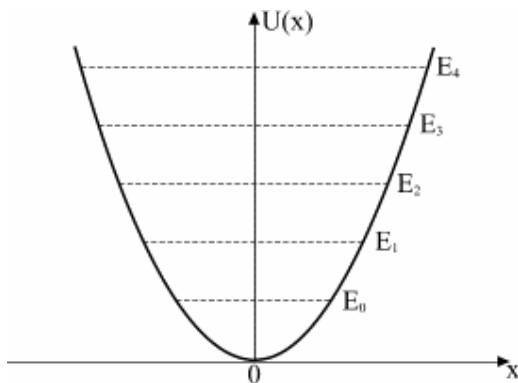


Fig. 6.5

În teoria ecuațiilor diferențiale se demonstrează că o astfel de ecuație are soluții finite, continue și univoce doar dacă energia  $E$  ia următoarele valori:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{cu } n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.94)$$

Din punct de vedere fizic, aceasta este tocmai condiția de cuantificare a energiei oscilatorului, iar  $n$  este numărul cuantic principal. Se observă că nivelele de energie ale oscilatorului armonic cuantic liniar sunt echidistante, iar pentru  $n = 0$  se obține cea mai mică valoare a energiei acestuia, adică,  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ , numită energie de zero. Existența energiei de zero este confirmată experimental de studiul difracției luminii pe cristale la temperaturi joase. Se demonstrează că, pe măsură ce temperatura scade, intensitatea luminii difuzate nu tinde către zero, ci către o valoare finită, indicând faptul că,

în apropiere de temperatura de zero absolut, oscilațiile atomilor din rețea nu se opresc, ci tind către o anumită valoare.

Pe de altă parte, expresia de mai sus a energiei oscilatorului cuantic permite o verificare a relației de nedeterminare energie – timp. Deoarece numărul cuantic principal este un număr pozitiv:

$$n = \frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \geq 0, \text{ de unde: } E_n \cdot \frac{1}{\omega} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (6.95)$$

Chiar dacă luăm situația cea mai defavorabilă din punct de vedere al informației asupra stării energetice a oscilatorului, în care eroarea (nedeterminarea) de măsurare a energiei  $\Delta E$  este de același ordin de mărime cu valoarea însăși a energiei,  $E_n$ , iar durata de măsurare a energiei  $\Delta t$  este chiar inversul pulsației oscilatorului  $\omega$ , ultima relație ne conduce la relația de nedeterminare energie – timp:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (6.96)$$

Să subliniem faptul că, deși oscilațiile sistemelor reale sunt oscilații anarmonice, modelul oscilatorului armonic cuantic liniar este deosebit de util și din punct de vedere practic, știut fiind că, pentru distanțe mici din apropierea poziției de echilibru, oscilațiile anarmonice pot fi aproximare prin oscilații armonice.

***Întrebări pentru verificarea însușirii cunoștințelor și pentru evaluare:***

1. Care sunt bazele experimentale ale mecanicii cuantice ?
2. Ce semnifică dualismul undă-corpusul ?
3. Care este esența relațiilor de nedeterminare coordonată-impuls și energie-timp ?
4. Care este semnificația fizică a funcției de undă ?
5. Care este semnificația fizică a funcției de distribuție din mecanica cuantică?
6. Ce este fenomenul de cuantificare și în care din aplicațiile ecuației lui Schrödinger l-ați întâlnit?
7. De ce nu se observă fenomenul de cuantificare și în cazul corpurilor macroscopice ?
8. Cum sunt nivelele de energie ale oscilatorului armonic cuantic și ce semnificație fizică are energia de zero ?
9. În ce constă efectul tunel și care este mărimea caracteristică a acestuia ?
10. Care sunt condițiile standard pe care trebuie să le satisfacă funcția de undă ?