Capitolul 4

Mecanica cuantică

Problema 4.1. *Arătaţi că există următoarele relaţii între operatorii din mecanica cuantică:*

$$
\begin{aligned}
[l_i, x_k] &= i\hbar \in_{ikl} x_l\,, & (4.1.1)\\
[l_i, p_k] &= i\hbar \in_{ikl} p_l\,, & (4.1.2)\\
[l_i, l_k] &= i\hbar \in_{ikl} l_l\,. & (4.1.3)
\end{aligned}
$$

Soluţie. Cu l a fost notat mementul cinetic, l_x, l_y şi l_z fiind componentele sale. În mecanica cuantică se adoptă aceleaşi definiţii (ca în mecanica clasică) dar mărimile clasice sunt înlocuite prin operatori corespunzători.

Pentru o particulă cuantică avem

$$
\begin{aligned}
l_x &= yp_z - zp_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\,, & (4.1.4)\\
l_y &= zp_x - xp_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\,, & (4.1.5)\\
l_z &= xp_y - yp_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\,. & (4.1.6)
\end{aligned}
$$

În enunţul problemei am folosit tensorul unitate de ordinul 3 antisimetric:

$$
\in_{ijk} = \begin{cases} 0 & ,\text{dacă}\,(i-j)\,(j-k)\,(k-i) = 0 \\ 1 & ,\text{dacă}\,(ijk)\ \text{este permutare pară} \\ -1 & ,\text{dacă}\,(ijk)\ \text{este permutare impară} \end{cases} \qquad (4.1.7)
$$

iar prin repetarea indicilor de două ori se înţelege sumare (convenţia indicilor muţi, a lui Einstein).

a). Avem de demonstrat

$$[l_x, x] = 0\,, \quad [l_x, y] = i\hbar z \quad \text{şi} \quad [l_x, z] = -i\hbar y\,. \tag{4.1.8}$$

Să detaliem, succesiv:

$$\begin{aligned}
(*)\ [l_x, x] &= [yp_z - zp_y, x] = [yp_z, x] - [zp_y, x] = \\
&= [y, x]\, p_z + y\, [p_z, x] - [z, x]\, p_y - z\, [p_y, x] = \\
&= 0 && (4.1.9) \\
(**)\ [l_x, y] &= [yp_z - zp_y, y] = [yp_z, y] - [zp_y, y] = \\
&= [y, y]\, p_z + y\, [p_z, y] - [z, y]\, p_y - z\, [p_y, y] = \\
&= i\hbar z && (4.1.10) \\
(***)\ [l_x, z] &= [yp_z - zp_y, z] = [yp_z, z] - [zp_y, z] = \\
&= [y, z]\, p_z + y\, [p_z, z] - [z, z]\, p_y - z\, [p_y, z] = \\
&= -i\hbar y\,. && (4.1.11)
\end{aligned}$$

În stabilirea relaţiilor (4.1.9), (4.1.10) şi (4.1.11) am ţinut cont de relaţiile de comutare

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}\,, \quad [q_i, q_j] = 0\,, \quad [p_i, p_j] = 0\,. \tag{4.1.12}$$

b). Avem de demonstrat

$$[l_x, p_x] = 0\,, \quad [l_x, p_y] = i\hbar p_z\,, \quad [l_x, p_z] = -i\hbar p_y\,. \tag{4.1.13}$$

Putem scrie:

$$\begin{aligned}
[l_x, p_x] &= [yp_z - zp_y, p_x] = [yp_z, p_x] - [zp_y, p_x] = \\
&= [y, p_x]\, p_z + y\, [p_z, p_x] - [z, p_x]\, p_y - z\, [p_y, p_x] = \\
&= 0 && (4.1.14) \\
[l_x, p_y] &= [yp_z - zp_y, p_y] = [yp_z, p_y] - [zp_y, p_y] = \\
&= [y, p_y]\, p_z + y\, [p_z, p_y] - [z, p_y]\, p_y - z\, [p_y, p_y] = \\
&= i\hbar p_z && (4.1.15) \\
[l_x, p_z] &= [yp_z - zp_y, p_z] = [yp_z, p_z] - [zp_y, p_z] = \\
&= [y, p_z]\, p_z + y\, [p_z, p_z] - [z, p_z]\, p_y - z\, [p_y, p_z] = \\
&= -i\hbar p_y && (4.1.16)
\end{aligned}$$

c). Avem de demonstrat

$$[l_x, l_x] = 0\,, \quad [l_x, l_y] = i\hbar l_z\,, \quad [l_x, l_z] = -i\hbar l_y\,. \tag{4.1.17}$$

Putem scrie:

$$\begin{aligned}
[l_x, l_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] = \\
&= y\,[p_z, z]\,p_x + p_y\,[z, p_z]\,x = i\hbar\,(xp_y - yp_x) = \\
&= i\hbar l_z \qquad (4.1.18) \\
[l_x, l_z] &= [yp_z - zp_y, xp_y - yp_x] = [yp_z, xp_y] + [zp_y, yp_x] = \\
&= x\,[y, p_y]\,p_z + z\,[p_y, y]\,p_x = -i\hbar\,(zp_x - xp_z) = \\
&= -i\hbar l_y \qquad (4.1.19)
\end{aligned}$$

$$[l_x, l_x] = [l_y, l_y] = [l_z, l_z] = 0 \qquad (4.1.20)$$

■

Problema 4.2. *Arătaţi că operatorii corespunzători proiecţiei mementului cinetic comută cu operatorul pătratului momentului cinetic.*

Soluţie. Avem de arătat că

$$\left[l_x, l^2\right] = \left[l_y, l^2\right] = \left[l_z, l^2\right] = 0 \qquad (4.2.1)$$

unde $l^2 = l_x{}^2 + l_y{}^2 + l_z{}^2$.

Prin calcul direct arătăm că

$$\begin{aligned}
\left[l_x, l^2\right] &= \left[l_x, l_x{}^2 + l_y{}^2 + l_z{}^2\right] = \left[l_x, l_x{}^2\right] + \left[l_x, l_y{}^2\right] + \left[l_x, l_z{}^2\right] = \\
&= [l_x, l_y]\,l_y + l_y\,[l_x, l_y] + [l_x, l_z]\,l_z + l_z\,[l_x, l_z] = \\
&= i\hbar\,(l_z l_y + l_y l_z - l_y l_z - l_z l_y) = 0\,. \qquad (4.2.2)
\end{aligned}$$

În demonstraţia relaţiei (4.2.2) am ţinut seama de relaţiile (4.1.18), (4.1.19) şi (4.1.20).

Analog

$$\left[l_y, l^2\right] = \left[l_y, l_x{}^2 + l_y{}^2 + l_z{}^2\right] = 0 \qquad (4.2.3)$$

şi

$$\left[l_z, l^2\right] = \left[l_z, l_x{}^2 + l_y{}^2 + l_z{}^2\right] = 0\,. \qquad (4.2.4)$$

■

Problema 4.3. *Dacă definim următorii operatori*

$$\begin{aligned}
l_+ &= l_x + il_y \qquad (4.3.1) \\
l_- &= l_x - il_y \qquad (4.3.2)
\end{aligned}$$

avem relațiile de comutare

$$[l_+, l_-] = 2\hbar l_z\,, \quad [l_z, l_+] = \hbar l_+\,, \quad [l_z, l_-] = -\hbar l_-\,. \tag{4.3.3}$$

Soluție. Se observă, pornind de la definițiile operatorilor l_+ și l_-, că avem egalitatea

$$l^2 = l_+ l_- + {l_z}^2 - \hbar l_z = l_- l_+ + {l_z}^2 + \hbar l_z\,. \tag{4.3.4}$$

Folosind relațiile, deja demonstrate,

$$[l_i, l_k] = i\hbar\, \epsilon_{ikl}\, l_l \tag{4.3.5}$$

prin calcul direct obținem:

$$\begin{aligned}
[l_+, l_-] &= [l_x + il_y, l_x - il_y] = \\
&= [l_x, l_x] + i\,[l_y, l_x] + [l_y, l_y] - i\,[l_x, l_y] = \\
&= i\,[l_y, l_x] - i\,[l_x, l_y] = \\
&= i\,(-i\hbar l_z) - i\,(i\hbar l_z) = 2\hbar l_z\,; && (4.3.6)\\
[l_z, l_+] &= [l_z, l_x + il_y] = [l_z, l_x] + i\,[l_z, l_y] = \\
&= i\hbar l_y + i\,(-i\hbar l_x) = i\hbar l_y + \hbar l_x = \hbar l_+\,; && (4.3.7)\\
[l_z, l_-] &= [l_z, l_x - il_y] = [l_z, l_x] - i\,[l_z, l_y] = \\
&= i\hbar l_y - i\,(-i\hbar l_x) = -\hbar l_x + i\hbar l_y = \\
&= -\hbar\,(l_x - il_y) = -\hbar l_-\,. && (4.3.8)
\end{aligned}$$

Observație. Un calcul simplu conduce la (4.3.4)

$$\begin{aligned}
l_+ l_- &= (l_x + il_y)(l_x - il_y) = {l_x}^2 + {l_y}^2 + \hbar l_z && (4.3.9)\\
l_- l_+ &= (l_x - il_y)(l_x + il_y) = {l_x}^2 + {l_y}^2 - \hbar l_z && (4.3.10)\\
& && (4.3.11)
\end{aligned}$$

■

Problema 4.4. *Aflați care sunt funcțiile proprii ortonormate și valorile proprii, pentru operatorul impuls unidimensional, în mecanica cuantică.*

Soluție. Să alegem axa x și proiecția impulsului $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, conform mecanicii cuantice. Ecuația cu funcții și valori proprii este

$$p_x \Psi(x) = p\Psi(x) \tag{4.4.1}$$

sau

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} = p\Psi(x) \,. \tag{4.4.2}$$

Ecuaţia (4.4.2) rescrisă

$$\frac{\mathrm{d}\Psi(x)}{\Psi(x)} = i\frac{p}{\hbar}\,\mathrm{d}x \tag{4.4.3}$$

conduce, prin integrare, la funcţia de undă

$$\Psi(x) = C(p)\, e^{i\frac{p}{\hbar}x} \,. \tag{4.4.4}$$

Dar funcţia de undă trebuie să fie mărginită! Acest lucru cere în mod expres, ca impulsul să fie real $p \in \mathbf{R}$, adică $\frac{i}{\hbar}px \in \mathbf{C}$. În caz contrar ($p \in \mathbf{C}$, $\frac{i}{\hbar}px = \frac{i}{\hbar}(a+ib)x = \frac{iax}{\hbar} - \frac{bx}{\hbar}$) exponenţială se scrie ca

$$e^{\frac{i}{\hbar}px} = e^{\frac{iax}{\hbar}} e^{-\frac{b}{\hbar}x} \tag{4.4.5}$$

iar partea reală, pentru $x \to -\infty$, este nemărginită

$$\lim_{x\to-\infty} e^{-\frac{b}{\hbar}x} = \infty \,. \tag{4.4.6}$$

În aceste condiţii, impulsul p, care este valoare proprie a ecuaţiei (4.4.1), fiind real ($p \in \mathbf{R}$), spectrul lui este continuu (de fapt numai continuu sau continuu în întregime).

În expresia funcţiilor de undă (4.4.4) nu sunt precizate constantele $C(p)$.

Acestea se determină din condiţiile de normare la unitate a funcţiilor de undă, adică

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(p', x)\, \Psi(p, x)\, \mathrm{d}x = \delta(p - p') \,, \tag{4.4.7}$$

unde $\delta(p - p')$ este funcţia lui Dirac, specifică unei condiţii de normare în cadrul unui spectrul continuu.

Să continuăm calculul în (4.4.7) pentru a obţine constantele de normare, notate de aici înainte cu $N(p)$.

Avem

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(p', x)\, \Psi(p, x)\, \mathrm{d}x &= N^*(p')\, N(p) \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}x(p-p')}\, \mathrm{d}x = \\ &= 2\pi\hbar\delta(p - p')\, N^*(p')\, N(p)\end{aligned} \tag{4.4.8}$$

deoarece

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}x(p-p')}\,\mathrm{d}x = 2\pi\hbar\delta\left(p-p'\right) . \tag{4.4.9}$$

Reunind rezultatele din (4.4.7) şi din (4.4.8) obţinem

$$2\pi\hbar N^*\left(p'\right)N\left(p\right)\delta\left(p-p'\right) = \delta\left(p-p'\right) . \tag{4.4.10}$$

Funcţia $\delta\left(p-p'\right)$ a lui Dirac, fiind singulară, nu permite simplificarea ei în (4.4.10).

Să integrăm în ambii membrii ai expresiei (4.4.10). Vom avea

$$2\pi\hbar N^*\left(p'\right)\int_{-\infty}^{\infty} N\left(p\right)\delta\left(p-p'\right)\,\mathrm{d}p = \int_{-\infty}^{\infty}\delta\left(p-p'\right)\,\mathrm{d}p = 1 , \tag{4.4.11}$$

sau

$$2\pi\hbar N^*\left(p'\right)N\left(p'\right) = 2\pi\hbar\left|N\left(p'\right)\right|^2 = 1 . \tag{4.4.12}$$

Constanta de normare are valoarea

$$|N| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{4.4.13}$$

ceea ce conduce la funcţia de undă

$$\Psi\left(p,x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px} . \tag{4.4.14}$$

■

Problema 4.5. *Scrieţi ecuaţia lui Schrödinger pentru o particulă relativistă liberă care are un comportament cuantic.*

Soluţie. Energia unei particule cuantice (liberă) relativiste este funcţie de impuls

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4 . \tag{4.5.1}$$

Folosind priciipiul de corespondenţă

$$p_i \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i} \tag{4.5.2}$$

$$E \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{4.5.3}$$

obţinem

$$p^2 \rightarrow -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \Delta \tag{4.5.4}$$

şi

$$E^2 \longrightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} . \tag{4.5.5}$$

Înlocuind în (4.5.1) obţinem ecuaţia

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(x, y, z, t) = -\hbar^2 c^2 \Delta \Psi(x, y, z, t) + m^2 c^4 \Psi(x, y, z, t) \tag{4.5.6}$$

sau

$$\left[\Box - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \Psi(x, y, z, t) = 0 \tag{4.5.7}$$

unde

$$\Box \equiv -\frac{1}{c} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta \tag{4.5.8}$$

este dalambertianul sistemului (operatorul lui d'Alembert). Folosind notaţia

$$\Box_m = \Box - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \tag{4.5.9}$$

ecuaţia (4.5.7) se mai scrie

$$\Box_m \Psi(\vec{r}, t) = 0 . \tag{4.5.10}$$

Ecuaţia (4.5.7) sau varianta (4.5.10) se numeşte ecuaţia lui Klein-Gordon.

■