INTRODUCERE IN FIZICA CUANTICĂ

1 Limitari ale fizicii clasice si ipoteze istorice

La sfarsitul sec XIX fizica se considera a fi o stiință completa care putea să explice in integralitate realitatea inconjuratoare. Edificiile sale au fost puse in timp incepând cu mecanica clasică (Newton, sec XVII) completată de teoria relativitatii (Einstein ~1900). Odată cu dezvoltarea teoriei campului electromagnetic de catre J.C. Maxwell se inchide si una dintre intrebarile care au framantat omenirea in timp si anume: ce este lumina?. Conform teoriei lui Maxwell, lumina este o undă electromagnetică ce se propagă in vid cu viteza $c = 3 \cdot 10^8 m/s$.

La sfarsitul secolului XIX, realitatea inconjuratoare are două componente fundamentale complet separate:

- materia
- radiatia

a) Materia este formată din particule localizate pentru care se poate defini in mod absolut determinist si precis conform dinamicii clasice:

Pozitia $\vec{r}(t)$

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

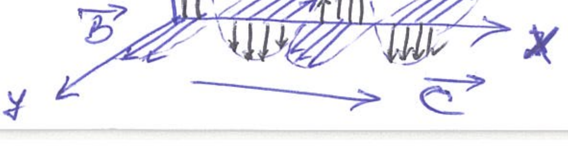
legea de miscare

Energia, impulsul, momentul cinetic, ...

Miscarea se efectuează sub actiunea unei forte:

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

b) Radiatia electromagnetică descrisă de un camp vectorial $(\vec{E}(t), \vec{B}(t))$ care se propagă cu viteza $c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}$



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

$$\oiint \vec{E} \cdot d\vec{A} = \frac{Q}{\varepsilon_0}$$

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

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

ⓐ 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

ⓑ 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.

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

Incercând să se răspundă problemelor sus-menționate, printr-o serie de ipoteze istorice, o suită de fizicieni: Planck, Einstein, Bohr pun rând pe rând bazele unei noi ramuri a fizicii și anume mecanica cuantică. Dezvoltarea acesteia s-a făcut în mod impresionant între 1900 – 1930 prin contribuția succesivă a mai multor fizicieni de excepție care au avut descoperiri majore:

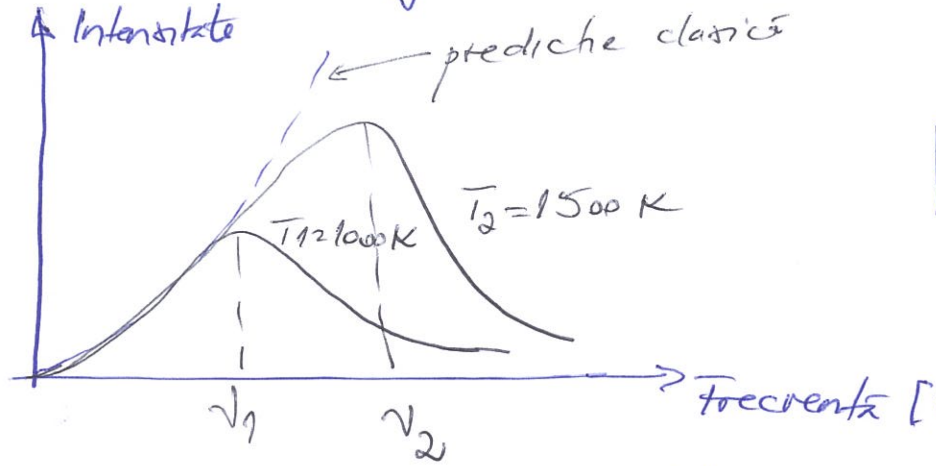
- 1900 Planck (Nobel 1919) radiația corpului negru și cuante de energie
- 1905 Einstein (Nobel 1921) efectul fotoelectric și cuante de energie
- 1913 Bohr (Nobel 1922) Sommerfeld : cuantificarea momentului cinetic
- 1916 Millikan (Nobel 1923) : demonstrarea experimentală a teoriei lui Einstein pentru efectul fotoelectric
- 1922 Stern & Gerlach : demonstrarea experimentală a cuantificării momentului cinetic. Momentul cinetic de spin.
- 1924 De Broglie (Nobel 1929) : dualismul undă–corpuscul; particulele se comportă ca unde
- 1925 Davisson & Germer – demonstrarea caracterului ondulatoriu al electronilor.
- 1926 Schrödinger (Nobel 1933) – ecuația undelor pentru particule

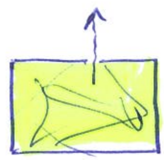
  Max Born (1954 Nobel) – funcție de undă și probabilitate
- 1927 Uhlenbeck & Goodsmith – ipoteza spinului

  Heisenberg (Nobel 1932) – principiul de incertitudine
- 1930 Dirac (Nobel 1933), Pauli (Nobel 1945) – postulatele noii mecanici cuantice, mecanica cuantică relativistă.

a) Radiația corpului negru

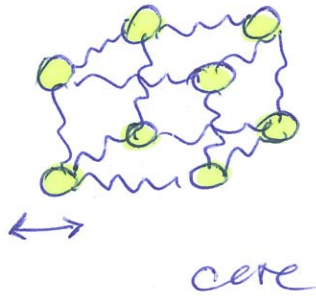
Experimentul este bazat pe observația conform căreia orice corp la o temperatură T emite radiație. Experimentul constă în încălzirea unei cavități închise cu o gaură mică prin care se permite emisia radiației care, a priori, are toate frecvențele și lungimile de undă posibile. Rezultatul experimentului este schematizat mai jos:





Experimental se observă că intensitatea emisă crește cu frecvența, are un maxim și apoi descrește. Maximul este deplasat spre frecvențe mai mari dacă temperatura T a cavității crește. Descreșterea $I(\nu)$ la frecvențe mari (spre UV) este în contradicție cu predicția clasică și poartă numele de catastrofa UV.

Cum explică fizica clasică (teoria Maxwell) emisia radiației? Materia este constituită din atomi fixați în nodurile rețelelor cristaline care la temperatură finită vibrează în jurul poziției de echilibru cu o amplitudine proporțională cu temperatura.



Fiecare atom este deci un oscilator armonic a cărei vibrație clasic poate avea o infinitate de moduri. Atomii conțin electroni (particule încărcate) care sub influența mișcării oscilatorii accelerate vor emite conform teoriei lui Maxwell radiație electromagn.

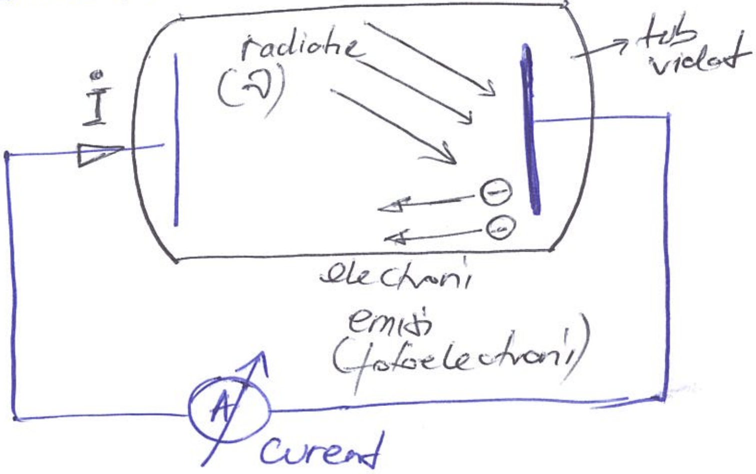
Un calcul clasic al densității spectrale a radiației care descrie energia radiată pe unitatea de volum pentru o frecvență ν conduce la:

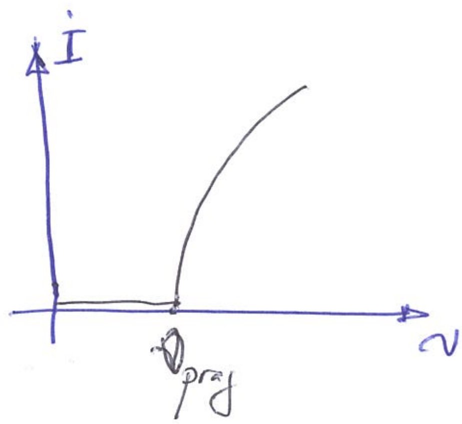
$$\boxed{u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T}$$

care descrie satisfăcător doar zona de frecvențe mici însă nu poate explica maximul și descreșterea 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 câmpului 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 am aștepta să absorbim energia necesară, efectul nu se produce.

În plus, pentru frecvențe peste valoarea de prag, se poate măsura energia cinetică a foto-electronilor: aplicând o tensiune inversă între plăci electronii pot fi integral frânați $\Rightarrow \dot{I} \to 0$ când $E_c = \frac{mv^2}{2} = eU_f$

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!

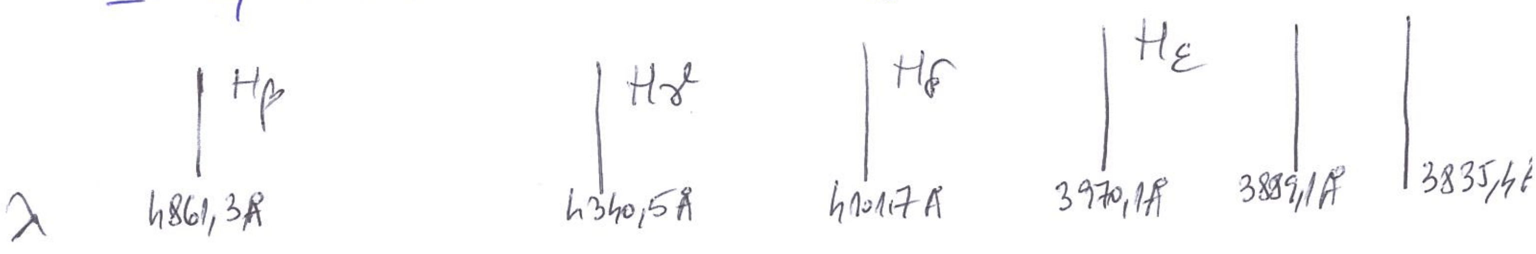
c) <u>Stabilitatea atomilor și spectre de emisie</u>

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

Acest model confruntat însă cu teoria lui Maxwell pune o problemă fundamentală: electronul încărcat 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 <u>discretă</u> a spectrelor de emisie observate experimental: emisia are loc doar la anumite frecvențe/ precise.
lungimi de undă

<u>ex</u>: Spectrul de emisie al hidrogenului

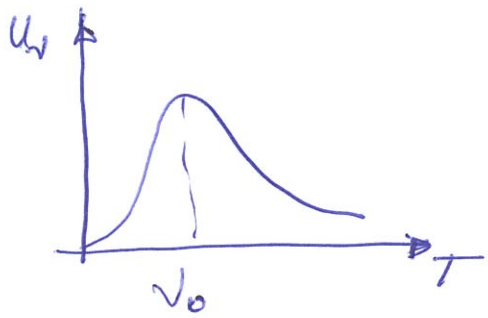


IPOTEZE ISTORICE

a) Ipoteza lui Plack a cuantelor

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

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



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

cu $h = 6{,}626\cdot 10^{-34}\ J\cdot s$
(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):

$$E_n = n h\nu \qquad n = 1, 2, \ldots$$

în mod paradoxal oscilatorul nu va mai 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 cărămidă la edificiul unei noi teorii, definind și o nouă constantă fundamentală h.

Totuşi, Planck propune doar o soluţie matematică la o problemă existentă ne-acordând nici o explicaţie conceptuală

b) Einstein: conceptul corpuscular al luminii

Primul concept valid al noii teorii cuantice emergente este enunţat de către Albert Einstein în 1905 pentru explicarea efectului fotoelectric.

El propune ideea că lumina (energia electromagnetică) poate fi transmisă materiei doar în "pachete" de mărime $h\nu$

$$\boxed{E = h\nu = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda}} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\text{sau } E[eV] = \frac{1240}{\lambda[nm]} \qquad 1eV = 1{,}6 \cdot 10^{-19} C$$

Aceasta este echivalentul ipotezei că o radiaţie de frecvenţă ν este constituită dintr-un ansamblu de particule având fiecare energia $h\nu$. Această cantitate a fost ulterior denumită cuanta de energie care poate fi transmisă în efectul fotoelectric electronilor din metal pentru a-i extrage. Această ipoteză permite explicarea dependenţei de frecvenţă a efectului fotoelectric prin scrierea unei ecuaţii de conservare a energiei:

$$\boxed{h\nu = W + E_c}$$

energia cuantei incidente

lucru mecanic de extracţie = energia de legătură a (foto)electronului în metal = energia minimă ce trebuie furnizată electronului pentru a-l smulge de pe suprafaţa metalului

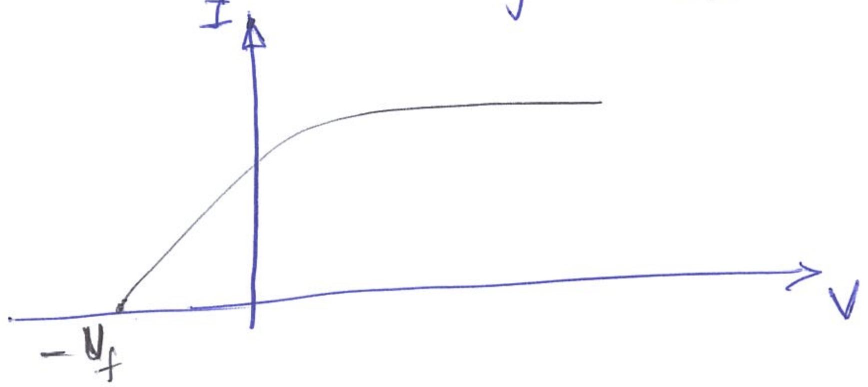
energia cinetică a fotoelectronilor emişi

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 <u>FOTONI</u>.

Energia unui foton individual este:

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

valabilă pentru absolut toată gama de frecvență a spectrului electromagnetic!

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

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

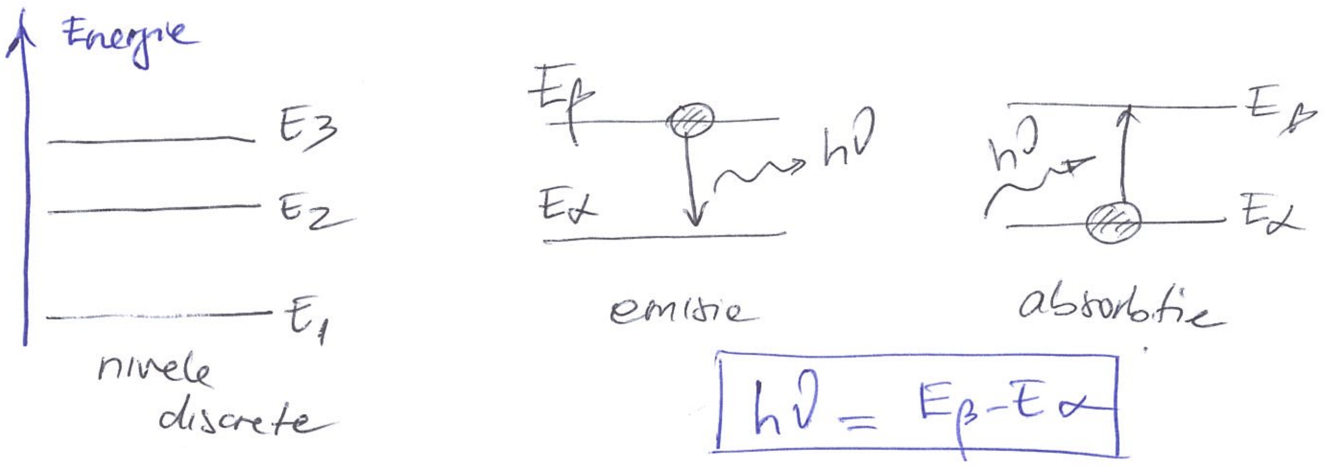
<u>Impulsul fotonului</u> $\boxed{p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}}$

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

formulă ulterior propusă de către L. de Broglie pt. orice corpuscul - undă cuantic.

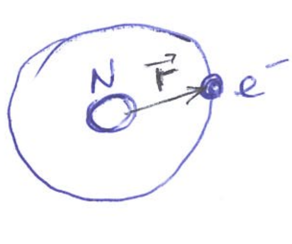
c) Spectrele de emisie ale atomilor. Modelul Bohr.

In 1913 Niels Bohr propune un model care combină modelul planetar existent cu ipoteza cuantelor. Bohr postulează că electronul poate să se miște în jurul nucleului doar pe anumite orbite numite <u>orbite staționare</u> pentru care valoarea momentului cinetic ~~este~~ un multiplu întreg al constantei lui Planck. Aceasta conduce implicit la o cuantificare a nivelelor de energie. Pe aceste orbite staționare Bohr postulează faptul că electronul <u>nu emite</u> 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.



$$\boxed{h\nu = E_\beta - E_\alpha}$$

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



$$ma = \frac{mv^2}{r_n} = eE = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2}$$

forța centripetă

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

Condiția de cuantificare pentru momentul cinetic:

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

Orbita de rază cea mai mică $n=1$

$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,529 Å \quad \text{(raza Bohr)}$$

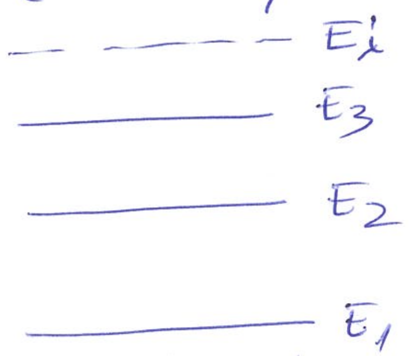
Energia electronului în mișcarea orbitală:

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2}\ [eV]}$$

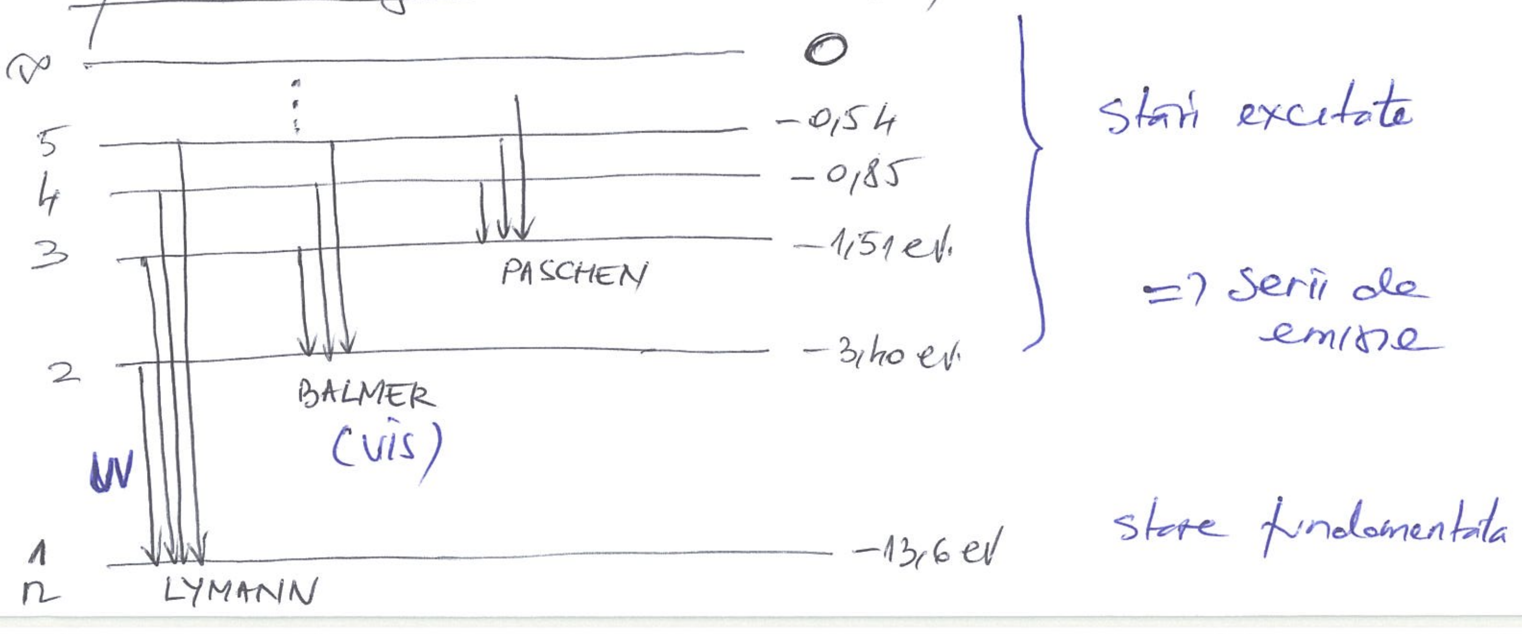
formula valabilă pt atomi hidrogenoizi (cu un e^- pe stratul extern):

$$\boxed{E_n = -\frac{Zme^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2}}$$



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

Spectrul hidrogenului



2 Ipoteza lui de Broglie

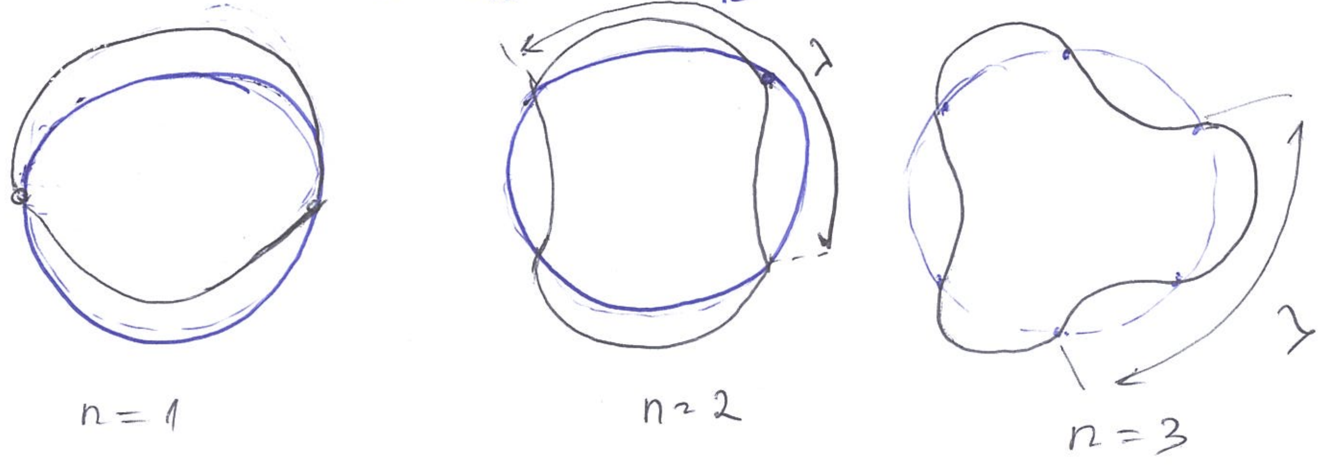
În 1924 fizicianul francez Louis de Broglie face o afirmație remarcabilă cu privire la natura materiei. Pe baza unui principiu universal al simetriei el pune următoarea problemă: dacă lumina care a fost considerată ca și undă s-a dovedit a avea un caracter dual: undă–corpuscul, de ce nu și celelalte 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:

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

cu $h = 6{,}625 \cdot 10^{-34}\ J \cdot s$ 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 calcze pe lungimea orbitei astfel încât să se poată forma unde staționare

$$2\pi r_n = n\lambda_n \qquad n = 1, 2, 3 \ldots$$



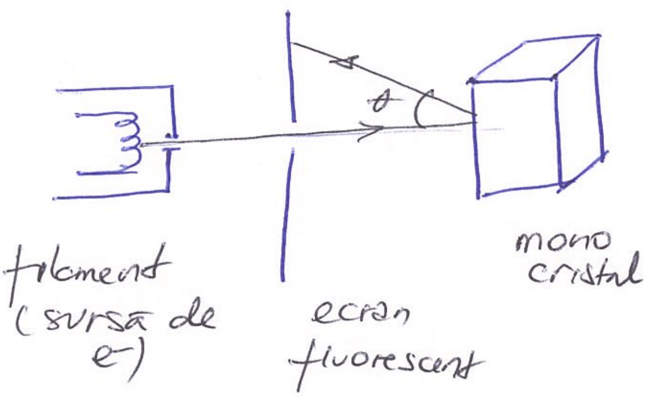
Ideea vine de la mecanismul undelor staționare în cavități

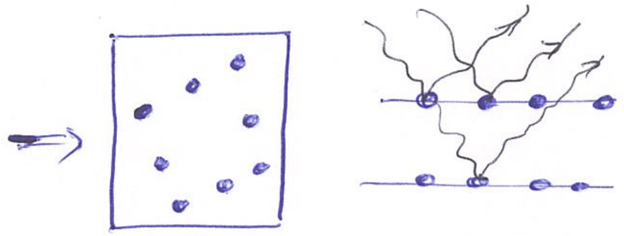
Dar $\lambda_n = \frac{h}{m v_n}$ $\Rightarrow$

$$m v_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \Rightarrow \boxed{L_n = n\hbar}$$

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.





imagine obținută pt monocristal cubic

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

Obs. Orice obiect are caracter ondulatoriu? Ce se întâmplă la scara macroscopică?

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

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

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

$\Rightarrow$ neglijabil.

Microscopul electronic

Rezoluția unui microscop optic este limitată de către λ 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 energii mari

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

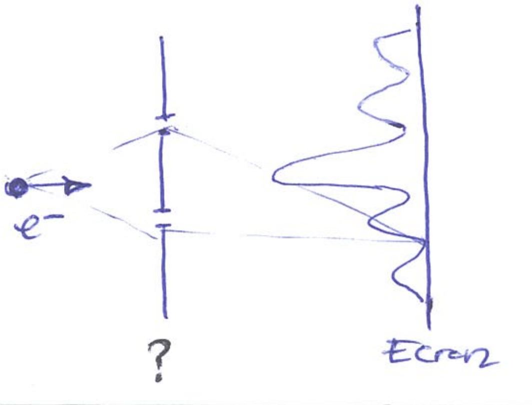
Se pot obține măriri cu astfel de microscoape de mii de ori superioare celor din microscoapele optice
⇒ accesul la nano (dimensiunea nanometrică).

3 PRINCIPIUL DE INCERTITUDINE

În 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)

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

Niels Bohr, în 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. Într-un experiment de interferență cu electroni, analog experimentului lui Young pt. lumină: figura de difracție dispare dacă încercăm să detectăm prin care dintre fante au trecut electronii a căror undă asociată interferă și formează figura de difracție.



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

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

$\Rightarrow$ Principiul de incertitudine Heisenberg

poziție $\longleftrightarrow$ impuls

energie $\longleftrightarrow$ timp

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

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

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

Incertitudinea unei mărimi 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.

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

MECANICA ONDULATORIE

① Funcția de undă și ecuația Schrödinger

Plecând de la premisa că particulele au caracter ondulatoriu prin prisma dualismului undă-corpuscul putem folosi formalismul ondulatoriu specific undelor în descrierea acestora.

Undele mecanice au fost descrise printr-o funcție de undă $\psi(x,t)$ care descrie deplasarea particulei față de poziția de echilibru în momentul t la poziția x. Această funcție de undă $\psi(x,t)$ satisfacea o ecuație generală de propagare:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial t^2} \qquad v = \text{viteza undei}$$

$$\psi(x,t) = A\cos(kx - \omega t)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad v = \lambda \nu$$

Ne propunem să deducem o "versiune cuantică" a ecuației undelor, valabilă pentru undele asociate particulelor cuantice.

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

$$\frac{d\psi}{dx} = ikAe^{i(kx-\omega t)} = ik\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (ik)^2 A e^{i(kx-\omega t)} = -k^2\psi$$

$$\left.\begin{aligned} &\text{dar } k = \frac{2\pi}{\lambda} \\ &\lambda = \frac{h}{p} \end{aligned}\right\} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{h}p = \frac{p}{\hbar}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \iff \boxed{-\hbar^2\frac{d^2\psi}{dx^2} = p^2\psi} \qquad (1)$$

Dacă scriem acum energia mecanică totală a particulei

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + U = \frac{p^2}{2m} + U \Rightarrow$$

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + U\psi \qquad (2)$$

Din (1) și (2) $\Rightarrow$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U\Psi=E\Psi}$$

ecuația lui Schrödinger independentă de timp

Dependența de timp

$$\Psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-i\omega\Psi \qquad \text{dar} \qquad E=h\nu=\hbar\omega$$

$$\Rightarrow \omega\Psi=-\frac{1}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$E\Psi=\hbar\omega\Psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad ; \quad i^2=-1$$

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

ecuația lui Schrödinger dependentă de timp

Interpretarea funcției de undă (Max. Born)

$\Psi(x,t)$ este o ~~u~~funcție complexă astfel încât

$$|\Psi(x,t)|^2=\Psi(x,t)\,\Psi^*(x,t)$$

$|\Psi(x,t)|^2$ – reprezintă o densitate de probabilitate de a găsi particula în poziția x la momentul t

$\Rightarrow$ $|\Psi(x,t)|^2dx$ – reprezintă probabilitatea de a găsi particula la momentul t în intervalul spațial dx

$$\Rightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1}$$

ne spune că particula se află cu certitudine undeva în intervalul $(+\infty, -\infty)$

condiția de normare a funcției de undă (Max-Born)

Operatorul Hamilton

În mecanica clasică analitică cantitatea egală cu suma dintre energia cinetică și potențială a unui sistem se numește Hamiltonian al sistemului (notat H)

Din $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U\Psi = E\Psi \Leftrightarrow$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U\right)\Psi = E\Psi$$

putem crea un <u>operator</u> matematic

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

astfel încât ec. lui Schrödinger se scrie operatorial:

$$\boxed{\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

unde operatorul $\hat{H}$ acționează asupra funcției de undă $\Psi(x)$.

<u>Obs</u>: Întrucât $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ reprezintă operatorul de energie cinetică

însă $E_c = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \boxed{\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}$ reprezintă operatorul impuls

<u>Obs</u>: Oricărei mărimi fizice clasice în mecanica cuantică i se asociază un <u>operator</u>.

În trei dimensiuni, putem scrie ec. Schrödinger sub forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi + U\Psi = E\Psi$$

$$\Psi = \Psi(x,y,z)$$
$$U = U(x,y,z)$$

$$\underbrace{\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}}$$ operatorul Laplace

$$\Rightarrow \boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Psi = E\Psi}$$ ec. Schrödinger staționară

respectiv:

$$\boxed{\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$

ec. Schrödinger dependentă de timp.

Se poate demonstra că dacă cunoaștem soluția ec. Schrödinger independente de timp $\Phi(x,y,z)$, soluția dependentă de timp este:

$$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = \Phi(\vec{r})\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}} \qquad (*)$$

$$\hat{H}\Phi = E\Phi$$

deci este suficient să rezolvăm ecuația Schrödinger staționară pt. a calcula stările și energiile proprii ale sistemului pentru ca apoi să putem scrie direct evoluția temporară pe baza ec (*)

Valori medii

Întrucât mecanica ondulatorie implică un caracter probabilistic va trebui să descriem mărimile fizice nu în mod determinist ca și în mecanica clasică ci în mod statistic:

Astfel, valoarea medie a unei mărimi în funcție de densitatea de probabilitate

$$\langle A \rangle = \int \underbrace{P(\vec{r})}_{\text{probabilitate statistică}} A(\vec{r})\, d^3r$$

În mecanica cuantică:

$$P(\vec{r}) = |\psi(r,t)|^2 = \psi^*(\vec{r}) \psi$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle A \rangle = \int \psi^*(\vec{r},t) A(\vec{r}) \psi(\vec{r},t)\, d^3r}$$

Flux de particule. Ecuație de continuitate

O particulă nu poate fi descrisă printr-o funcție de undă discontinuă ce ar implica o densitate de probabilitate de prezență în spațiu discontinuă pentru particulă! Astfel, funcția de undă trebuie să fie continuă în spațiu.

De asemenea, nu doar funcția de undă trebuie să fie continuă ci și derivata acesteia $\frac{d\psi}{dr}$.

În mecanica clasică (dinamica fluidelor) se definește o densitate de curent a particulelor:

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \underbrace{\rho(\vec{r},t)}_{\text{densitate}} \underbrace{\vec{v}(\vec{r},t)}_{\text{viteza}}$$

care satisface o ecuație de continuitate de tipul:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0}$$

divergența curentului

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\bar{i} + \frac{\partial}{\partial y}\bar{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$$

În mod absolut analog se poate scrie o ecuație identică în mecanica cuantică pentru "fluidul de probabilitate".

Dacă definim:

$$\rho(\bar{r},t) = |\psi(\bar{r},t)|^2$$

densitatea de probabilitate

se poate arăta că dacă densitatea de curent de probabilitate are forma:

$$\boxed{\bar{j}(\bar{r},t) = \frac{i\hbar}{m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right)}$$

se ajunge la o ecuație de continuitate analogă:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0}$$

Într-o dimensiune: $\bar{j}(x,t) = \frac{i\hbar}{m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$

Continuitatea densității de curent de probabilitate implică continuitatea derivatei funcției de undă.

$\Rightarrow$ La frontiera a două zone din spațiu în care $(U_I \neq U_{II})$ energia potențială simțită de particula este diferită ψ și $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ trebuie să fie continue.

APLICAȚII ALE MECANICII CUANTICE

Ecuația lui Schrödinger este o ecuație diferențială de ordin II a cărei rezolvare conduce la determinarea

- funcției de undă $\Psi(\vec{r})$ respectiv a
- energiei pe care particula cuantică o poate avea într-o stare $\Psi(\vec{r})$

Ca și pentru orice ecuație diferențială condițiile la limită sunt extrem de importante pentru a putea determina constantele de integrare. Aceste condiții se adaugă condițiilor de continuitate pentru funcția de undă și derivata acesteia la frontiera între două zone din spațiu cu energie potențială diferită.

zona I	zona II	... etc.
U_I	U_{II}	

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \iff -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi = (E-U_i)\Psi$$

Strategie de rezolvare a unei probleme de MQ

(1) se proiectează ec. Schrödinger în fiecare zonă caracterizată de U_i diferit și se rezolvă în parte ecuațiile respective $\Rightarrow \Psi_i(\vec{r})$

(2) Se pun condițiile de continuitate la frontiera dintre zone atât pt funcția de undă cât și derivata acesteia:

ex
$$\Psi_I(x)\Big|_{\text{frontieră}} = \Psi_{II}(x)\Big|_{\text{frontieră}}$$

$$\frac{\partial \Psi_I(x)}{\partial x}\Big|_{\text{frontieră}} = \frac{\partial \Psi_{II}(x)}{\partial x}\Big|_{\text{frontieră}}.$$

(3) Se scrie condiția de normare a funcției de undă, adică integrala pe tot spațiul funcției de undă trebuie să fie egală cu unu.

Folosind acest formalism și algoritm putem rezolva o serie de probleme de mecanică cuantică dintre care am ales un număr finit:

→ particula într-o groapă de potențial

→ bariera de potențial și efectul tunel

→ particula într-o cutie 3D de potențial

→ oscilatorul armonic cuantic

→ Atomul de hidrogen

→ Molecula biatomică

→ Electroni într-un potențial cristalin periodic.

Vom putea astfel explica originea benzilor de energie în solide, proprietățile metalelor, izolatorilor, semiconductorilor, și pune bazele electronicii stării solide: joncțiuni, tranzistori, etc