

INTROAUCERE IN FIZICA CUANTICĂ

1 Limitari ale fizicii clasice și ipoteze istorice

La sfârșitul sec. XIX fizica se considera a fi o știință completă care putea să explice în integralitate realitatea înconjurătoare. Edificiile sale au fost puse în timp începând cu mecanica clasică (Newton, sec. XVII) completată de teoria relativității (Einstein 1900). Odată cu dezvoltarea teoriei câmpului electromagnetic de către J.C. Maxwell se închide și una dintre întrebările care au frământat omenirea în timp și anume: ce este lumina? Conform teoriei lui Maxwell, lumina este o undă electromagnetică ce se propagă în vid cu viteza $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

La sfârșitul secolului XIX, realitatea înconjurătoare are două componente fundamentale complet separate:

- materia
- radiația

a) Materia este formată din particule localizate pentru care se poate defini în mod absolut determinat și preciz conform dinamicii clasice:

Poziția $\vec{r}(t)$

Viteza $\vec{v}(t)$, accelerația $\vec{a}(t)$

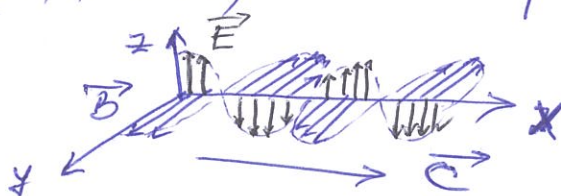
Legea de mișcare

Energia, impulsul, momentul cinetic, ...

Mișcarea se efectuează sub acțiunea unei forțe:

$$\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}} = -\text{grad } V(\vec{r}) = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}$$

b) Radiația electromagnetică descrisă de un cuplu vectorial $(\vec{E}(t), \vec{B}(t))$ care se propagă cu viteza $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$



Ecuațiile lui Maxwell corelează materia și radiația: sarcina electrică = particula încărcată electric produce un câmp electric

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{A} = \frac{Q}{\epsilon_0}$$

În acest context, energia era considerată ca și (CLASIC) o cantitate care poate fi variată continuu prin modificarea vitezei particulei (energie cinetică) sau a intensității câmpului electromagnetic.

Totuși, spre sfârșitul secolului XIX o serie de experimente efectuate conduc la niste rezultate care nu mai pot fi explicate de către fizica clasică. Este vorba despre:

a) Radiația corpului negru = radiație electromagnetică emisă de către orice corp la temperatura finită. Forma spectrului măsurat Energie = f (lungime de undă) nu poate fi explicată clasic

b) Efectul fotoelectric = emisia de electroni de către metale iluminate, Fizica clasică nu poate explica de ce acest efect nu se produce doar dacă frecvența radiației electromagnetice folosite este mai mare decât o valoare de prag

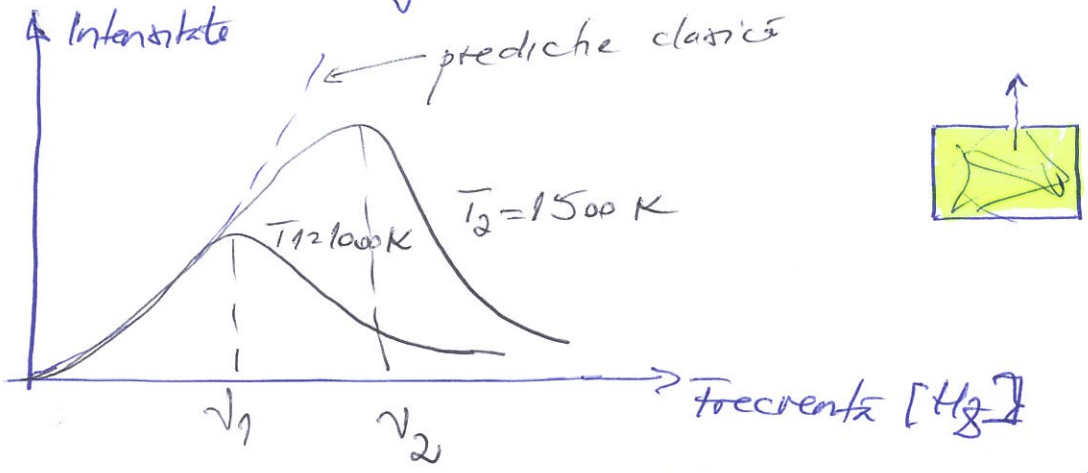
c) Stabilitatea atomilor - conform teoriei clasice a lui Maxwell orice particula încărcată, în mișcare accelerată emite radiație electromagnetică. Astfel, electronii din atomii care se mișcă pe traiectorii circulare sub influența accelerației centripete ar trebui să emită radiație electromag. și treptat să piardă energie "căzând" în cele din urmă pe nucleu.

Incercand sa se raspunda problemelor sus-mentionate, printr-o serie de ipoteze istorice, o reuita de fizicieni: Planck, Einstein, Bohr pun rand pe rand bazele unei noi ramuri a fizicii si anume mecanica cuantica. Dezvoltarea acestora s-a facut in mod impresionant intre 1900-1930 prin contributia succesiva a mai multor fizicieni de exceptie care au avut descoperiri majore:

- 1900 Planck (Nobel 1919) radiatia corpului negru si cuante de energie
- 1905 Einstein (Nobel 1921) efectul fotoelectric si cuante de energie
- 1913 Bohr (Nobel 1922) : cuantificarea momentului cinetic
Sommerfeld
- 1916 Millikan (Nobel 1923) : demonstrarea experimentala a teoriei lui Einstein pentru efectul fotoelectric
- 1922 Stern & Gerlach : demonstrarea experimentala a cuantificarii momentului cinetic. Momentul cinetic de spin.
- 1924 de Broglie (Nobel 1929) : dualismul unda-corpusul ; particulele se comporta ca unde
- 1925 Davison & Germer - demonstrarea caracterului undulatoriu al electronilor.
- 1926 Schrödinger (Nobel 1933) - ecuatia undelor pentru particule
Max Born (1954 Nobel) - functie de unda si probabilitate
- 1927 Uhlenbeck & Goudsmith - ipoteza spinului
Heisenberg (Nobel 1932) - principiul de incertitudine
- 1930 Dirac (Nobel 1933), Pauli (Nobel 1945) - postulatele noi mecanici cuantice, mecanica cuantica relativista.

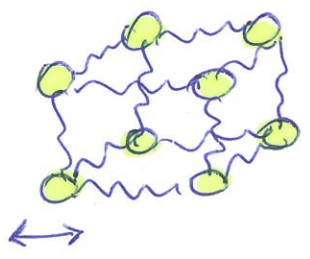
a) Radiatia corpului neagra

Experimentul este bazat pe observatia conform careia orice corp la o temperatura T emite radiatie. Experimentul consta in incalzirea unei cavitati inchise cu o gaura mica prin care se permite emisia radiatiei sale, a priori, are toate frecventele si lungimile de unda posibile. Rezultatul experimentului este schematizat mai jos:



Experimental se observe ca intensitatea emisa creste cu frecventa, are un maxim si apoi descreste. Maximul este deplasat spre frecvente mai mari daca temperatura T a cavitatii creste. Descresterea $I(\nu)$ la frecvente mari (spe UV) este in contradictie cu predictia clasica si poarta numele de catastrofa UV.

Cum explica fizica clasica (teoria Maxwell) emisia radiatiei? Materia este constituita din atomi fixati in nodurile retelelor cristaline care la o temperatura finita vibreaza in jurul pozitiei de echilibru cu o amplitudine proportionala cu temperatura.



Fiecare atom este deci un oscilator armonic a carei vibratie clasica poate avea o infinitate de moduri.

Atomii contin electroni (particule incarcate) care sub influenta miscarii oscilatorii accelerate vor emite conform teoriei lui Maxwell radiatie electromagn.

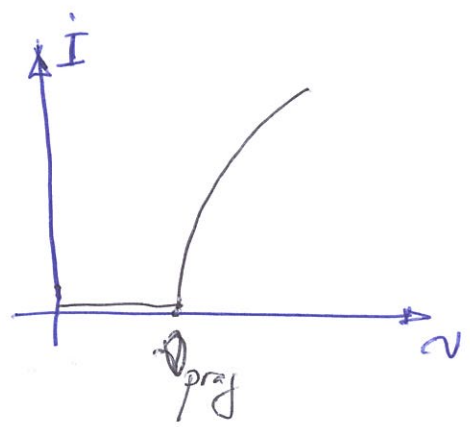
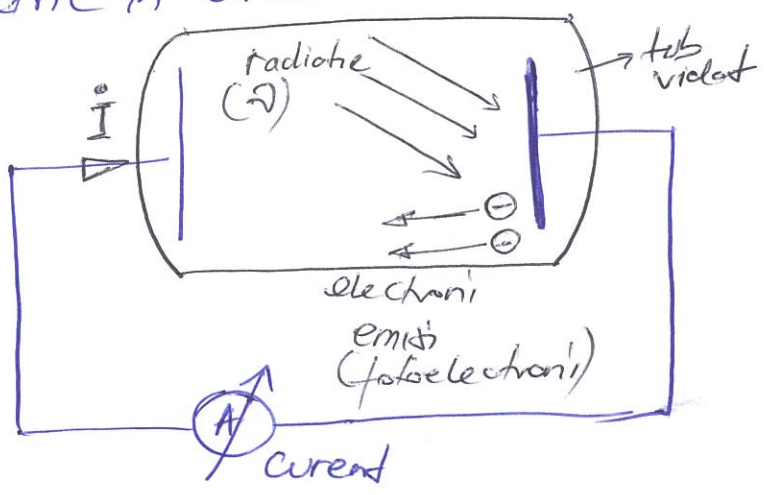
Un calcul clasic al densitatii spectrale a radiatiei care descrie energia radiata pe unitatea de volum pentru o frecventa ν conduce la;

$$U_{\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^2} k_B T$$

care descrie satisfăcător doar zona de frecvențe mici însă nu poate explica motivul și descrescerea observată experimental la frecvențe mai mari

b) Efectul fotoelectric

La iluminarea unei suprafețe metalice plasată în vid cu o radiație electromagnetică de frecvență ν se observă emisia de electroni prin apariția unui curent electric în circuit doar dacă $\nu > \nu_{min}$



Clasic, se putea înțelege că electronii ar putea fi smulși din metal prin absorbția energiei radiației electromagnetice sub influența compului electric $\vec{E}(t)$ al undei.

Surprinzător însă s-a observat că nu intensitatea radiației este factorul principal (după cum se aștepta) ci frecvența acesteia. Sub o valoare minimă de prag, indiferent cât timp om aștepta să absorbiți energia necesară, efectul nu se produce.

În plus, pentru frecvențe peste valoarea de prag, se poate mășura energia cinetică a foto-electronilor aplicând o tensiune inversă între plăci electronii pot fi integral fronați $\Rightarrow I \rightarrow 0$ când $E_c = \frac{m\nu^2}{2} = eU_p$

Clasic ne-am aștepta ca E_c să crească odată cu creșterea intensității radiației incidente la o frecvență ν fixă. Experimental nu

Se observă acest lucru: odată cu creșterea intensității numărul electronilor emiși crește însă energia lor cinetică rămâne constantă!

c) Stabilitatea atomilor și spectre de emisie

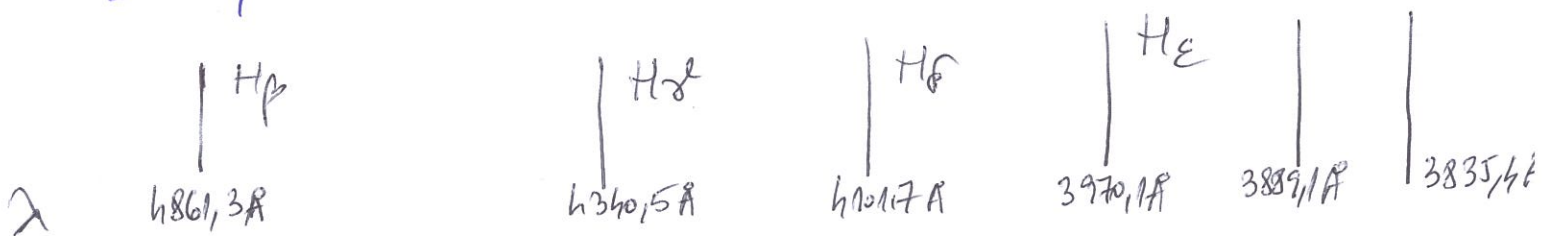
La sfârșitul secolului XIX exista un model atomic care reușea să explice o serie de proprietăți fizice și chimice. Acest model era bazat pe existența electronului (J.J. Thomson 1897) care se presupunea că se învârtete în jurul nucleului pozitiv electrostatic (model planetar).

Acest model confruntat însă cu teoria lui Maxwell pune o problemă fundamentală: electronul încercat electrostatic sub influența accelerației centripete ar trebui să emită continuu radiație pierzând energie până la căderea sa pe nucleu.

În plus, clasic, electronul ar putea avea un număr mare de orbite posibile ceea ce ar putea calitativ explica emisia unor spectre de radiație presupunând că la trecerea de pe o orbită pe alta electronul emite radiație. Totuși nici în acest cadru nu se poate explica forma discretă a spectrelor de emisie observate experimental: emisia are loc doar la anumite frecvențe precise.

lungimi de undă

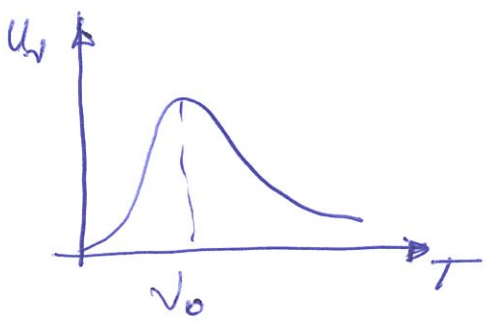
ex: Spectrul de emisie al hidrogenului



a) Ipoteza lui Planck a cuantelor

Max Planck a derulat intense cercetări în domeniul studiului radiației corpului negru. (încercând să optimizeze și intensitatea luminoasă emisă de becuri...).

Prin măsurători extrem de precise (efectuate de către alți cercetători) Planck găsește o formula exactă care descrie perfect curba experimentală $U_{\nu}(\nu)$ pentru radiația emisă de un corp la temperatura T .



$$U_{\nu}(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

cu $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
(const. lui Planck)

Planck deduce această formulă făcând o ipoteză radicală. Un oscilator armonic nu poate emite sau absorbi energie decât în cuante (cantități discrete finite) proporționale cu frecvența sa de vibrație:

$$\Delta E = h\nu$$

Astfel, nivelele sale de energie sunt discrete:
(cuantificate):

$$E_n = n h\nu \quad n = 1, 2, \dots$$

în mod paradoxal oscilatorul nu va avea toate valorile posibile de energie după cum ar fi prezis mecanica clasică.

Un calcul statistic ne permite să arătăm că energia medie a unui astfel de oscilator este:

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Astfel, Planck pune o primă piatră la edificiul unei noi teorii, definind și o nouă constantă fundamentală h .

Totusi, Planck propune doar o solutie matematica la o problema existenta ne-acordand nici o explicatie conceptuala

b) Einstein : conceptul corpuscular al luminii

Primul concept valid al noii teorii cuantice emergente este enuntat de catre Albert Einstein in 1905 pentru explicarea efectului fotoelectric.

El propune ideea ca lumina poate fi transmisa materiei (energia electromagnetica) doar in "pachete" de monne $h\nu$

$$E = h\nu = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$h = \frac{h}{2\pi}$$

Sau $E[eV] = \frac{1240}{\lambda[nm]}$

$$1eV = 1,6 \cdot 10^{-19} C$$

Aceasta este echivalentul ipotezei ca o radiatie de frecventa ν este constituita dintr-un ansamblu de particule avand fiecare energia $h\nu$. Aceasta cantitate a fost ulterior denumita cuanta de energie care poate fi transmisa in efectul fotoelectric electronilor din metal pentru a-i extrage. Aceasta ipoteza permite explicarea dependentei de frecventa a efectului fotoelectric prin scrierea unei ecuatii de conservare a energiei :

$$h\nu = \phi + E_c$$

energia cuantelor incidente

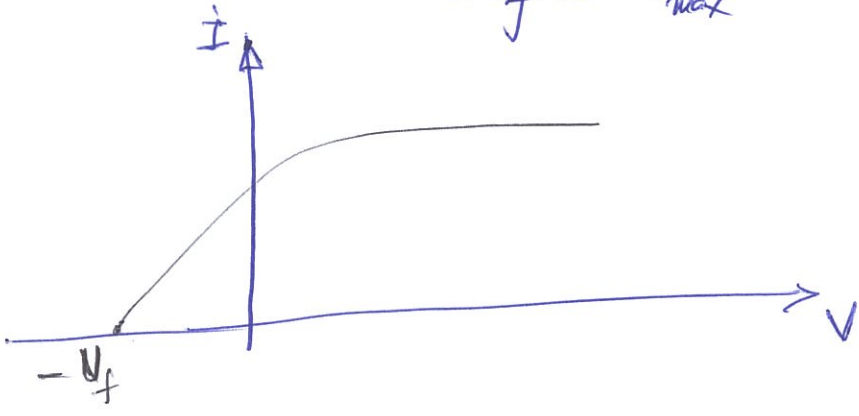
lucru mecanic de extractie = energia de legatura a (foto)electronului in metal = energia minima ce trebuie furnizata electronului pentru a-l smulge de pe suprafata metalului

energia cinetica a fotoelectronilor emisi

Dacă $h\nu = W \Rightarrow E_c = 0$

Dacă $h\nu < W$ nu se poate emite nici un electron
 $\Rightarrow I = 0$

Potențialul de frânare: U_f
 $eU_f = E_{c_{max}}$



Cuantele de energie au fost numite FOTONI.

Energia unui foton individual este:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

valabilă pentru absolut toată gama de frecvență a spectrului electromagnetic!

În plus, fotonii au și proprietăți undulatorii (frecvență ν , lungime de undă λ) \Rightarrow proprietăți duale (caracter dual) al fotonilor.

Mai târziu acest caracter dual a fost atribuit și altor particule (electroni, ...).

Impulsul fotonului

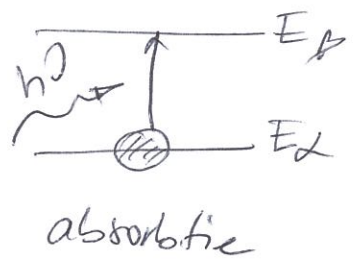
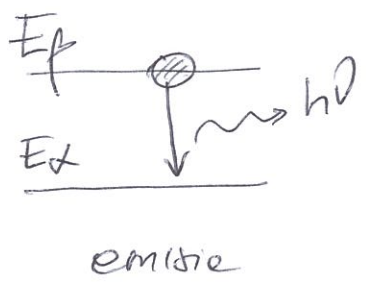
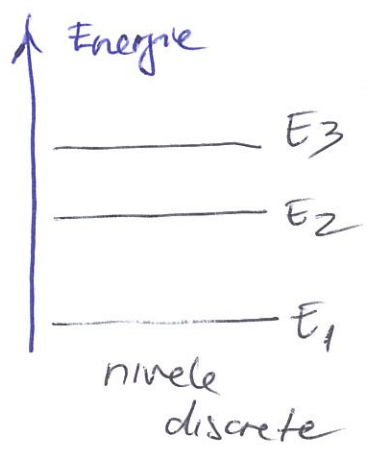
$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

$$\Leftrightarrow \lambda = \frac{h}{p}$$

formula ulterioară propusă de către L. de Broglie pt. orice corpuscule - undă cuantică.

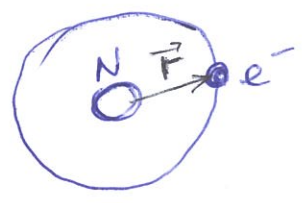
a) Spechtele de emisie ale atomilor. Modelul Bohr.

In 1913 Niels Bohr propune un model care combina modelul planetar existent cu ipoteza cuantelor. Bohr postulează că electronul poate să se miște în jurul nucleului doar pe anumite orbite numite orbite staționare pentru care valoarea momentului cinetic este un multiple întreg al constantei lui Planck. Această conduce implicit la o cuantificare a nivelelor de energie. Pe aceste orbite staționare Bohr postulează faptul că electronul nu emite radiație electromagnetică după cum se aștepta clasic. Însă, Bohr postulează că radiația electromagnetică sub formă de fotoni este emisă la trecerea de pe o orbită staționară pe alta: se emite un foton la trecerea de pe E_β pe E_α ($E_\beta > E_\alpha$) sau se absoarbe un foton la trecerea de pe E_α pe E_β .



$$h\nu = E_\beta - E_\alpha$$

In acest cadru se poate calcula energia cuantificată a unui electron care se mișcă pe o orbită circulară în atom:



$$m a = \frac{m v^2}{r_n} = e E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$$

forța centripetă

forța electrostatică
 e^- - nucleu într-un atom de hidrogen cu 1 e^- și 1 p^+ .

Condiția de cuantificare pentru momentul cinetic:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow ; L = m v r_n = n \frac{h}{2\pi} = n \hbar$$

Orbita de rază cea mai mică $n=1$

$$r_{1,2} a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{m e^2} = 0,529 \text{ \AA} \quad (\text{raza Bohr})$$

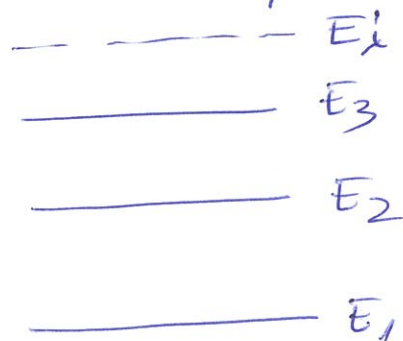
Energia electronului în mișcarea orbitală:

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_n}$$

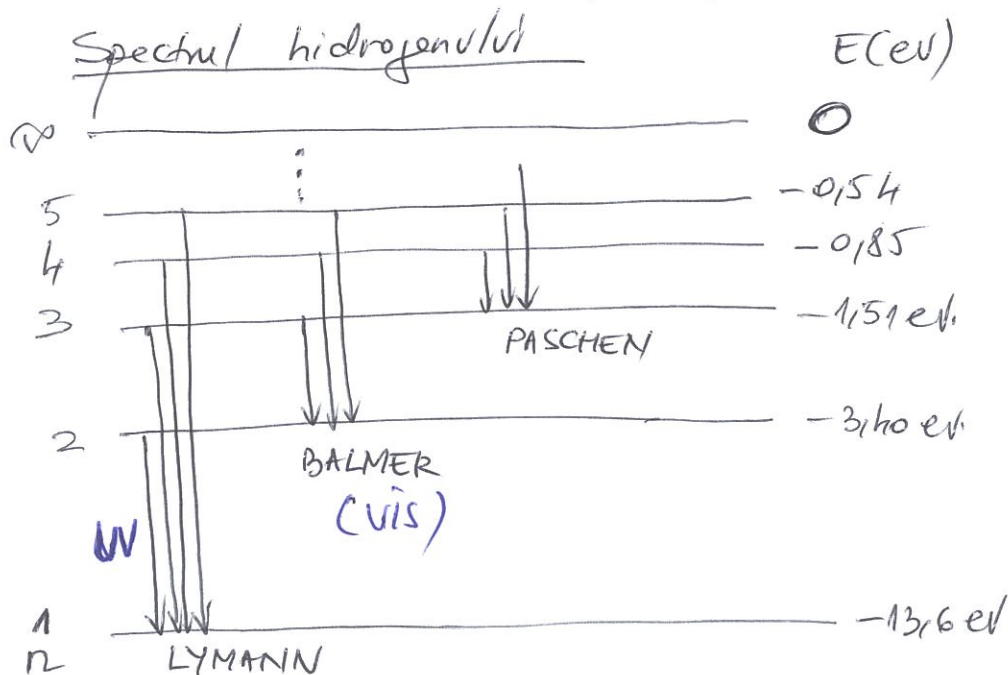
$$\Rightarrow E_n = -\frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6 \text{ [eV]}}{n^2}$$

Formula valabilă pt atomi hidrogenoizi (cu un e^- pe staturile externe):

$$E_n = -\frac{Z m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2}$$



Acest model permite explicarea spectrelor hidrogenului însă este mult prea simplist pt a explica spectrele atomilor complecși



stări excitate

\Rightarrow serii de emisie

stare fundamentala

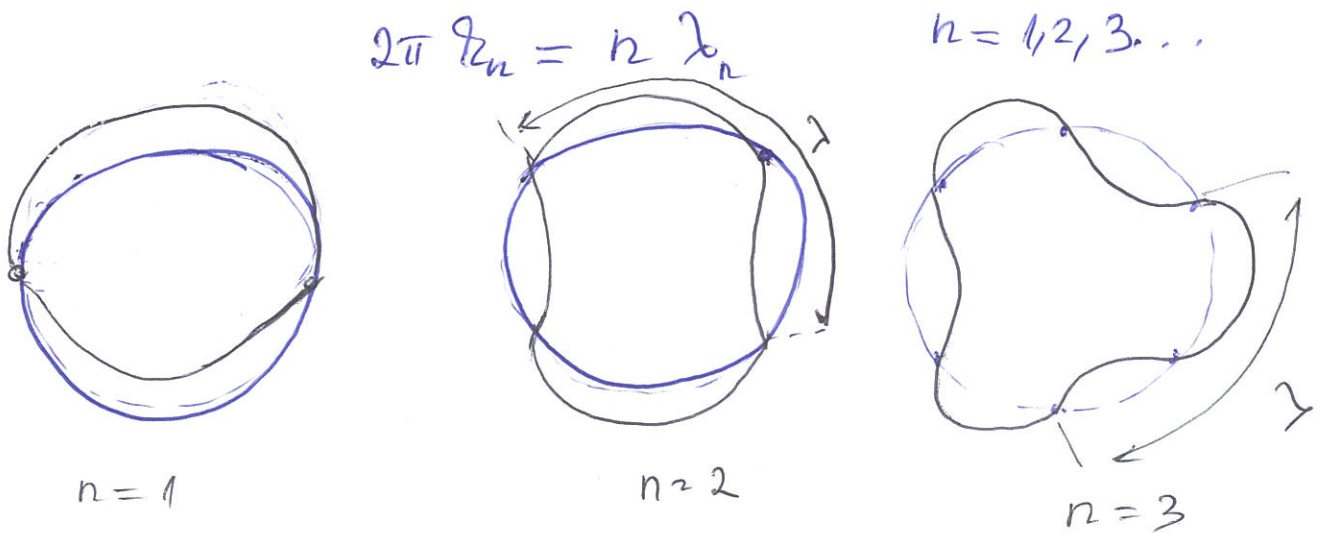
2 Ipoteza lui de Broglie

În 1924 fizicianul francez Louis de Broglie face o afirmație remarcabilă cu privire la natura materiei. Pe baza unui principiu universal al simetriei el pune următoarea problemă: dacă lumina care a fost considerată ca și undă n-a dovedit a avea un caracter dual: undă-corpuscule, de ce nu și ~~electronii~~ particule (de ex. electronii) nu ar avea același caracter dual, având la rândul lor proprietăți și ondulatorii. De Broglie propune o formulă de calcul a lungimii de undă asociate:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v}$$

cu $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ J·s
const. Planck.

Prin această ipoteză, modelul lui Bohr care presupunea cuantificarea momentului cinetic devine complet justificat: De Broglie propune că lungimea de undă a electronului care se mișcă pe o orbită circulară în jurul nucleului trebuie să se caleze pe lungimea orbitei astfel încât să se poată forma unde staționare



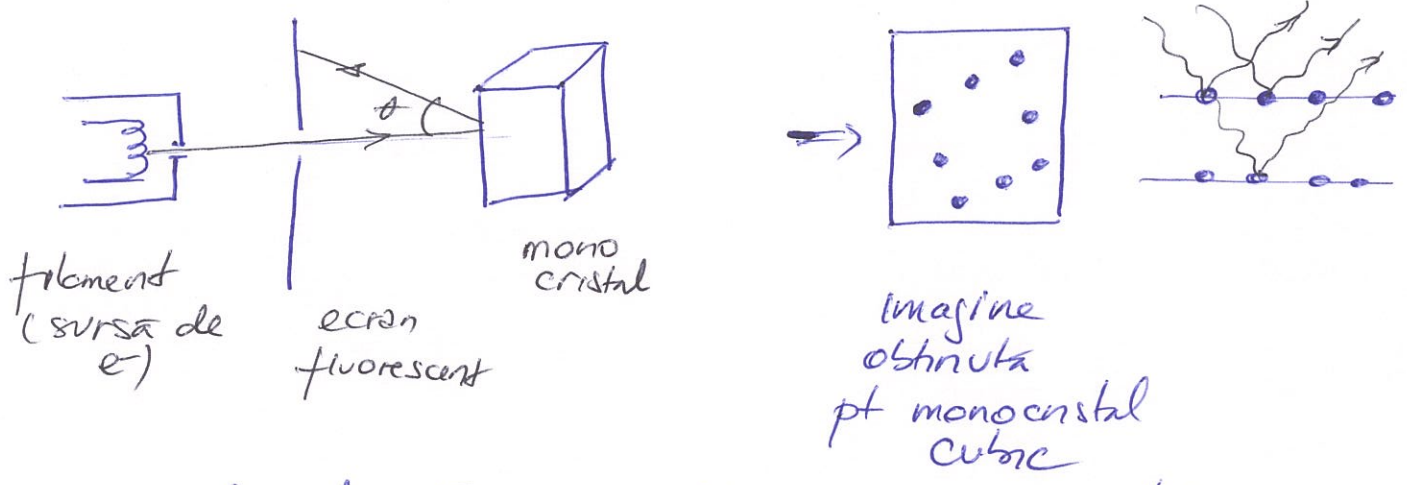
Ideea vine de la mecanismul undelor staționare în cavitate!

Dar $\lambda_n = \frac{h}{mv_n} \Rightarrow$

$mv_n \lambda_n = n \frac{h}{2\pi} = n \hbar \Rightarrow \boxed{L_n = n \hbar}$

adică exact.
relația de cuantificare
propusă de către Bohr

Ulterior, ipoteza lui de Broglie a fost demonstrată experimental în 1927 de către Davisson & Germer care arată că electronii pot difracta pe un cristal, difracția fiind un fenomen specific undelor.



Se observă maxime și minime cu o simetrie care reflectă simetria cristalului folosit

Obs. Orice obiect are caracter ondulatoriu? Ce se întâmplă la scară microscopică?

R: Datorită valorii mici a constantei lui Planck caracterul ondulatoriu este neglijabil la scară macroscopică

un gravite de masă $m = 10^{-10} \text{ kg}$ care cade cu viteză $v = 0,4 \text{ m/s}$ de diametru $d = 0,07 \text{ mm} = 7 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ va avea o lungime de undă asociată:

$\lambda = \frac{h}{mv} = 3 \cdot 10^{-24} \text{ m}$ mult inferioară dimensiunii atomice ($\sim 10^{-10} \text{ m}$)

\Rightarrow neglijabil.

Microscopul electronic

Rezoluția unui microscop optic este limitată de căte 2 întrucât pt. o particulă conform relației lui de Broglie

$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$; λ poate fi descrescut prin creșterea vitezei (accelerarea electronilor la energia mari

$$eU = \frac{mv^2}{2} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$$

Se pot obtine măritri cu astfel de microscopie de mii de ori superioare celor din microscopie optice => accesul la nano (dimensiunea nanometrică).

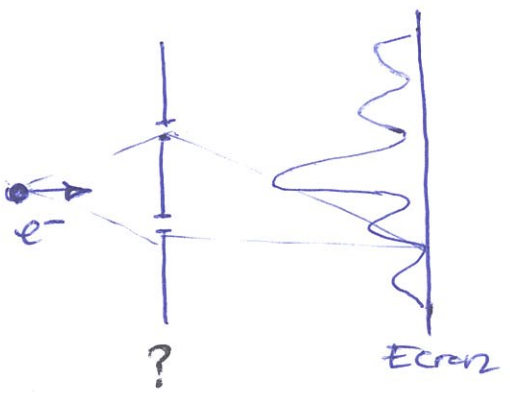
3 PRINCIPUL DE INCERTITUDINE

In mecanica clasică poziția și starea de mișcare a unei particule pot fi descrise simultan și exact.
(x, y, z) + (v_x, v_y, v_z)

In lumea microscopică, la scara particulelor cuantice, lucrurile stau însă total altfel. Particulele au caracter dual undă-corpusul și descrierea Newtoniană își pierde validitatea.

Niels Bohr, in 1928 enunță un Principiu al Complementarității care afirmă că descrierea ondulatorie și corpusculară este absolut complementară. Ele nu trebuie folosite

simultan pentru descrierea unei realități. Intru un experiment de interferență cu electroni, analog experimentului lui Young pt. lumină :



dacă încercăm să detectăm prin care dintre fante a trecut electronul a căror undă asociată interferează și formează figura de difracție.

Nu se poate preciza exact nici unde un electron dat va "ateriza" în figura de difracție.

Pentru orice particulă cuantică (electron, foton, ...) există anumite incertitudini fundamentale interconectate inseparabil

=> Principiile de incertitudine Heisenberg

poziție ↔ impuls

energie ↔ timp

$$\begin{cases} \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \end{cases}$$

$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

→ Nu se pot determina precis și simultan poziția și impulsul unei particule

Incetitudinea unei măsuri este descrisă prin conceptul statistic de deviație standard care este o măsură a dispersiei unui set de numere față de o valoare medie



$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum (x - \langle x \rangle)^2}{n - 1}}$$

Se observă astfel aspectul statistic în descrierea realității fizice, lucru absolut de neconceput în fizica clasică unde poziția și elementele mișcării unei particule sunt determinate exact și cu precizie în orice moment de timp t.

Elementele dezvoltate succesiv de către Planck (ipoteza cuantelor), Einstein (fotoni), de Broglie (dualismul undă corpuscul), Bohr (cuantificarea momentului cinetic), complementritatea Heisenberg (relațiile de incertitudine) conduc în cele din urmă la dezvoltarea unei noi ramuri a fizicii și anume meconica ondulatorie sau teoria cuantică a undelor și particulelor.