Probleme de fizică modernă

Emil Petrescu Daniela Buzatu

30 ianuarie 2005

Cuprins

Capitolul 1

ORIGINILE FIZICII CUANTICE

1.1 Energia şi impulsul fotonului

1.1.1 Să se determine energia şi impulsul unui foton a cărui lungime de undă corespunde :
a. domeniului vizibil al spectrului ($\lambda = 0,6$ μm)
b. radiaţiei X cu lungimea de undă de $0,1$ nm
c. radiaţiei γ cu lungimea de undă de $0,001$ nm

Soluţie

Utilizăm formulele:

$$\begin{aligned} E &= h\nu = h\frac{c}{\lambda} \\ p &= \frac{h}{\lambda} \end{aligned}$$

Rezultă în cele trei cazuri:

$$\begin{array}{lll} E & = & 2,07 \text{ eV} \qquad p = 1,1 \times 10^{-27} \text{ kg m/s} \\ E & = & 12,4 \text{ keV} \qquad p = 6,62 \times 10^{-24} \text{ kg m/s} \\ E & = & 1,24 \text{ MeV} \qquad p = 6,62 \times 10^{-22} \text{ kg m/s} \end{array}$$

1.1.2 Să se calculeze frecvenţa unei radiaţii monocromatice a cărei putere este egală cu $P = 3 \times 10^{-2}$ W şi corespunde la 10^{14} fotoni /secundă.

Soluţie

Energia unui foton este $h\nu$. Puterea este $P = Nh\nu$. Rezultă:

$$\nu = \frac{P}{Nh} = \frac{3 \times 10^{-2}}{10^{14} \times 6,626 \times 10^{-34}} = 4,53 \times 10^{17} \text{ Hz}$$

1.1.3 Să se determine presiunea exercitată de o radiaţie electromagnetică cu intensitatea I, măsurată în J/m^{2}s ce cade normal pe o suprafaţă care o absoarbe în totalitate.

Soluţie

Vom determina legătura dintre intesitatea radiaţiei I şi concentraţia n de fotoni din fluxul luminos. Considerăm un cilindru

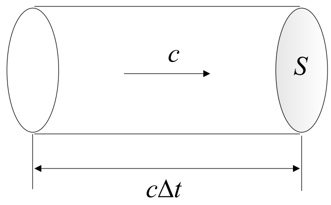

Fig. 1.1

cu lungimea $c\Delta t$ şi secţiunea S în centrul fluxului luminos (vezi Fig. 1.1).

Numărul de fotoni care trec în timpul Δt prin S este egal cu numărul de fotoni din cilindrul considerat:

$$N = nSc\Delta t$$

Energia ce străbate secţiunea S în intervalul Δt este:

$$E = Nh\nu = nSc\Delta th\nu$$

Atunci intensitatea I va fi:

$$I = \frac{E}{S\Delta t} = nch\nu$$

Astfel:

$$n = \frac{I}{ch\nu}$$

Variaţia impulsului unui foton ce este absorbit pe suprafaţa S este h/λ. Atunci, în intervalul de timp Δt variaţia impulsului tuturor fotonilor ce sunt absorbiţi de suprafaţa S este:

$$\Delta P = N\frac{h}{\lambda} = nSc\Delta t\frac{h}{\lambda}$$

Forţa exercitată de aceşti fotoni pe suprafaţa S este:

$$F = \frac{\Delta P}{\Delta t} = nSc\frac{h}{\lambda}$$

Presiunea exercitată de fotoni este:

$$p \;=\; \frac{F}{S} = nc\frac{h}{\lambda} = \frac{I}{c}$$

1.1.4 Să se determine presiunea exercitată de o radiaţie electromagnetică cu intensitatea I ce cade normal pe o suprafaţă care o reflectă în totalitate.

Soluţie

În acest caz variaţia impulsului unui foton este egală cu $2h/\lambda$ datorită faptului că fotonul este reflectat cu 180^o. Atunci:

$$p = 2\frac{I}{c}$$

1.1.5 Să se determine presiunea exercitată de o radiaţie electromagnetică cu intensitatea I care cade pe o suprafaţă care are coeficientul de reflexie η.

Soluţie

Aceasta înseamnă că presiunea este determinată în două moduri:

a. de fotonii care se reflectă şi care reprezintă fracţia η din totalitatea fotonilor. Astfel presiunea exercitată de aceşti fotoni este:

$$p_1 = \eta \frac{2I}{c}$$

b. de fotonii care sunt absorbiţi şi care reprezintă o fracţie $(1-\eta)$ din totalitatea fotonilor. Presiunea exercitată de aceşti fotoni este:

$$p_2 = (1-\eta)\frac{I}{c}$$

Rezultă presiunea totală:

$$p = p_1 + p_2 = (1+\eta)\frac{I}{c}$$

1.1.6 Un fascicul paralel de lumină având intensitatea I se reflectă pe o suprafaţă plană care are coeficientul de reflexie η. Să se calculeze presiunea normală exercitată de fascicul pe această suprafaţă dacă unghiul dintre normala la suprafaţă şi direcţia fasciculului este α.

Soluţie

Viteza normală pe suprafaţă este $c\cos\alpha$. Atunci numărul de fotoni ce cad pe suprafaţa S în timpul Δt este:

$$N' = nSc\cos\alpha\Delta t$$

Dacă fotonul este absorbit, atunci variaţia impulsului pe direcţia normală este $\frac{h}{\lambda}\cos\alpha$, iar dacă fotonul este reflectat pe suprafaţa S atunci variaţia impulsului este $\frac{2h}{\lambda}\cos\alpha$. Variaţia totală a impulsului fotonilor care se reflectă este:

$$\Delta P = \eta N' \frac{2h}{\lambda}\cos\alpha = 2\eta n S c \frac{h}{\lambda}\Delta t \cos^2\alpha$$

Forţa exercitată pe suprafaţa S va fi:

$$F = \frac{\Delta P}{\Delta t} = 2\eta n S c \frac{h}{\lambda}\cos^2\alpha$$

Presiunea exercitată de fotonii reflectaţi va avea expresia:

$$p_1 = \frac{F}{S} = 2\eta n c \frac{h}{\lambda}\cos^2\alpha = \eta\frac{2I}{c}\cos^2\alpha$$

În mod analog se obţine şi expresia pentru presiunea exercitată de fotonii absorbiţi:

$$p_2 = (1-\eta)\frac{I}{c}\cos^2\alpha$$

iar presiunea totală va fi:

$$p = p_1 + p_2 = (1+\eta)\frac{I}{c}\cos^2\alpha$$

1.1.7 Să se arate, pe baza teoriei corpusculare, că pentru radiaţia termică de echilibru este valabilă relaţia: $p = w/3$ (p este presiunea radiaţiei iar w este densitatea volumică de energie).

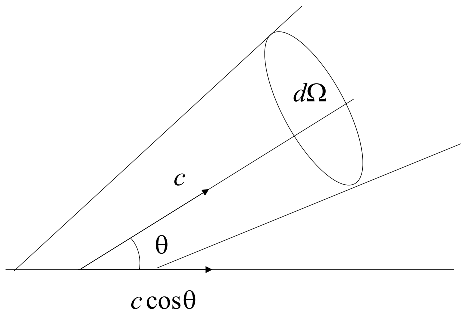

Fig. 1.2

Soluţie

Considerăm radiaţia dintr-o incintă pe pereţii căreia radiaţia se reflectă ($\eta = 1$) (vezi Fig. 1.2). Numărul de fotoni care cad pe unitartea de suprafaţă în timpul dt este:

$$dn_\nu (c\ \cos\theta)\frac{d\Omega}{4\pi}dt$$

unde

$$dn_\nu = \frac{dw_\nu}{h\nu}$$

reprezintă concentraţia fotonilor cu frecvenţa cuprinsă în intervalul $(\nu,\ \nu + d\nu)$, iar dw_ν este densitatea spectrală de energie, adică energia fotonilor cu frecvenţa în intervalul $(\nu,\ \nu + d\nu)$. Deoarece variaţia impulsului unui foton ce se reflectă este $2\frac{h}{\lambda}\cos\theta$, atunci variaţia impulsului tuturor fotonilor ce cad pe unitatea de suprafaţă în timpul dt va fi:

$$dP = \frac{dw_\nu}{h\nu}c\ \cos\theta\frac{d\Omega}{4\pi}dt\frac{2h}{\lambda}\cos\theta$$

Presiunea devine:

$$dp = 2dw_\nu \frac{\cos^2\theta}{4\pi} \sin\theta d\theta d\varphi$$

Pentru a determina presiunea finală (totală) se face integrarea după toate frecvenţele. Deoarece se consideră doar particulele care se îndreaptă spre suprafaţa respectivă integrarea după θ se face între limitele 0 şi π, iar integrarea după φ se face între limitele 0 şi 2π:

$$p = 2\int_0^\infty dw_\nu \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta d\theta \int_o^{2\pi} d\varphi$$

Rezultă:

$$p = \frac{w}{3}$$

1.2 Radiaţia termică

1.2.1 Se consideră două surse (corp negru) de radiaţie termică. Una din ele are temperatura $T_1 = 2500$ K. Să se determine temperatura celeilalte surse dacă lungimea de undă corespunzătoare maximului puterii de emisie este cu $\delta\lambda = 0,5$ μm mai mare ca lungimea de undă corespunzătoare maximului sursei primare. Se cunoaşte constanta lui Wien $A = 0,2898 \times 10^{-2}$ mK.

Soluţie

Se pun condiţiile:

$$\lambda T_1 = (\lambda + \delta\lambda)T_2 = A$$

Din cele două egalităţi rezultă:

$$\left(\frac{A}{T_1} + \delta\lambda\right) T_2 = A$$

şi

$$T_2 = \frac{AT_1}{A + T_1\delta\lambda} = 1747\ ^\circ\mathrm{C}$$

1.2.2 O bilă cu diametrul d se află într-un recipient vidat ai cărui pereţi sunt menţinuţi la o temperatură apropiată de zero absolut. Temperatura iniţială a bilei este T_o. Dacă se asimilează suprafaţa bilei cu un corp negru, se cere timpul în care temperatura scade de n ori. Se consideră că bila este confecţionată dintr-un material de densitate ρ şi cădură specifică c.

Soluţie

Puterea de emisie a unui corp negru este:

$$R(T) = \frac{1}{S}\left(-\frac{d\varepsilon}{dt}\right) = \sigma T^4$$

unde ε este energia internă a bilei, iar σ este constanta Stefan-Boltzmann. Ţinând cont că $S = \pi d^2$, energia emisă în unitatea de timp este:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\sigma T^4 \pi d^2$$

Dar, energia internă a bilei poate fi exprimată în funcţie de cădura sa specifică prin relaţia:

$$\varepsilon = mcT = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{d}{2}\right)^3 \rho cT$$

Dacă vom deriva ultima relaţie în raport cu timpul şi vom ţine cont de expresia energiei emise în unitatea de timp, se obţine:

$$\frac{4\pi}{3}\left(\frac{d}{2}\right)^3 \rho c\frac{dT}{dt} = -\sigma T^4 \pi d^2$$

Rezultă ecuaţia diferenţială:

$$dt = -\frac{d\rho c}{6\sigma}\frac{dT}{T^4}$$

care prin integrare

$$\int_0^t dt \quad = \quad -\frac{d\rho c}{6\sigma}\int_{T_o}^{T_o/n}\frac{dT}{T^4}$$

conduce la:

$$t \quad = \quad \frac{(n^3-1)\, d\rho c}{18\sigma T_o^3}$$

1.2.3 Să se calculeze lungimea de undă corespunzătoare intensităţii maxime din spectrul unui corp negru, ştiind că puterea de emisie a acestuia este $R = 5,67$ W/cm^2. Se cunoaşte constanta

Wien $A = 0,2898 \times 10^{-2}$ mK şi $\sigma = 5,67 \times 10^{-8}$ Wm^{-2}K^{-4}

Soluţie

Conform legii Stefan-Boltzmann:

$$R = \sigma T^4$$

rezultă temperatura

$$T = \sqrt[4]{\frac{R}{\sigma}} = 10^3 \text{ K}$$

Conform legii de deplasare a lui Wien:

$$\lambda_m T = A$$

rezultă lungimea de undă corespunzătoare intensităţii maxime:

$$\lambda_m = \frac{A}{T} = 2,89 \times 10^{-6} \text{ m}$$

1.2.4 Să se arate că pentru valori mici ale raportului ω/T formula lui Planck se reduce la formula lui Rayleigh-Jeans, iar pentru valori mari ale lui ω/T la formula lui Wien.

Soluţie

Utilizăm formula lui Planck pentru densitatea spectrală a energiei electromagnetice:

$$\rho_\omega(\omega, T) = c_1 \frac{\omega^3}{e^{c_2\omega/T} - 1}$$

unde c_1 şi c_2 sunt constante.

a. Pentru valori mici ale lui ω/T dezvoltăm exponenţiala $\exp c_2\omega/T$ în serie Taylor şi menţinem doar primi doi termeni:

$$e^{c_2\omega/T} \simeq 1 + c_2\frac{\omega}{T}$$

ceea ce conduce la următoarea expresie pentru formula Planck:

$$\rho_\omega(\omega, T) \simeq c_1\frac{\omega^3}{1 + c_2\omega/T - 1} = c\omega^2 T$$

b. Pentru valori mari ale lui ω/T vom avea:

$$e^{c_2\omega/T} \quad \gg \quad 1$$

şi densitatea spectrală devine:

$$\rho_\omega(\omega, T) \quad \simeq \quad c_1\omega^3 e^{-c_2\omega/T}$$

1.2.5 Să se arate că formula lui Rayleigh-Jeans nu este compatibilă cu legea Stefan-Boltzmann.

Soluţie

Densitatea w a energiei electromagnetice pentru întreg spectrul este:

$$w = \int_0^\infty \rho_\omega(\omega, T)d\omega$$

unde

$$\rho_\omega(\omega, T) = c\omega^2 T$$

Se obţine:

$$w = \int_0^\infty c\omega^2 T d\omega = \infty$$

ceea ce ne arată că formula lui Rayleigh-Jeans nu este compatibilă cu legea Stefan-Boltzmann $w = \sigma T^4$, fiind valabilă doar în domeniul frecvenţelor mici.

1.2.6 Să se stabilească relaţiile dintre densitatăţile spectrale de energie a câmpului electromagnetic $\rho_\omega(\omega, T)$ şi $\rho_\lambda(\lambda, T)$. Să se particularizeze pentru formula lui Planck.

Soluţie

Exprimăm diferenţiala densităţii spectrale de energie:

$$dw = \rho_\omega(\omega, T)d\omega \quad = \quad -\rho_\lambda(\lambda, T)d\lambda$$

Atunci:

$$\rho_\lambda(\lambda, T) \quad = \quad -\rho_\omega(\omega, T)\frac{d\omega}{d\lambda}$$

Dar:

$$\omega = 2\pi\nu \quad = \quad \frac{2\pi c}{\lambda}$$

şi

$$\frac{d\omega}{d\lambda} \quad = \quad -\frac{2\pi c}{\lambda^2}$$

Atunci:

$$\rho_\lambda(\lambda, T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2}\rho_\omega(\omega, T)$$

Pornind de la formula lui Planck:

$$\rho_\omega(\omega, T) = c_1 \frac{\omega^3}{e^{c_2\omega/T} - 1} \quad \text{cu} \quad \omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

se obţine:

$$\begin{aligned}
\rho_\lambda(\lambda, T) &= \frac{2\pi c}{\lambda^2} \frac{c_1 \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3}{e^{c_2 \frac{2\pi c}{\lambda}/T} - 1} \\
\rho_\lambda(\lambda, T) &= c_1' \frac{\lambda^{-5}}{e^{c_2'/(\lambda T)} - 1}
\end{aligned}$$

1.2.7 Să se stabilească relaţia dintre temperatura şi lungimea de undă λ_m pentru care $\rho_\lambda(\lambda, T)$ - densitatea spectrală de energie, dată de formula lui Planck, este maximă.

Soluţie

Considerăm:

$$\rho_\lambda(\lambda, T) = c_1' \frac{\lambda^{-5}}{e^{c_2'/(\lambda T)} - 1}$$

unde c_1' şi c_2' sunt constante. Prin efectuarea substituţiei

$$\xi = \frac{c_2'}{\lambda T}$$

va rezulta:

$$\rho(\xi) = c_1'' \frac{\xi^5}{e^\xi - 1}$$

Punem condiţia de maxim a acestei funcţii:

$$\frac{d}{d\xi}\left(\frac{\xi^5}{e^\xi - 1}\right) = 0$$

$$\frac{5\xi^4(e^\xi - 1) - e^\xi \xi^5}{(e^\xi - 1)^2} = 0$$

adică:

$$5(\xi^5 - 1) - \xi e^\xi = 0$$

Această ultimă ecuaţie este satisfăcută pentru $\xi \simeq 4,96$, adică:

$$\lambda T = const$$

ceea ce reprezintă legea de deplasare Wien.

1.2.8 Dacă se răceşte un corp negru, lungimea de undă corespunzătoare maximului densităţii spectrale energetice $\rho_\lambda(T)$ se deplasează cu 3000 Å. Se cere să se determine cu câte grade a scăzut temperatura corpului dacă temperatura iniţială a fost 1800^o C. Se cunoaşte constanta Wien $A = 0,2898 \times 10^{-2}$ mK.

Soluţie

Considerând legea deplasării Wien scrisă pentru cele două temperaturi T_o şi $T_o - \Delta T$:

$$\begin{aligned} \lambda_o T_o &= A \\ (\lambda_o + \Delta\lambda)(T_o - \Delta T) &= A \end{aligned}$$

rezultă:

$$\begin{aligned}\Delta T &= \frac{T_o \Delta\lambda}{\lambda_o + \Delta\lambda} = \frac{T_o \Delta\lambda}{\frac{A}{T_o} + \Delta\lambda} \\ \Delta T &= 366\ K\end{aligned}$$

1.3 Efect fotoelectric

1.3.1 Să se arate, cu ajutorul legii conservării impulsului şi a energiei, că un electron liber nu poate absorbi un foton.

Soluţie

Presupunem că fotonul este absorbit de electron. Atunci electronul se va pune în mişcare cu viteza v, iar masa electronului va deveni:

$$m = \frac{m_o}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Impulsul şi energia electronului vor avea expresiile:

$$\begin{aligned}p &= mv = \frac{m_o v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ E &= mc^2 = \frac{m_o c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\end{aligned}$$

Vom scrie legile de conservare ale energiei şi impulsului pentru procesul de absorbţie:

$$\begin{aligned}h\nu &= \frac{m_o c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_o c^2 \\ \frac{h\nu}{c} &= \frac{m_o v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\end{aligned}$$

adică, energia fotonului absorbit este egală cu energia cinetică a electronului (care este diferenţa dintre energia totală şi energia de repaus a acestuia). Din cele două legi de conservare rezultă:

$$\frac{m_o vc}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{m_o c^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - m_o c^2$$

Rezultă:

$$1 - \frac{v}{c} = \sqrt{1-v^2/c^2}$$

Atunci:

$$\frac{v}{c} = 0 \quad \text{sau} \quad \frac{v}{c} = 1$$

Nici una din aceste două situaţii nu se poate obţine din punct de vedere fizic, deoarece prin absorbţia unui foton electronul nu poate rămâne în repaus şi nici nu poate căpăta o viteză egală cu viteza luminii.

1.3.2 O bilă de cupru în stare electrică neutră, independentă de alte corpuri, este iradiată cu lumină monocromatică având lungimea de undă $\lambda = 0,2$ μm. Până la ce potenţial maxim se va încărca bila pierzând fotoelectroni? Lucrul de extracţie al cuprului este egal cu $L_{extr} = 4,47$ eV. ($h = 6,626 \times 10^{=34}$ Js)

Soluţie

Prin pierdere de fotoelectroni bila de cupru se încarcă la un anumit potenţial. La limită, energia electronului necesară pentru a învinge forţa de atracţie electrostatică şi a efectua lucrul mecanic de extracţie este:

$$h\frac{c}{\lambda} = L_{extr} + eU$$

Rezultă:

$$U = \frac{hc}{\lambda} - \frac{L_{extr}}{e} = 1,74 \text{ V}$$

1.3.3 Pe o suprafaţă de aluminiu cade un fascicul de fotoni cu $\lambda = 200$ nm. Ştiind că lucrul de extracţie al aluminiului este egal cu $L_{extr} = 4,2$ eV, să se afle:
a. energia cinetică a celui mai rapid fotoelectron
b. tensiunea de stopare
c. lungimea de undă de prag pentru aluminiu

Soluţie

a. Legea de conservare a energiei pentru efectul fotoelectric se scrie:

$$\frac{hc}{\lambda} = L_{extr} + E_{c,max}$$

Rezultă:

$$E_{c,max} = \frac{hc}{\lambda} - L_{extr} = 2 \text{ eV}$$

b. Tensiunea electrică de stopare este tensiunea care anulează curentul fotoelectric:

$$eU_o = E_{c,max}$$

Rezultă:

$$U_o = \frac{1}{e}\left(\frac{hc}{\lambda} - L_{extr}\right) = 2\ \mathrm{V}$$

c. La pragul de absorbţie:

$$h\nu_p \quad = \quad L_{extr} \quad \text{sau} \quad \frac{hc}{\lambda_p} = L_{extr}$$

Rezultă:

$$\lambda_p \quad = \quad \frac{hc}{L_{extr}} = 296\ \mathrm{nm}$$

1.3.4 Suprafaţa unui metal oarecare este iluminată cu o radiaţie având lungimea de undă $\lambda = 3500$ Å. Alegând o anumită diferenţă de potenţial, fotocurentul este anulat. Micşorând lungimea de undă a radiaţiei cu 500 Å, diferenţa de potenţial de frânare a trebuit să fie mărită cu $\Delta U = 0,59$ eV pentru a anula din nou fotocurentul. Cunoscând constanta Planck $h = 6,626 \times 10^{-34}$ Js, să se determine sarcina electronului.

Soluţie

În cele două situaţii, conservarea energiei este:

$$\begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} &= L_{extr} + eU \\ \frac{hc}{\lambda - \Delta\lambda} &= L_{extr} + e(U + \Delta U) \end{aligned}$$

Rezultă:

$$e = \frac{hc\Delta\lambda}{\lambda(\lambda - \Delta\lambda)\Delta U} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

1.3.5 Lungimea de undă de prag pentru un metal oarecare este egală cu $\lambda_p = 2700$ Å. Să se determine:
a. lucrul de extracţie a unui electron din acel metal
b. viteza maximă a electronilor emişi din metalul bombardat cu radiaţie electromagnetică cu $\lambda = 1800$ Å
c. energia cinetică a acestor electroni
Se cunosc $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C şi $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg.

Soluţie

a.

$$L_{extr} = \frac{hc}{\lambda_p} = 4,6 \text{ eV}$$

b.

$$h\nu = L_{extr} + E_{c,max} = L_{extr} + \frac{m_e v_{max}^2}{2}$$

Rezultă:

$$v_{max} = \sqrt{\frac{2}{m_e}\left(\frac{hc}{\lambda} - L_{extr}\right)} = 9 \times 10^5 \text{ m/s}$$

c.

$$E_{cin} = \frac{1}{2} m v_{max}^2 = 2,3 \text{ eV}$$

1.3.6 Iluminând succesiv suprafaţa unui metal cu radiaţiile electromagnetice $\lambda_1 = 0,35$ μm şi $\lambda_2 = 0,54$ μm, se constată că viteza maximă a electronilor s-a micşorat de $\eta = 2$ ori. Să se determine lucrul de extracţie din metal.

Soluţie

Legea de conservare a energiei în cele două situaţii este:

$$\begin{aligned} \frac{mv_1^2}{2} &= \frac{hc}{\lambda_1} - L_{extr} \\ \frac{mv_2^2}{2} &= \frac{hc}{\lambda_2} - L_{extr} \end{aligned}$$

Deoarece $v_1/v_2 = \eta$, atunci:

$$\frac{v_1^2}{v_2^2} = \frac{\lambda_2(hc - L_{extr}\lambda_1)}{\lambda_1(hc - L_{extr}\lambda_2)} = \eta^2$$

Rezultă:

$$L_{extr} = \frac{hc(\eta^2\lambda_1 - \lambda_2)}{(\eta^2 - 1)\lambda_1\lambda_2} = 1,9 \text{ eV}$$

1.3.7 Să se calculeze viteza maximă a fotoelectronilor emişi de o suprafaţă argintată, dacă aceasta se iradiază cu:
a. radiaţii ultraviolete ($\lambda_1 = 0,155$ μm)
b. radiaţii γ ($\lambda_2 = 0,01$Å)

Se cunoaţe lucrul de extracţie $L_{extr} = 4,7$ eV şi masa de repaus a electronului $m_o = 9,1 \times 10^{-31}$ kg

Soluţie

Considerăm fenomenul din punct de vedere nerelativist. Relaţia de conservare a energiei se scrie:

$$\frac{m_o v^2}{2} = \frac{hc}{\lambda} - L_{extr}$$

Rezultă:

$$v = \sqrt{\frac{2}{m_o}\left(\frac{hc}{\lambda} - L_{extr}\right)}$$

Dacă $\lambda = \lambda_1 = 0,155$ μm atunci viteza este egală cu

$$v = 1,08 \times 10^6 \text{ m/s} \ll 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

ceea ce ne arată că, pentru radiaţia ultravioletă, tratarea nerelativistă este corectă.

Dacă $\lambda = \lambda_2 = 0,01$ Å atunci, conform aceluiaşi raţionament, viteza devine:

$$v = 4,4 \times 10^{17} \text{ m/s} > 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

ceea ce este imposibil, astfel că este necesară o tratare relativistă a fenomenului. Legea de conservare a energiei se va scrie:

$$\frac{hc}{\lambda_2} - L_{extr} = E_c = \frac{m_o c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_o c^2$$

Rezultă:

$$v = c\sqrt{1 - \frac{m_o^2 c^4}{\left(\frac{hc}{\lambda_2} - L_{extr} + m_o c^2\right)^2}} = 2,86 \times 10^8 \text{m/s}$$

1.4 Efect Compton

1.4.1 Un fascicul de radiaţii X, cu lungimea de undă $\lambda_o = 0,1$ nm este împrăştiat pe un bloc de carbon. Să se determine:
a. energia fotonilor incidenţi
b. lungimea de undă a radiaţiei difuzate la $\theta = 90^o$ faţă de direcţia fotonului incident
c. energia cinetică a electronului de recul şi unghiul făcut de direcţia sa de mişcare cu direcţia fotonului incident

Soluţie

a. Energia fotonului incident este:

$$\varepsilon = \frac{hc}{\lambda_o} = 12400 \text{ eV} = 12,4 \text{ keV}$$

b.

$$\Delta\lambda = 2\frac{h}{m_o c}\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{h}{m_o c} = \Lambda_o = 2,43 \times 10^{-12} \text{ m}$$

Variaţia lungimii de undă pentru fotonul împrăştiat este egală cu lungimea de undă Compton.

c. Din legea conservării energiei:

$$\frac{hc}{\lambda_o} + m_o c^2 = \frac{hc}{\lambda_o + \Delta\lambda} + mc^2$$

energia cinetică este:

$$E_c = mc^2 - m_o c^2 = \frac{hc}{\lambda_o} - \frac{hc}{\lambda_o + \Delta\lambda} = 295 \text{ eV}$$

1.4.2 Să se arate că energia fotonului împrăştiat la $\theta = 90^o$ prin efect Compton nu poate depăşi energia de repaus a electronului $m_o c^2$.

Soluţie

Din relaţia Compton:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_o c}(1 - \cos\theta) = \frac{h}{m_o c}$$

Energia radiaţiei împrăştiate la 90^o este:

$$\varepsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda_o + \Delta\lambda} = \frac{hc}{\lambda_o + \frac{h}{m_o c}}$$

După cum se observă, această energiei creşte cu scăderea lui λ_o. La limită:

$$\lim_{\lambda_o \to 0} \varepsilon = \lim_{\lambda_o \to 0} \frac{hc}{\lambda_o + \frac{h}{m_o c}} = m_o c^2$$

1.4.3 Să se determine lungimea de undă a fotonului incident dacă se ştie că fotonul împrăştiat are energia egală cu energia cinetică a electronului de recul şi se mişcă pe direcţii care fac între ele un unghi de 90^o. (Fig. 1.3)

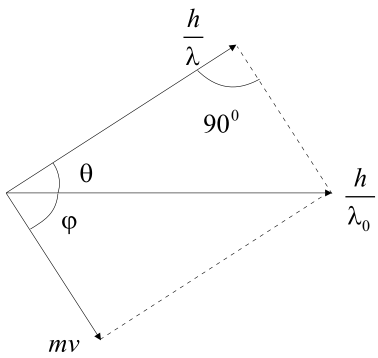

Fig. 1.3

Soluţie

Legea de conservare a energiei este:

$$\frac{hc}{\lambda_o} + m_o c^2 = \frac{hc}{\lambda} + mc^2$$

Rezultă energia cinetică:

$$E_c = mc^2 - m_o c^2 = \frac{hc}{\lambda_o} - \frac{hc}{\lambda}$$

Punând condiţia:

$$E_c = \frac{hc}{\lambda}$$

rezultă:

$$\lambda = 2\lambda_o$$

Din Fig. 1.3 se observă că:

$$\cos\theta = \frac{h/\lambda}{h/\lambda_o} = \frac{\lambda_o}{\lambda} = \frac{1}{2}$$

de unde, pentru $\theta = 60^o$ rezultă:

$$\Delta\lambda = \lambda_o = 2\Lambda \sin^2\frac{\theta}{2} = 1,21 \text{ pm}$$

1.4.4 Să se determine unghiul sub care este împrăştiat electronul de recul şi energia acestuia (vezi Fig. 1.4) într-o experienţă de difuzie Compton.

Soluţie

Scriem conservarea impulsului pe o direcţie paralelă cu direcţia impulsului incident

$$\frac{m_o v}{\sqrt{1-(v/c)^2}}\cos\varphi = \frac{h\nu_o}{c} - \frac{h\nu}{c}\cos\theta \tag{1.1}$$

şi pe o direcţie perpendiculară pe direcţia fascicolului incident

$$\frac{m_o v}{\sqrt{1-(v/c)^2}}\sin\varphi = \frac{h\nu}{c}\sin\theta$$

Dacă se împart cele două relaţii se obţine:

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{\nu\sin\theta}{\nu_o - \nu\cos\theta} = \frac{\lambda_o\sin\theta}{\lambda - \lambda_o\cos\theta} = \frac{\lambda_o\sin\theta}{\lambda_o + \Delta\lambda - \lambda_o\cos\theta}$$

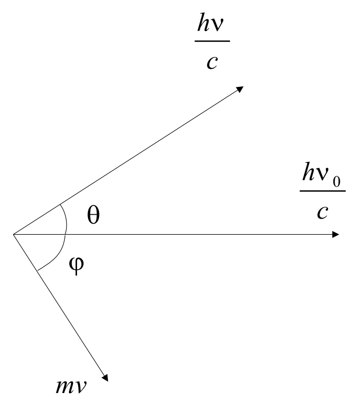

Fig. 1.4

Atunci:

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{\operatorname{ctg}\frac{\theta}{2}}{1+\Lambda/\lambda_o}$$

În ultima relaţie de mai sus s-a ţinut cont de formula Compton $\Delta\lambda = 2\Lambda\sin^2\theta/2$. Energia cinetică a electronului va fi:

$$E_c = mc^2 - m_oc^2 = h\left(\frac{c}{\lambda_o} - \frac{c}{\lambda}\right)$$

1.4.5 Un foton cu lungimea de undă $\lambda_o = 6$ nm este difuzat sub un unghi de 90^o pe un electron aflat în repaus. Să se determine:
a. lungimea de undă a fotonului difuzat
b. energia cinetică a electronului de recul

Soluţie

a. Din relaţia Compton obţinem:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_o c}\sin^2\theta/2 = 2,43\times 10^{-12}\mathrm{m}$$

Rezultă:

$$\lambda = \lambda_o + \Delta\lambda = 6,00243\times 10^{-9}\ \mathrm{m}$$

b. Din relaţia de conservare a energiei:

$$\frac{hc}{\lambda_o} + m_o c^2 = \frac{hc}{\lambda} + mc^2$$

rezultă energia cinetică a electronului de recul:

$$E_c = \frac{hc}{\lambda_o} - \frac{hc}{\lambda_o + \Delta\lambda} = 1,34\times 10^{-20}\ \mathrm{J} = 0,084\ \mathrm{eV}$$

1.4.6 Un fascicul de raze X monoenergetice cade pe un corp împrăştietor. Lungimea de undă a radiaţiilor împrăştiate sub unghiurile $\theta_1 = 120^o$ şi $\theta_2 = 60^o$ se află în raportul $\eta = 2$. Ştiind că împrăştierea se face pe electroni liberi, să se determine lungimea de undă a radiaţiilor incidente.

Soluţie

Lungimile de undă ale fotonilor împrăştiaţi sunt:

$$\lambda_1 = \lambda_o + 2\Lambda \sin^2 \theta_1/2$$
$$\lambda_2 = \lambda_o + 2\Lambda \sin^2 \theta_2/2$$

Dar:

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \frac{\lambda_o + 2\Lambda \sin^2 \theta_1/2}{\lambda_o + 2\Lambda \sin^2 \theta_2/2} = \eta$$

Rezultă:

$$\lambda_o = \frac{2\Lambda(\sin^2 \theta_2/2 - \sin^2 \theta_1/2)}{\eta - 1} = 0,607 \times 10^{-12}\mathrm{m}$$

1.5 Comportarea ondulatorie a microparticulelor

1.5.1 Să se determine lungimea de undă de Broglie:
a. pentru un neutron cu energia de $0,025$ eV
b. corespunzătoare vitezei termice a moleculelor de hidrogen aflat la temperatura $t = 20^o$ C
Se cunosc masele protonului şi neutronului $m_p \simeq m_n \simeq 1,67 \times 10^{-27}$ kg.

Soluţie

a. Lungimea de undă se calculează cu relaţia lui de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{unde} \quad p = \sqrt{2mE}$$

Astfel:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_nE}} = 1,81 \text{ Å}$$

b. În cazul moleculelor de hidrogen energia cinetică medie a acestora este:

$$E_c = \frac{3kT}{2} \quad \text{unde} \quad k = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

Atunci, lungimea de undă corespunzătoare va fi:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3m_pkT}} = 1,47 \times 10^{-10} \text{ m}$$

1.5.2 Ţinând cont de dualismul undă-corpulscul, cum poate fi interpretată condiţia de cuantificare Bohr a momentului cinetic?

Soluţie

Condiţia de cuantificare Bohr a momentului cinetic este:

$$mvr = n\hbar$$

Impulsul are expresia:

$$p = mv = \frac{n\hbar}{r} \equiv \frac{h}{\lambda}$$

şi

$$n = \frac{2\pi r}{\lambda}$$

Rezultă că într-o orbită Bohr este cuprins un număr întreg de lungimi de undă de Broglie.

1.5.3 Să se determine dependenţa dintre lungimea de undă λ, măsurată în Å a undei asociate unui fascicul de electroni acceleraţi sub o tensiune U (cunoscută) măsurată în volţi.

Soluţie

Lungimea de undă asociată particulei este:

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad \text{unde} \qquad p = \sqrt{2mE}$$

Deoarece $E = eU$ rezultă pentru lungimea de undă:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{12,2}{\sqrt{U}}\ \text{Å}$$

1.5.4 Pentru ce valoare a energiei cinetice eroarea relativă în determinarea lungimii de undă de Broglie, va fi de 1%, atunci când problema este tratată nerelativist:
a. pentru un electron
b. pentru un neutron

Soluţie

Relaţia nerelativistă pentru lungimea de Broglie este:

$$\lambda_o = \frac{h}{\sqrt{2m_oE_c}}$$

În cazul relativist, energia cinetică are expresia:

$$E_c = mc^2 - m_oc^2$$

şi

$$m = \frac{E_c + m_o c^2}{c^2} = \frac{E_c}{c^2} + m_o$$

Deoarece

$$m = \frac{m_o}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

atunci viteza şi impulsul particulei se pot scrie:

$$\begin{aligned} v &= \frac{c\sqrt{E_c(2m_o c^2 + E_c)}}{(E_c + m_o c^2)} \\ p &= mv = \frac{E_c + m_o c^2}{c^2} \cdot \frac{c\sqrt{E_c(2m_o c^2 + E_c)}}{(E_c + m_o c^2)} \end{aligned}$$

$$p = \sqrt{2m_o E_c} \cdot \sqrt{\frac{E_c}{2m_o c^2} + 1}$$

Atunci lungimea de undă, conform definiţiei de Broglie va fi:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_o E_c} \cdot \sqrt{\frac{E_c}{2m_o c^2} + 1}} = \frac{\lambda_o}{\sqrt{\frac{E_c}{2m_o c^2} + 1}}$$

unde λ_o este lungimea de undă nerelativistă.

Eroarea relativă este, conform definiţiei:

$$\varepsilon = \frac{|\Delta\lambda|}{\lambda} = \frac{\lambda_o - \lambda}{\lambda} = \frac{\lambda_o}{\lambda} - 1$$

Astfel, pe baza relaţiilor anterioare se poate exprima eroarea relativă în funcţie de energia cinetică a particulei:

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{E_c}{2m_o c^2} + 1}$$

Rezultă:

$$\varepsilon^2 + 2\varepsilon + 1 \quad = \quad \frac{E_c}{2m_o c^2} + 1$$

Dacă $\varepsilon = 0,01$, şi neglijăm termenul în ε^2 vom obţine pentru energia cinetică expresia:

$$E_c = 4m_o c^2 \cdot \varepsilon$$

Astfel, pentru electron:

$$E_c(\text{eV}) = 20,475 \text{ keV}$$

iar pentru neutron:

$$E_c(eV) = 37,57 \text{ MeV}$$

1.5.5 Într-o experienţă Davisson şi Germer s-a trimis un fascicul de electroni acceleraţi sub o tensiune constantă de 15 V, pe un sistem de plane atomice aflate la distanţa $d = 0,233$ nm unul faţă de celălalt, ale unui cristal de aluminiu. Să se calculeze unghiul sub care fasciculul este difractat pe suprafaţa cristalului.

Soluţie

Condiţia de difracţie Bragg este:

$$2d\sin\theta = k\lambda \qquad k = \text{întreg}$$

iar

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}$$

Atunci:

$$\sin\theta_k = k\frac{h}{2d\sqrt{2meU}}$$

Pentru $k = 1$

$$\sin\theta_1 = 0,68$$

Pentru $k = 2$ ar rezulta că $\sin\theta_2 > 1$, ceea ce înseamnă că maximul de ordin doi nu poate fi observat.

1.5.6 Un fascicul monoenergetic de electroni cu energia cinetică $E_c = 48$ eV cade pe suprafaţa unui monocristal de Ni. Primul maxim de difracţie se obţine pe direţia $\theta = 18^o$ faţă de normala la cristal. Să se calculeze lungimea de undă de Broglie asociată electronilor:
a. teoretic cu ajutorul formulei de Broglie
b. experimental cu ajutorul formulei Bragg, ştiind că distanţa dintre planele cristaline este $d = 0,926$ Å.

Soluţie

a. Energia de repaus a electronului este $E_o = m_oc^2 = 511$ keV. Deoarece $E_c \ll E_o$, putem considera electronii ca fiind particule nerelativiste. Atunci:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}} = 1,77 \times 10^{-10} \text{ m}$$

b. Din formula Bragg:

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

Pentru $n = 1$ se obţine:

$$\lambda = 2d \sin\theta = 1,76 \times 10^{-10} \text{ m}$$

1.5.7 În cazul unui fascicul de electroni emişi de un tun electronic, ce tensiuni de accelerare sunt necesare pentru a pune în evidenţă comportarea ondulatorie a electronilor prin difracţie pe un sistem de plane cristaline distanţate cu $d = 0,3$ nm.

Soluţie

Pentru a pune în evidenţă comportarea ondulatorie a electronilor este necesar ca lungimea de undă să fie de ordinul de mărime a constantei reţelei cristaline:

$$\lambda \sim d$$

Dar lungimea de undă o vom exprima conform relaţiei lui de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{unde} \quad p = mv$$

Dacă electronii sunt acceleraţi la o diferenţă de potenţial U, atunci:

$$\frac{mv^2}{2} = eU$$

astfel că viteza este:

$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$$

Impulsul poate fi exprimat astfel:

$$p = \sqrt{2meU}$$

Înlocuind λ cu d vom obţine:

$$d = \frac{h}{\sqrt{2meU}}$$

Atunci:

$$U = \frac{1}{2me}\left(\frac{h}{d}\right)^2 \sim 16,7 \text{ V}$$

1.5.8 Un fascicul îngust de electroni monoenergetici cade sub un unghi $\theta = 30^o$ pe suprafaţa unui monocristal de aluminiu. Distanţa dintre două plane atomice ale acestui cristal este $d = 0,2$ nm. Pentru o anumită tensiune de accelerare U_o se observă un maxim. Să se determine tensiunea U_o ştiind că maximul următor se produce când tensiunea de accelerare se măreşte de $\eta = 2,25$ ori.

Soluţie

Condiţiile de obţinere a celor două maxime în cele două cazuri sunt:

$$\begin{aligned} 2d\sin\theta &= k\frac{h}{\sqrt{2meU_o}} \\ 2d\sin\theta &= (k+1)\frac{h}{\sqrt{2meU_o\eta}} \end{aligned}$$

Eliminând pe k între cele două relaţii rezultă:

$$U_o = \frac{h^2}{8med^2 \sin^2 \theta(\sqrt{\eta} - 1)^2} = 150 \text{ V}$$

1.6 Relaţiile de incertitudine

1.6.1 Să se determine, pornind de la relaţiile de incertitudine, o evaluare a mărimii energiei potenţiale medii a unui nucleon într-un nucleu (considerăm nucleul ca fiind o sferă cu diametrul $d = 9 \times 10^{-13}$ cm, iar masa nucleonului $m_n = 1,67 \times 10^{-27}$kg).

Soluţie

Mărimea impulsului nucleonului în interiorul nucleului este de ordinul:

$$p \sim \frac{h}{d}$$

Deoarece energia cinetică $E_c = p^2/2m$, atunci:

$$E_c \sim \frac{1}{2m_n}\left(\frac{h}{d}\right)^2 \sim 10 \text{ MeV}$$

Deoarece nucleonul este legat în nucleu, energia potenţială medie trebuie să fie negativă şi în valoare absolută mai mare decât energia cinetică:

$$E_p \sim -10 \text{ MeV}$$

1.6.2 Un microscop foloseşte electroni pentru a putea distinge detalii de 1 μm. Care este ordinul de mărime al vitezei electronilor.

Soluţie

Din relaţia de incertitudine:

$$p \sim \frac{h}{\Delta x} \qquad \text{unde} \qquad \Delta x = 1\ \mu\text{m}$$

Deoarece $p = mv$ rezultă:

$$v \ \sim \ \frac{h}{m\Delta x} \simeq 7 \times 10^3 \text{ m/s}$$

Astfel, ordinul de mărime al vitezei este:

$$v \ \sim \ 10^4 \text{ m/s}$$

1.6.3 Să se evalueze energia minimă posibilă a unui electron într-un atom de hidrogen, precum şi raza regiunii în care electronul se află, plecând de la relaţiile de incertitudine.

Soluţie

Ţinând cont de relaţia de incertitudine dintre impuls şi poziţie:

$$p \sim \Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta r} \sim \frac{\hbar}{r}$$

Energia totală are expresia:

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

Ţinând cont de evaluarea impulsului, rezultă evaluarea pentru energia totală:

$$E \simeq \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

Pentru determinarea energiei minime vom pune condiţia:

$$\frac{dE}{dr} = -\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r^2} = 0$$

Rezultă:

$$r = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_o}{me^2} = 0,529 \times 10^{-10}\mathrm{m}$$

Astfel, energia minimă este:

$$E_{min} = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_o^2\hbar^2} = -13,6 \quad \mathrm{eV}$$

1.6.4 O particulă de masă m se deplasează într-un câmp potenţial unidimensional astfel că energia potenţială este $E_p = kx^2/2$. Să se evalueze energia minimă posibilă a particulei în acest câmp pornind de la relaţiile de incertitudine ale lui Heisenberg.

Soluţie

Considerăm:

$$p \sim \Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \sim \frac{\hbar}{x}$$

Atunci, energia totală a particulei va fi:

$$\begin{aligned} E &= E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \\ E &= \frac{\hbar^2}{2mx^2} + \frac{kx^2}{2} \end{aligned}$$

Punem condiţia de minim a energiei:

$$\frac{dE}{dx} = 0 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{mx^3} + kx = 0$$

Rezultă:

$$x^4 = \frac{\hbar^2}{mk}$$

Atunci energia minimă este:

$$E = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}} = \hbar\omega = h\nu$$

Observaţie: Calculul exact realizat cu ajutorul mecanicii cuantice conduce la o energie minimă egală cu $h\nu/2$.

1.7 Modelul Bohr

1.7.1 Să se determine razele orbitelor Bohr pentru atomul de hidrogen. Se cunosc: constanta Planck $h = 6,626 \times 10^{-34}$ Js; sarcina electronului $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C şi masa electronului $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg.

Soluţie

În sistemul de referinţă legat de electronul care se roteşte în jurul nucleului, forţa centrifugă este egală cu forţa de atracţie electrostatică:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r^2}$$

Condiţia de cuantificare a momentului cinetic pentru electron este:

$$pr = n\hbar$$

Se obţine următorul sistem de ecuaţii:

$$v^2 r = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o m_e}$$
$$r m_e v = n\frac{h}{2\pi}$$

De aici rezultă:

$$v = n\hbar\frac{1}{m_e r}$$

şi

$$r_n = n^2\frac{4\pi\varepsilon_o \hbar^2}{m_e e^2}$$

Pentru cazul $n = 1$ se obţine valoarea primei orbite Bohr din atomul de hidrogen:

$$a_o = r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_e e^2} = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Cea de-a n-a orbită Bohr are raza:

$$r_n = n^2 a_o$$

1.7.2 Să se determine vitezele pe orbitele Bohr, pentru atomul de hidrogen.

Soluţie

Vom ţine cont de rezultatul de la problema precedentă şi vom exprima vitezele v_n:

$$v_n = n\hbar\frac{1}{m_e r_n} = \frac{e^2}{2\varepsilon_o h}\frac{1}{n} = \frac{v_1}{n}$$

unde:

$$v_1 = \frac{e^2}{2\varepsilon_o h} = 2,18 \times 10^6 \text{ m/s}$$

Vom exprima în continuare viteza în funcţie de raza primei orbite Bohr a_o:

$$v_n = n\frac{h}{2\pi}\frac{1}{m_e(a_o n)}$$

$$v_n = \frac{\hbar}{m_e a_o}\frac{1}{n^2}$$

1.7.3 Să se calculeze de câte ori se va mări raza orbitei electronului unui atom de hidrogen care se găseşte în starea fundamentală, dacă este excitat cu o cuantă (foton) de energie $E_f = 12,09$ eV. Se cunoaşte energia electronului aflat pe prima orbită Bohr $E = -13,6$ eV.

Soluţie

Conform postulatului II al lui Bohr:

$$E_f = E_n - E_1$$

Dar cum:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

se obţine:

$$E_f = E_1 \left(\frac{1}{n^2} - 1 \right)$$

Rezultă:

$$n = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{E_f}{E_1}}} \simeq \frac{1}{\sqrt{0,1111}} = 3$$

Dar raza orbitelor poate fi scrisă:

$$r_n = n^2 r_1$$

Rezultă că:

$$\frac{r_n}{r_1} = n^2 = 9$$

Raza orbitei se va mări de 9 ori.

1.7.4 Să se calculeze, în lungimi de undă, limitele spectrului şi intervalul spectral al seriei Balmer pentru atomul de hidrogen ($n = 2$). Se cunoaşte constanta Rydberg $R = 1,097 \times 10^7$ m^{-1}.

Soluţie

Vom utiliza formula Balmer pentru atomiul de hidrogen, în cazul $n = 2$:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

Pentru cazul când $m \to \infty$, atunci λ ia valoarea minimă:

$$\lambda_\infty = \frac{4}{R} = 3646 \text{ Å}$$

Pentru cazul când $m = 3$, atunci λ ia valoarea maximă:

$$\lambda_M = \frac{1}{R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right)} = 6563 \text{ Å}$$

Astfel:

$$\Delta\lambda = \lambda_M - \lambda_\infty = 2917 \text{ Å}$$

1.7.5 Un atom de hidrogen se află într-o stare excitată caracterizată prin energia de legătură $W_{leg} = 1,51$ eV. Atomul execută o tranziţie pe un nivel pentru care energia de excitare este $E_{exc} = 10,18$ eV. Se cere energia fotonului emis.

Soluţie

Cunoaşterea energiei de legătură duce la cunoaşterea energiei nivelului pe care se află iniţial atomul:

$$E_i = -W_{leg} = -1,51 \text{ eV}$$

Energia de excitare este energia transmisă electronului aflat pe nivelul fundamental pentru a ajunge pe un nivel excitat. Atomul ajunge în starea finală E_f a cărei valoare este:

$$E_f = E_1 + E_{exc}$$

iar energia fotonului emis E va fi:

$$E = -W_{leg} - E_1 - E_{exc} = 1,91 \text{ eV}$$

1.7.6 Un atom de hidrogen, excitat prin emisia succesivă a două linii spectrale de lungimi de undă $\lambda_1 = 1281,8$ nm şi $\lambda_2 = 102,57$ nm, ajunge în starea fundamentală. Să se determine energia stării excitate şi numărul cuantic principal al acestei stări. Se cunosc constanta lui Planck $h = 6,626 \times 10^{-34}$ Js viteza luminii c şi energia de ionizare din starea fundamentală $E_1 = -13,6$ eV.

Soluţie

Scriem postulatul II al lui Bohr pentru cele două linii spectrale emise:

$$\frac{hc}{\lambda_1} = E_n - E_k$$
$$\frac{hc}{\lambda_2} = E_k - E_1$$

Expresia energiei nivelelor din atomul de hidrogen este dată de relaţia:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8h^2\varepsilon_o^2 n^2}$$

Ţinând cont de această ultimă expresie, precum şi de faptul că energia de legătură a electronului în atomul de hidrogen este $W_{leg} = -E_1$, rezultă:

$$\begin{aligned} \frac{hc}{\lambda_1} &= \frac{m_e e^4}{8h^2\varepsilon_o^2}\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) \\ \frac{hc}{\lambda_2} &= \frac{m_e e^4}{8h^2\varepsilon_o^2}\left(1 - \frac{1}{k^2}\right) \end{aligned}$$

Adunăm cele două ecuaţii de mai sus:

$$hc\left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right) = W_{leg}\left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$

Rezultă pentru numărul cuantic principal n, valoarea:

$$n = \sqrt{\frac{W_{leg}}{W_{leg} - hc\frac{\lambda_1+\lambda_2}{\lambda_1\lambda_2}}} = 5$$

iar energia corespunzătoare va fi:

$$E_5 = -\frac{W_{leg}}{25} = 0,544 \text{ eV}$$

1.7.7 Să se calculeze variaţia lungimii de undă a fotonului emis de un atom de hidrogen care apare datorită reculului pe care-l suferă atomul în urma emisiei. Ce viteză va căpăta atomul de hidrogen datorită trecerii electronului de pe a doua orbită pe prima orbită? Se dă masa atomului de hidrogen $M = 1,68 \times 10^{-27}$kg

Soluţie

Aplicăm legile de conservare ale energiei şi impulsului pentru emisia fotonului într-un sistem în care iniţial atomul de hidrogen este în repaus:

$$\begin{aligned} W_2 &= W_1 + \frac{Mv^2}{2} + h\nu' \\ 0 &= Mv - \frac{h\nu'}{c} \end{aligned}$$

unde W_2 şi W_1 reprezintă energiile electronului în atomul de hidrogen inainte şi după emisia cuantei de lumină:

$$W_2 - W_1 = h\nu$$

Utilizând cele trei ecuaţii rezultă:

$$h\nu - h\nu' = \frac{h^2\nu'^2}{2c^2M}$$

sau

$$h\left(\frac{c}{\lambda}-\frac{c}{\lambda'}\right) = \frac{h^2\nu^2}{2c^2M}\left(1+\frac{\Delta\nu}{\nu}\right)^2 \simeq \frac{h^2}{2\lambda^2 M}$$

Astfel, variaţia lungimii de undă este:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{2Mc} \simeq 6,6 \times 10^{-6}\ \text{Å}$$

Pentru a afla viteza atomului de hidrogen vom utiliza legea de conservare a impulsului:

$$Mv = \frac{h\nu'}{c} \simeq \frac{W_2 - W_1}{c} = -\frac{3W_1}{4c}$$

Rezultă:

$$v = 3,2\text{m/s}$$

1.7.8 La observarea spectrului hidrogenului atomic, s-a obţinut cu ajutorul unei reţele de difracţie cu constanta $l = 1,95$ μm că una din liniile spectrale ale seriei Balmer de ordin $k = 2$ corespunde unghiului $\alpha \simeq 30^o$. Să se determine numărul cuantic al nivelului energetic al atomului de pe care are loc tranziţia.

Soluţie

Pentru determinarea lungimii de undă vom utiliza condiţia de obţinere a unui maxim de difracţie:

$$l \sin\alpha = k\lambda$$

Rezultă:

$$\lambda = \frac{l \sin \alpha}{k}$$

Dar, conform formulei Balmer scrisă pentru seria Balmer ($n = 2$) avem:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

unde $R = 1,097677 \times 10^7$ m^{-1} este constanta Rydberg. Prin urmare combinând cele două expresii rezultă numărul cuantic m:

$$m = 2\sqrt{\frac{Rl \sin \alpha}{Rl \sin \alpha - 4k}} = 4$$

1.7.9 De câte ori se măreşte raza atomului de hidrogen aflat în stare fundamentală, dacă este excitat cu un foton cu energia egală cu $\Delta E = 10,2$ eV?

Soluţie

Fie E_n energia nivelului energetic pe care ajunge electronul după absorbţia fotonului cu energia ΔE. Atunci:

$$E_n = E_1 + \Delta E$$

unde $E_1 = -13,6$ eV este energia nivelului fundamental. Rezultă:

$$n = \sqrt{\frac{E_1}{E_1 + \Delta E}} = 3$$

Atunci, raza noii orbite Bohr devine:

$$r_n = n^2 r_1 = 9r_1$$

unde r_1 este raza atomului de hidrogen aflat în starea fundamentală.

1.7.10 Care este cea mai mare valoare a lungimii de undă din seria spectrală Lymann a hidrogenului.

Soluţie

Lungimile de undă ale seriei Lymann sunt date de formula:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{1} - \frac{1}{k^2}\right)$$

unde R este constanta Rydberg. Dacă λ este maximă atunci $1/\lambda$ va fi minimă. Acest lucru se petrece pentru $k = 2$.

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3R}{4}$$

Rezultă:

$$\lambda = \frac{4}{3R} = 1215\ \text{Å}$$

1.7.11 Ce energie trebuie comunicată atomilor de hidrogen pentru ca spectrul de emisie al acestora să conţină doar două linii din seria Balmer?

Soluţie

În cazul seriei Balmer dezexcitarea are loc pe nivelul $n = 2$. Pentru aceasta atomul trebuie excitat pe nivelul energetic $n = 4$, pentru a obţine prin dezexcitare două linii spectrale. Atunci:

$$\frac{E_1}{n^2} = E_1 + \Delta E \quad \text{unde} \quad E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

Rezultă:

$$\Delta E = \frac{E_1}{n^2} - E_1 = E_1 \left(\frac{1}{n^2} - 1 \right) = 12,75 \text{ eV}$$

1.7.12 Să se calculeze lungimile de undă ale liniilor spectrale emise de atomii de hidrogen excitaţi cu un fascicul de electroni monoenergetici cu energia $\Delta E = 12,09$ eV. ($R = 1.097677 \times 10^7$)

Soluţie

Prin excitare, electronii ajung pe nivelul energetic n. Atunci:

$$\frac{E_1}{n^2} = E_1 + \Delta E$$

Rezultă:

$$n = \sqrt{\frac{E_1}{E_1 + \Delta E}} = 3$$

Tranziţiile pe care le pot efectua electronii sunt de pe nivelul $n = 3$ pe nivelul $k = 2$, de pe nivelul $n = 3$ pe nivelul $k = 1$ şi de pe nivelul $n = 2$ pe nivelul $k = 1$. Lungimile de undă emise sunt:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

a. $n = 3;\ k = 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1025$ Å

b. $n = 3;\ k = 2 \quad \Rightarrow \quad \lambda = 6559$ Å

c. $n = 2;\ k = 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1215$ Å

Capitolul 2

FIZICĂ CUANTICĂ

2.1 Operatori

2.1.1 Să se găsească expresiile explicite ale operatorilor:

a. $\hat{A}_1 = (d/dx + x)^2$
b. $\hat{A}_2 = (xd/dx)^2$

Soluţie

a. Aplicăm operatorii unei funcţii ψ:

$$\begin{aligned}
\hat{A}_1\psi &= \left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 \psi = \left(\frac{d}{dx} + x\right)\left(\frac{d}{dx} + x\right)\psi \\
\hat{A}_1\psi &= \left(\frac{d}{dx} + x\right)\left(\frac{d\psi}{dx} + x\psi\right) \\
\hat{A}_1\psi &= \frac{d^2\psi}{dx^2} + 2x\frac{d\psi}{dx} + x^2\psi + \psi
\end{aligned}$$

Atunci, operatorul $\hat{A}_1$ are expresia:

$$\hat{A}_1 = \frac{d^2}{dx^2} + 2x\frac{d}{dx} + x^2 + 1$$

b.

$$\begin{aligned}
\hat{A}_2\psi &= \left(x\frac{d}{dx}\right)^2 \psi = \left(x\frac{d}{dx}\right)\left(x\frac{d\psi}{dx}\right) \\
\hat{A}_2\psi &= x\left[\frac{d\psi}{dx} + x\frac{d^2\psi}{dx^2}\right] \\
\hat{A}_2\psi &= x\frac{d\psi}{dx} + x^2\frac{d^2\psi}{dx^2}
\end{aligned}$$

Atunci, operatorul $\hat{A}_2$ are expresia:

$$\hat{A}_2 = x^2\frac{d^2}{dx^2} + x\frac{d}{dx}$$

2.1.2 Să se găsească expresia operatorului de translaţie care transformă funcţia $\psi(x)$ în $\psi(x+a)$.

Soluţie

Fie $\hat{T}$ operatorul căutat. Atunci:

$$\hat{T}\psi(x) = \psi(x+a)$$

Dezvoltăm în serie Taylor funcţia $\psi(x+a)$ în jurul lui x:

$$\begin{aligned}\psi(x+a) &= \psi(x) + a\frac{d\psi}{dx} + \frac{a^2}{2!}\frac{d^2\psi}{dx^2} + ... \\ \psi(x+a) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x)\end{aligned}$$

Astfel, operatorul $\hat{T}$ va avea expresia:

$$\hat{T} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}$$

Dacă vom ţine cont că:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = \exp x$$

Rezultă:

$$\hat{T} = \exp\left(a\frac{d}{dx}\right)$$

2.1.3 Să se determine operatorul adjunct operatorului:

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}$$

Soluţie

Pentru determinarea operatorului adjunct se consideră relaţia de definiţie a acestuia:

$$\left(\varphi, \hat{A}\psi\right) = \left(\hat{A}^{+}\varphi, \psi\right)$$

Rezultă:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \frac{d}{dx}\psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \left(\hat{A}^+ \varphi\right)^* dx$$

Dar:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \frac{d}{dx}\psi dx = \varphi^* \psi \mid_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \frac{d\varphi^*}{dx} dx$$

Deoarece funcţia $\psi(x)$ tinde la zero atunci când $x \to \pm\infty$, atunci:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \frac{d}{dx}\psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \left[-\frac{d\varphi}{dx}\right]^* dx$$

Rezultă:

$$\hat{A}^+ = -\frac{d}{dx} \qquad \text{adică} \qquad \left(\frac{d}{dx}\right)^+ = -\frac{d}{dx}$$

2.1.4 Să se determine valorile proprii ale operatorilor:
a. d/dx
b. id/dx

Soluţie

a. Ecuaţia cu valori proprii pentru primul operator se va scrie:

$$\frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi$$

Rezultă:

$$\psi = e^{\lambda x}$$

Pentru ca funcţia ψ să fie mărginită la $\pm\infty$ este necesar ca $\lambda = i\beta$, $\beta \in R$.

b. Ecuaţia cu valori proprii este, în acest caz:

$$i\frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi \quad \text{sau} \quad \frac{d\psi}{dx} = -i\lambda\psi$$

Rezultă:

$$\psi = e^{-i\lambda x}$$

Din aceleaşi motive ca mai sus, $\lambda \in R$.

2.1.5 Să se găsească funcţiile şi valorile proprii ale operatorului $d/d\varphi$.

Soluţie

Vom aplica operatorul unei funcţii ψ:

$$\frac{d\psi}{d\varphi} = \lambda\psi$$

Rezultă:

$$\psi = e^{\lambda\varphi} \qquad \text{(funcţiile proprii)}$$

Vom impune condiţia de periodicitate:

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

Atunci:

$$e^{\lambda\varphi} = e^{\lambda(\varphi+2\pi)}$$

De aici rezultă:

$$e^{\lambda\cdot 2\pi} = 1$$

şi valorile proprii sunt:

$$\lambda = im \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ...$$

2.1.6 Să se determine valorile proprii şi funcţiile proprii corespunzătoare operatorului

$$\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}$$

Soluţie

Ecuaţia cu funcţii şi valori proprii este:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d\psi}{dx} = \lambda\psi$$

Facem schimbarea de variabilă

$$u = x\psi$$

$$\psi = \frac{u}{x} \quad \text{şi} \quad \frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{x}\frac{du}{dx} - \frac{u}{x^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{1}{x^2}\frac{du}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2u}{x^3} - \frac{1}{x^2}\frac{du}{dx}$$
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2}{x^2}\frac{du}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2u}{x^3}$$

Atunci:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{x}\frac{d^2u}{dx^2} = \lambda\frac{u}{x}$$

Rezultă ecuaţia

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \lambda u$$

Ea are soluţiile

$$u_1 = c_1 e^{\sqrt{\lambda}x} \text{ şi } u_2 = c_2 e^{-\sqrt{\lambda}x}$$

Deoarece la ∞ ambele funcţii trebuie să fie finite este necesar ca $\lambda = -\beta^2 < 0$, unde β este un număr real.

Soluţia generală este o combinaţie liniară de u_1 şi u_2 astfel că:

$$\psi = \frac{c_1 e^{i\beta x} + c_2 e^{-i\beta x}}{x}$$

Pentru ca ψ să fie finită şi în $x = 0$ este necesar ca:

$$c_1 + c_2 = 0$$

Atunci:

$$c_1 = -c_2 = c$$

şi

$$\psi = \frac{c}{x}\left[e^{i\beta x} - e^{-i\beta x}\right] = c' \frac{\sin \beta x}{x}$$

2.1.7 Să se calculeze comutatorii dintre operatorii:
a. x şi d/dx
b. $\partial/\partial\varphi$ şi $f(r, \theta, \varphi)$

Soluţie

a.

$$\left[x, \frac{d}{dx}\right]\psi = x\frac{d}{dx}\psi - \frac{d}{dx}(x\psi) = -\psi$$

Rezultă că:

$$\left[x, \frac{d}{dx}\right] = -1$$

b.

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial}{\partial\varphi}, f(r,\theta,\varphi)\right]\psi &= \frac{\partial}{\partial\varphi}(f\psi) - f\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \\ &= \psi\frac{\partial f}{\partial\varphi} = \frac{\partial f}{\partial\varphi}\psi\end{aligned}$$

Rezultă:

$$\left[\frac{\partial}{\partial\varphi}, f(r,\theta,\varphi)\right] = \frac{\partial f}{\partial\varphi}$$

2.1.8 Se dau operatorii $\hat{A}$, $\hat{B}$ şi $\hat{C}$. Să se demonstreze următoarele relaţii:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

Soluţie

$$\begin{aligned}[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= (\hat{A}\hat{B})\hat{C} - \hat{C}(\hat{A}\hat{B}) = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} \\ &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) - \hat{A}(\hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}\end{aligned}$$

Analog se demonstrează şi cea de-a doua relaţie.

2.1.9 Să se arate că prin operaţii algebrice cu comutatori, comutatorul sumelor este egal cu suma comutatorilor:

$$\left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k\right] = \sum_{i,k} \left[\hat{A}_i, \hat{B}_k\right]$$

Soluţie

$$\left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k\right] = \left(\sum_i \hat{A}_i\right)\left(\sum_k \hat{B}_k\right) - \left(\sum_k \hat{B}_k\right)\left(\sum_i \hat{A}_i\right)$$

$$\left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k\right] = \sum_i \sum_k \hat{A}_i \hat{B}_k - \sum_k \sum_i \hat{B}_k \hat{A}_i$$

$$\left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k\right] = \sum_i \sum_k \left(\hat{A}_i \hat{B}_k - \hat{B}_k \hat{A}_i\right)$$

$$\left[\sum_i \hat{A}_i, \sum_k \hat{B}_k\right] = \sum_i \sum_k \left[\hat{A}_i, \hat{B}_k\right]$$

2.1.10 Să se determine derivata temporală a produsului a doi operatori.

Soluţie

Pentru rezolvare se ţine cont că derivata totală la timp pentru un operator este:

$$\frac{d\hat{C}}{dt} = \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{C}, \hat{H}\right]$$

unde $\hat{H}$ este operatorul Hamilton. Rezultă:

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{A}\hat{B}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{A}\hat{B}\right) + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{H}\right]$$

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{A}\hat{B}\right) = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\partial \hat{B}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\hat{A}\left[\hat{B}, \hat{H}\right] + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}, \hat{H}\right]\hat{B}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{A}\hat{B}\right) = \left\{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\}\hat{B} + \hat{A}\left\{\frac{\partial \hat{B}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{B},\hat{H}\right]\right\}$$

$$= \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}$$

2.1.11 Să se găsească descompunerea operatorului $\left(\hat{A} - \lambda\hat{B}\right)^{-1}$ în funcţie de puterile lui λ, unde λ este un număr real mic.

Soluţie

Considerăm că operatorul $\left(\hat{A} - \lambda\hat{B}\right)^{-1}$ se dezvoltă în serie astfel:

$$\left(\hat{A} - \lambda\hat{B}\right)^{-1} = \sum_n \lambda^n \hat{L_n}$$

Aplicăm la dreapta operatorul $\left(\hat{A} - \lambda\hat{B}\right)$. Obţinem:

$$\hat{I} = \sum_n \lambda^n \left(\hat{A} - \lambda\hat{B}\right)\hat{L_n}$$

$$\hat{I} = \hat{A}\hat{L_0} - \lambda\hat{B}\hat{L_0} + \lambda\hat{A}\hat{L}_1 - \lambda^2\hat{B}\hat{L}_2 + ...$$

$$\hat{I} = \hat{A}\hat{L}_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{A}\hat{L_n} - \hat{B}\hat{L}_{n-1}\right)$$

Prin identificare

$$\hat{I} = \hat{A}\hat{L}_0$$

Rezultă:

$$\hat{L}_0 = \hat{A}^{-1}$$

Deasemenea:

$$\hat{O} = \hat{A}\hat{L_n} - \hat{B}\hat{L}_{n-1}$$

şi

$$\hat{A}\hat{L_n} = \hat{B}\hat{L}_{n-1}$$

Rezultă:

$$\hat{L_n} = \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{L}_{n-1}$$

S-a găsit o relaţie de recurenţă:

$$\hat{L}_1 = \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{L}_0 = \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}$$

$$\hat{L}_2 = \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{L}_1 = \hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}$$

Rezultă:

$$\left(\hat{A} - \lambda\hat{B}\right)^{-1} = \hat{A}^{-1} + \lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1} + \lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1} + ...$$

2.1.12 Dacă se cunoaşte că operatorii $\hat{L}$ şi $\hat{M}$ satisfac relaţia:

$$\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = \hat{I}$$

să se determine $\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L}$

Soluţie

$$\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L} = \hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}\hat{L}\hat{M} + \hat{M}\hat{L}\hat{M} - \hat{M}^2\hat{L} =$$

$$\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L} = \left(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}\right)\hat{M} + \hat{M}\left(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}\right) =$$

$$\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L} = 2\hat{M}$$

2.1.13 Să se găsească conjugatul produsului operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$.

Soluţie

Prin definiţie

$$\int \psi_1^* \left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi_2 dv = \int \psi_2 \left[\left(\hat{A}\hat{B}\right)^+ \psi_1\right]^* dv$$

Să considerăm prima integrală:
Notăm:$\hat{B}\psi_2 = \psi_3$ şi introducem $\hat{A}^+$

$$\int \psi_1^* \left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi_2 dv = \int \psi_1^* \hat{A}\psi_3 dv = \int \psi_3 \left(\hat{A}^+\psi_1\right)^* dv$$

Introducem o nouă funcţie $\psi_4 = \hat{A}^+\psi_1$ şi deoarece $\psi_3 = \hat{B}\psi_2$

$$\int \psi_3 \left(\hat{A}^+\psi_1\right)^* dv = \int \left(\hat{B}\psi_2\right) \psi_4^* dv$$

$$\int \psi_3 \left(\hat{A}^+\psi_1\right)^* dv = \int \psi_4^* \hat{B}\psi_2 dv = \int \psi_2 \left(\hat{B}^+\psi_4\right)^* dv$$

$$\int \psi_3 \left(\hat{A}^+\psi_1\right)^* dv = \int \psi_2 \left(\hat{B}^+\hat{A}^+\psi_1\right)^* dv$$

Rezultă: $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

2.1.14 Să se arate că dacă $\hat{L}$ şi $\hat{M}$ sunt operatori hermitici, operatorii:

$$\hat{F} = \frac{1}{2}\left[\hat{L}\hat{M} + \hat{M}\hat{L}\right]$$

şi

$$\hat{f} = \frac{i}{2}\left[\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}\right]$$

sunt hermitici.

Soluţie

$$\hat{F}^+ = \frac{1}{2}\left[\left(\hat{L}\hat{M}\right)^+ + \left(\hat{M}\hat{L}\right)^+\right]$$

$$\hat{F}^+ = \frac{1}{2}\left[\hat{M}^+\hat{L}^+ + \hat{L}^+\hat{M}^+\right]$$

$$\hat{F}^{+} = \frac{1}{2}\left[\hat{M}\hat{L} + \hat{L}\hat{M}\right] = \hat{F}$$

$$\hat{f}^{+} = -\frac{i}{2}\left[\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+} - \left(\hat{M}\hat{L}\right)^{+}\right] =$$

$$= -\frac{i}{2}\left[\hat{M}^{+}\hat{L}^{+} - \hat{L}^{+}\hat{M}^{+}\right]$$

$$= \frac{i}{2}\left[\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}\right] = \hat{f}$$

2.1.15 Ştiind că operatorii poziţiei şi impulsului sunt definiţi:

$$\hat{x} = x \qquad \hat{y} = y \qquad \hat{z} = z$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

să se calculeze comutatorii:
a. $[\hat{x}, \hat{x}]$, $[\hat{x}, \hat{y}]$, $[\hat{x}, \hat{z}]$
b. $[\hat{x}, \hat{p}_x]$, $[\hat{x}, \hat{p}_y]$, $[\hat{x}\hat{p}_z]$
c. $[\hat{p}_x, \hat{p}_x]$, $[\hat{p}_x, \hat{p}_y]$, $\hat{p}_x, \hat{p}_z]$

Soluţie

a.

$$[\hat{x}, \hat{x}]\psi = xx\psi - xx\psi = 0$$

$$[\hat{x}, \hat{y}]\psi = xy\psi - yx\psi = 0$$

$$[\hat{x}, \hat{z}]\psi = xz\psi - zx\psi = 0$$

b.

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi &= x\left[-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right] + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) \\
&= -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\psi
\end{aligned}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y]\psi = x\left[-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial y}\right] + i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(x\psi) = 0$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_z]\psi = x\left[-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial z}\right] + i\hbar\frac{\partial}{\partial z}(x\psi) = 0$$

c.

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_x]\psi = (i\hbar)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi - (i\hbar)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0$$

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y]\psi = (i\hbar)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y} - (i\hbar)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x} = 0$$

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_z]\psi = (i\hbar)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z} - (i\hbar)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial x} = 0$$

2.1.16 Să se demonstreze următoarele relaţii:

$$[\hat{l}_x, \hat{x}] = 0; \qquad [\hat{l}_x, \hat{y}] = i\hbar\hat{z}; \qquad [\hat{l}_x, \hat{z}] = -i\hbar\hat{y}$$

$$[\hat{l}_x, \hat{p}_x] = 0; \qquad [\hat{l}_x, \hat{p}_y] = i\hbar\hat{p}_z; \qquad [\hat{l}_x, \hat{p}_z] = -i\hbar\hat{p}_y$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_x] = 0; \qquad [\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z; \qquad [\hat{l}_x, \hat{l}_z] = -i\hbar\hat{l}_y$$

unde $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ şi $\hat{l}_z$ sunt componentele momentului cinetic.

Soluţie

Vom folosi rezultatele de la problema precedentă, definiţia momentului cinetic, precum şi proprietăţile comutatorilor:

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{x}] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}] \\
&= [\hat{y}, \hat{x}]\hat{p}_z + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{x}] - [\hat{z}, \hat{x}]\hat{p}_y - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{x}] = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{y}] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{y}] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{y}] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{y}] \\
&= [\hat{y}, \hat{y}]\hat{p}_z + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{y}] - [\hat{z}, \hat{y}]\hat{p}_y - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{y}] = i\hbar\hat{z}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{z}] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}] = [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}] \\
&= [\hat{y}, \hat{z}]\hat{p}_z + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}] - [\hat{z}, \hat{z}]\hat{p}_y - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{z}] = -i\hbar\hat{y}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{p}_x] = [[\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_x]\hat{p}_z + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{p}_x] \\
-[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0
\end{aligned}$$

$$[\hat{l}_x,\hat{p}_y]=[[\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,\hat{p}_y]=[\hat{y},\hat{p}_y]\hat{p}_z+\hat{y}[\hat{p}_z,\hat{p}_y]$$
$$-[\hat{z},\hat{p}_y]\hat{p}_y-\hat{z}[\hat{p}_y,\hat{p}_y]=i\hbar\hat{p}_z$$

$$[\hat{l}_x,\hat{p}_z]=[\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,\hat{p}_z]=[\hat{y},\hat{p}_z]\hat{p}_z+\hat{y}[\hat{p}_z,\hat{p}_z]$$
$$-[\hat{z},\hat{p}_z]\hat{p}_y-\hat{z}[\hat{p}_y,\hat{p}_z]=-i\hbar\hat{p}_y$$

$$[\hat{l}_x,\hat{l}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z]=[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\hat{p}_x]+[\hat{z}\hat{p}_y,\hat{x}\hat{p}_z]=i\hbar\hat{l}_z$$

$$\begin{aligned}[\hat{l}_x,\hat{l}_z] &= [\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x]=\hat{x}[\hat{y},\hat{p}_y]\hat{p}_z+\hat{z}[\hat{p}_y,\hat{y}]\hat{p}_x\\ &= -i\hbar(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z)=-i\hbar\hat{l}_y\end{aligned}$$

Aceste relaţii precum şi analoagele lor obţinute prin permutări circulare, se pot scrie sub formă condensată cu ajutorul unui tensor antisimetric de ordin trei, $l_{ikl}, i,k,l=1,2,3$:

$$[\hat{l}_i,\hat{x}_k]=i\hbar l_{ikl}\hat{x}_l \qquad [\hat{l}_i,\hat{p}_k]=i\hbar l_{ikl}\hat{p}_l \qquad [\hat{l}_i,\hat{l}_k]=i\hbar l_{ikl}\hat{l}_l$$

2.1.17 Să se arate că:

$$[\hat{l}_x,\hat{l}^2]=[\hat{l}_y,\hat{l}^2]=[\hat{l}_z,\hat{l}^2]=0$$

unde

$$\hat{l}^2=\hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2+\hat{l}_z^2$$

Soluţie

$$[\hat{l}_x,\hat{l}^2]=[\hat{l}_x,\hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2+\hat{l}_z^2]=[\hat{l}_x,\hat{l}_x^2]+[\hat{l}_x,\hat{l}_y^2]+[\hat{l}_x,\hat{l}_z^2]$$
$$=\hat{l}_x[\hat{l}_x,\hat{l}_x]+[\hat{l}_x,\hat{l}_x]\hat{l}_x+\hat{l}_y[\hat{l}_x,\hat{l}_y]+[\hat{l}_x,\hat{l}_y]\hat{l}_y+\hat{l}_z[\hat{l}_x,\hat{l}_z]+[\hat{l}_x,\hat{l}_z]\hat{l}_z$$

Se ţine cont că:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_x] = 0 \qquad [\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar\hat{l}_z$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar\hat{l}_x \qquad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y$$

Atunci:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}^2] = i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_z + i\hbar\hat{l}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{l}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_z = 0$$

2.1.18 Se consideră operatorii:

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{d}{dx}\right) \qquad \hat{B} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{d}{dx}\right)$$

Să se calculeze $[\hat{A}, \hat{B}]$.

Soluţie

Conform definiţiei unui comutator:

$$\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{B}]\psi &= \hat{A}\hat{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = \frac{1}{2}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi \\
&- \frac{1}{2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi \\
&= \frac{1}{2}\left[x^2\psi - x\frac{d\psi}{dx} + \psi + x\frac{d\psi}{dx} - \frac{d^2\psi}{dx^2} - x^2\psi\right. \\
&- \left. x\frac{d\psi}{dx} + \psi + x\frac{d\psi}{dx} + \frac{d^2\psi}{dx^2}\right]
\end{aligned}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi \;=\; \psi$$

Rezultă:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \;=\; I$$

2.1.19 Să se determine operatorul conjugat cu operatorul:

$$\exp\left(i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

unde α este un număr real.

Soluţie

Prin definiţie:

$$\exp\left[i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n}{n!}$$

Deoarece operatorul conjugat operatorului $\frac{\partial^n}{\partial\varphi^n}$ este $(-1)^n\,\frac{\partial^n}{\partial\varphi^n}$ atunci:

$$\left[\left(i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n\right]^+ = (-i)^n\left(-\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n = \left(i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^n$$

Aceasta arată că operatorul de mai sus este hermitic deoarece $\alpha = \alpha^*$, astfel că:

$$\left(e^{i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}}\right)^+ = e^{i\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}}$$

2.1.20 Să se studieze dacă operatorul

$$i\frac{d}{dx}$$

este hermitic.

Soluţie

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^* i\frac{d\psi_2}{dx}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2\left[\left(i\frac{d}{dx}\right)^+\psi_1\right]^* dx$$

$$i\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\frac{d\psi_2}{dx}dx=i\psi_1\psi_2|_{-\infty}^{+\infty}-i\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2\frac{d\psi_1^*}{dx}=\int\psi_2\left[i\frac{d}{dx}\psi_1\right]^* dx$$

Atunci:

$$\left[i\frac{d}{dx}\right]^+=i\frac{d}{dx}$$

astfel că operatorul este unul hermitic.

2.2 Ecuaţia Schrödinger

2.2.1 La momentul $t=0$ starea unei particule cuantice libere este descrisă de funcţia de undă:

$$\psi(x,0)=A\exp\left(-\frac{x^2}{2a}+ik_ox\right)$$

unde A, a, k_o sunt constante. Să se determine constanta de normare.

Soluţie

$$\psi^*(x,0)\psi(x,0) = A^*A\exp\left(-\frac{x^2}{2a} - ik_ox\right)\cdot\exp\left(-\frac{x^2}{2a} + ik_ox\right)$$

Astfel:

$$|\psi|^2 = |A|^2\exp\left(-\frac{x^2}{a}\right)$$

Condiţia de normare este:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a}}dx = 1$$

Pentru calculul integralei facem schimbarea de variabilă:

$$y = \frac{x}{\sqrt{a}}$$

Atunci, condiţia de normare se va scrie sub forma:

$$\sqrt{a}|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}dy = 1$$

Dar integrala anterioară este o integrală Poisson al cărui rezultat este:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}dy = \sqrt{\pi}$$

Rezultă:

$$\sqrt{a\pi}|A|^2 = 1$$

şi

$$|A| = \frac{1}{\sqrt[4]{a\pi}}$$

2.2.2 Să se determine soluţia generală a ecuaţiei Schrödinger dependentă de timp pentru o particulă liberă.

Soluţie

Căutam pentru ecuaţia Schrödinger temporală:

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(x,t\right)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi\left(x,t\right)}{\partial x^2}$$

o soluţie de forma

$$\psi(x,t) = u(x)\varphi(t)$$

Rezultă:

$$\frac{i\hbar}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2mu}\frac{d^2u}{dx^2} = E$$

Deoarece $u(x)$ trebuie să fie finită la $|x| \rightarrow \infty$, punem $E > 0$. Notând cu $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, găsim

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

şi

$$u(x) = e^{ikx}$$

O soluţie particulară este:

$$\psi = e^{-\frac{iEt}{\hbar}+ikx}$$

Soluţia generală este o suprapunere de soluţii particulare

$$\psi(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} c(k)e^{ikx-\frac{iEt}{\hbar}}dk$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

2.2.3 Să se determine densitatea de curent de probabilitate pentru particula liberă care se deplasează în sensul axei Ox.

Soluţie

Densitatea curentului de probabilitate este

$$j = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

Deoarece

$$\psi = u(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

rezultă densitatea curentului de probabilitate în funcţie de soluţia $u(x)$ a ecuaţiei Schrödinger atemporală. Astfel:

$$j = \frac{\hbar}{2im}\left(u^*\frac{du}{dx} - u\frac{du^*}{dx}\right)$$

Deoarece

$$u(x) = Ae^{ikx} = Ae^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} = Ae^{i\frac{px}{\hbar}}$$

rezultă:

$$j = \frac{p}{m}|A|^2 = v|A|^2$$

Astfel densitatea de curent de probabilitate este proporţională cu viteza particulei.

2.2.4 Să se determine funcţiile proprii şi spectrul de energii corespunzătoare pentru o particulă ce se poate mişca liber în groapa de potenţial cu pereţi infiniţi (vezi Fig. 2.1)

$$V(x) = \begin{cases} 0, \; x \in (0, a) \\ +\infty, \; x \in (-\infty, 0) \cup (a, +\infty) \end{cases}$$

Soluţie

Valoarea ∞ atribuită lui $V(x)$ în afara intervalului $(0, a)$ face imposibilă părăsirea acestui interval. În aceste condiţii, funcţiile proprii ale energiei sunt soluţii ale ecuaţiei Schrödinger:

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

cu proprietatea că $\Psi(x) = 0$ când $x \in (-\infty, 0) \cup (a, +\infty)$. În cazul că $E > 0$ ecuaţia de mai sus se poate scrie:

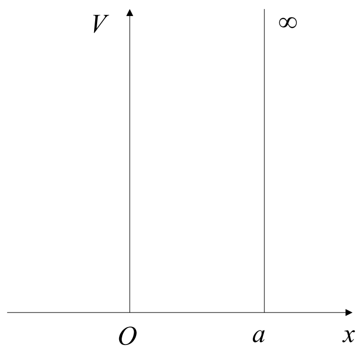

Fig. 2.1

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0$$

Notând cu:

$$k = \sqrt{\frac{2Em}{\hbar^2}}$$

ecuaţia devine:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0$$

a cărei soluţie este de forma:

$$\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \ , \qquad x \in (0, a)$$

Deoarece în afara intervalului $(0, a)$ valoarea lui Ψ este nulă, din condiţia de continuitate a lui Ψ :

$$\Psi(0) = 0$$
$$\Psi(a) = 0$$

Rezultă:

$$\Psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = 0 \ , \qquad \text{adică } B = 0$$
$$\Psi(a) = A\sin ka = 0$$

Cazul $k = 0$ se elimină deoarece duce la soluţia $\Psi(x) = 0 \quad \forall x \in (0, a)$. Atunci:

$$ka = n\pi, \qquad n \in N\backslash\{0\}$$

Rezultă că ecuaţia Schrödinger este satisfăcută numai pentru valorile parametrului de forma:

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \qquad n \in N\backslash\{0\}$$

Atunci, pentru energie rezultă valorile:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad n \in N\backslash\{0\}$$

Spectrul energetic este discret.

Funcţia de undă corespunzătoare energiei E_n este:

$$\Psi_n(x) = A_n \sin\frac{n\pi}{a}x$$

Valoarea lui A_n, sau mai precis modulul lui se determină din condiţia de normare:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* (x) \, \Psi (x) \, dx = 1$$

În situaţia noastră rezultă:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A_n|^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1$$

Rezultă:

$$|A_n|^2 = \frac{2}{a}$$

de unde:

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \exp (i\delta)$$

unde δ este un factor de fază pe care îl vom alege zero. Atunci:

$$\Psi_n (x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

În cazul în care $E = 0$ ecuaţia Schrödinger devine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = 0$$

şi:

$$\Psi\left(x\right) = Ax + B$$

Condiţiile de continuitate ale funcţiei de stare sunt îndeplinite numai dacă $A = 0$ şi $B = 0$ ceea ce înseamnă ca $E = 0$ nu aparţine spectrului de energii.

În cazul în care $E < 0$ vom nota cu:

$$k' = \sqrt{\frac{2m\left|E\right|}{\hbar^2}}$$

şi ecuaţia lui Schrödinger va deveni în acest caz:

$$+\frac{d^2\Psi}{dx^2} - k^{'2}\Psi = 0$$

cu soluţia generală de forma:

$$\Psi\left(x\right) = A\exp\left(+k^{'}x\right) + A\exp\left(-k^{'}x\right)$$

Condiţiile de continuitate ale funcţiei ψ sunt îndeplinite şi în acest caz numai dacă $A = 0$ şi $B = 0$, deci şi în această situaţie nu există valori proprii negative.

Observaţii

1. În cazul acestei probleme nu am făcut uz de condiţia generală de continuitate a derivatei. Ea nu este îndeplinită la capetele intervalului aceasta fiind legată de existenţa saltului la infinit pe care-l suferă energia potenţială.

2. Se remarcă deosebirea faţă de comportarea în condiţii analoage a unei particule clasice. O astfel de particulă poate executa o mişcare oscilatorie cu orice energie între cei doi pereţi rigizi sau poate fi în repaus când $E = 0$. În cadrul mecanicii cuantice mişcarea va avea loc numai pentru anumite valori ale energiei, numărul lor fiind ∞. În plus energia stării fundamentale E_i este diferită de zero, adică în interiorul gropii de potenţial particula cuantică nu poate fi în repaus. Această concluzie poate fi privită ca o consecinţă a relaţiilor de nedeterminare a lui Heisenberg.

2.2.5 Să se determine valorile $\Delta x = (< x^2 > - < x >^2)^{\frac{1}{2}}$ şi $\Delta p = (< p^2 > - < p >^2)^{\frac{1}{2}}$ pentru o particulă într-o groapă cu pereţi infiniţi de lărgime a.

Soluţie

Funcţia de stare pentru o particulă în groapa cu pereţi infiniţi este:

$$\psi\left(x\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

Atunci:

$$< x >= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} (\sin \frac{n\pi}{a} x) \left(x\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a} x) dx = \frac{a}{2}$$

$$< x^2 >= \int_0^a \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx = \frac{a^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2}\right)$$

$$\Delta x = a\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\hat{p}_x\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$\hat{p}_x\psi = \frac{\hbar}{i}\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi}{a}x$$

$$< p_x >= \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\hat{p}_x\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{a}\left(\frac{n\pi}{a}\right)\int\limits_0^a\left(\cos\frac{n\pi}{a}x\right)\left(\sin\frac{n\pi}{a}x\right)dx = 0$$

$$\hat{p}_x^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \hbar^2\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{n^2\pi^2}{a^2}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

$$< p_x^2 >= \hbar^2\frac{2}{a}\frac{n^2\pi^2}{a^2}\int\limits_0^a\sin^2\left(\frac{n\pi}{a^2}x\right)dx = \hbar^2\frac{n^2\pi^2}{a^2} = \frac{n^2h^2}{4a^2}$$

$$\Delta p = \frac{nh}{2a}$$

2.2.6 În problema 2.2.4 considerăm particula în starea fundamentală. Să se evalueze energia minimă de excitare în cazurile:
a. $a = 10^{-10}$ m şi $m = 9,1 \times 10^{-31}$ kg
b. $a = 10^{-14}$ m şi $m = 1,673 \times 10^{-27}$ kg

Soluţie

Energia minimă de excitare este:

$$E = E_2 - E_1 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

Efectuând calculele rezultă:

$$\begin{aligned} E &= 113 \text{ eV} \\ E &= 6,15 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Primul caz corespunde unui electron aflat într-o regiune permisă ale cărei dimensiuni sunt comparabile cu cele ale unui atom, iar cel de-al doilea caz corespunde unui proton aflat într-o regiune permisă ale cărei dimensiuni sunt comparabile cu cele ale unui nucleu.

2.2.7 Un electron cu viteza $v_0 = 10^6$ m/s se mişcă liber într-o regiune din spaţiu, pătrunzând apoi într-o regiune unde există un câmp cu energia potenţială $U_o = 4$ eV (vezi Fig. 2.2). Să se calculeze:
a. energia electronului în prima regiune (în eV)
b. distanţa la care densitatea de probabilitate de localizare a electronului în regiunea a doua scade de e ori

Soluţie

a. Pentru un electron nerelativist (cazul nostru), energia sa cinetică este:

$$E_c = \frac{mv_o^2}{2} = 2,84 \text{ eV}$$

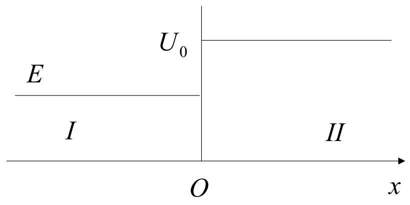

Fig. 2.2

b. Energia potenţială a are expresia (vezi Fig. 2.2):

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_o & x \geq 0 \end{cases}$$

În regiunea în care $x \geq 0$, ecuaţia Schrödinger este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + U_o\psi_{II} \quad = \quad E\psi_{II}$$

sau

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_o - E)\psi_{II} \quad = \quad 0$$

Notăm cu:

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_o - E)$$

Astfel, ecuaţia Schrödinger se va scrie sub forma:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - k_2^2\psi_{II} = 0$$

Soluţia acestei ecuaţii este:

$$\psi_{II} = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x}$$

Această soluţie trebuie să fie mărginită la infinit. Atunci $A_2 = 0$. Funcţia de undă devine:

$$\psi_{II} = B_2 e^{-k_2 x}$$

Densitatea de probabilitate de a găsi particula în regiunea a doua este:

$$P_2(x) = \psi_{II}^* \psi_{II} = |B_2|^2 e^{-2k_2 x}$$

• pentru $x = 0 \quad \Rightarrow \quad P_2(0) = |B_2|^2$
• pentru $x = a \quad \Rightarrow \quad P_2(a) = |B_2|^2 e^{-2k_2 a}$

Punem condiţia cerută de problemă:

$$P_2(a) \quad = \quad \frac{1}{e} P_2(0)$$

Rezultă:

$$a \quad = \quad \frac{1}{2k_2} = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_o - E)}} \sim 100 \text{ Å}$$

2.2.8 O particulă cuantică de masă m se află într-o groapă de potenţial bidimensională cu pereţii impenetrabili de laturi a şi b (vezi Fig. 2.3). Să se determine valorile proprii ale energiei particulei şi funcţiile proprii corespunzătoare.

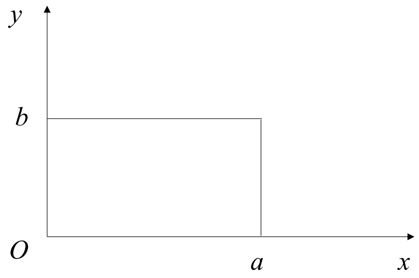

Fig. 2.3

Soluţie

Deoarece $\psi = \psi(x, y)$ ecuaţia Schrödinger este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right] = E\psi$$

Alegem funcţia de undă de forma:

$$\psi(x, y) = \psi_1(x)\psi_2(y)$$

şi ecuaţia Schrödinger se va scrie:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi_2(y)\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x)\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2}\right] = E\psi_1(x)\psi_2(y)$$

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dy^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

Se obţin ecuaţiile:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} &= -k_1^2 \\
\frac{1}{\psi_2}\frac{d^2\psi_2}{dy^2} &= -k_2^2 \\
\text{unde}\quad k_1^2 + k_2^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}E
\end{aligned}$$

Soluţiile acestor ecuaţii sunt:

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= A_1 \sin k_1 x + B_1 \cos k_1 x \qquad 0 \le x \le a \\
\psi_2 &= A_2 \sin k_2 y + B_2 \cos k_2 y \qquad 0 \le y \le b
\end{aligned}$$

Punem condiţiile la limită:

$$\psi_1(0) = \psi_1(a) = 0$$

Din

$$\psi_1(0) = 0 \quad \text{rezultă} \quad B_1 \cos 0 = 0 \quad \text{şi} \quad B_1 = 0$$

Din

$$\psi_1(a) = 0 \quad \text{rezultă} \quad A_1 \sin k_1 a = 0 \quad \text{şi} \quad k_1 = \frac{n_1 \pi}{a}$$

unde $n_1 = 1, 2, 3, ...$ Astfel:

$$\psi_1(x) = B_1 \sin \frac{n_1 \pi}{a} x \quad \text{cu} \quad n_1 = 1, 2, 3...$$

În mod analog vom obţine şi pentru soluţia ψ_2 expresia:

$$\begin{aligned}
\psi_2(y) &= B_2 \sin \frac{n_2 \pi}{b} y \\
k_2 &= \frac{n_2 \pi}{b}; \qquad n_2 = 1, 2, 3, ...
\end{aligned}$$

Atunci:

$$n_1^2\frac{\pi^2}{a^2}+n_2^2\frac{\pi^2}{b^2}=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

Valorile posibile ale energiei sunt:

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}\right]$$

Funcţia de undă va avea expresia:

$$\psi(x,y)=\psi_1(x)\psi_2(y)=C\sin\frac{n_1\pi}{a}x\sin\frac{n_2\pi}{b}y$$

Pentru a determina constanta C vom impune condiţia de normare a funcţiei de undă:

$$\int_0^a\int_0^b\psi\psi^*dxdy=1$$

$$|C|^2\int_0^a\sin^2\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right)dx\cdot\int_0^b\sin^2\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right)dy=1$$

Rezultă:

$$|C|=\sqrt{\frac{4}{ab}}$$

Atunci, funcţia de undă ψ va avea forma finală:

$$\psi(x,y)=\sqrt{\frac{4}{ab}}\left(\sin\frac{n_1\pi}{a}x\right)\left(\sin\frac{n_2\pi}{b}y\right)$$

2.2.9 Să se demonstreze că în cazul în care energia potenţială este funcţie pară $V(x) = V(-x)$, funcţia proprie $\psi(x)$ corespunzătoare unei valori proprii nedegenerate E este fie pară, fie impară.

Soluţie

Fie o funcţie proprie $\psi(x)$ corespunzătoare valorii proprii E ce satisface ecuaţia Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Dacă în ecuaţia de mai sus se schimbă x în $-x$ şi ţinem cont de simetria energiei potenţiale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

Aceasta înseamnă că funcţia de undă $\psi(-x)$ satisface aceeaşi ecuaţie ca şi funcţia $\psi(x)$. Dacă E este valoare proprie nedegenerată atunci avem:

$$\psi(x) = \lambda\psi(-x)$$

unde λ este o constantă. Schimbând în relaţia de mai sus pe x cu $-x$ obţinem:

$$\psi(-x) \;\; = \;\; \lambda\psi(x) = \lambda^2\psi(-x)$$

Rezultă:

$$\lambda^2 \;\; = \;\; 1 \quad \text{sau} \quad \lambda = \pm 1$$

Soluţia $\psi(x)$ fiind unică, vom avea:

$$\psi(-x) = \psi(x) \quad \text{sau} \quad \psi(-x) = -\psi(x)$$

Observaţie: Dacă E este o valoare proprie degenerată de ordin doi, o soluţie $\psi(x)$ va fi în general lipsită de proprietăţi de paritate. Pornind de la o astfel de soluţie putem construi soluţiile:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= \psi(x) + \psi(-x) \\ \psi_2(x) &= \psi(x) - \psi(-x) \end{aligned}$$

care sunt respectiv funcţie pară şi funcţie impară. Funcţiile ψ_1 şi ψ_2 sunt liniar independente şi ortogonale.

2.2.10 Să se determine funcţiile proprii ale energiei unei particule care se mişcă într-un potenţial unidimensional de tip treaptă de potenţial

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{pentru} \quad x < 0 \\ U_0 & \text{pentru} \quad x \geq 0 \end{cases}$$

pentru cazul când energia E a particulei este mai mică decât înălţimea treptei de potenţial.

Soluţie

Ecuaţia lui Schrödinger în regiunea I în care $x < 0$ este:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I = 0$$

şi în regiunea II în care $x > 0$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_{II} = 0$$

Se efectuează substituţiile:

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{şi} \quad k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

şi ecuaţiile de mai sus devin:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k_1^2\psi_I = 0$$

şi

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - k_2^2\psi_{II} = 0$$

Soluţiile acestor ecuaţii sunt:

$$\psi_I = a_1 e^{ik_1 x} + a_2 e^{-ik_1 x} \qquad \text{pentru} \quad x \leq 0$$

$$\psi_{II} = a_3 e^{k_2 x} + a_4 e^{-k_2 x} \qquad \text{pentru} \quad x > 0$$

Funcţiile proprii trebuie să fie funcţii de modul pătrat integrabile. Din acest motiv ele nu trebuie să tindă spre valori infinite. Atunci $a_3 = 0$ şi

$$\psi_{II} = a_4 e^{-k_2 x}$$

Condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată se pun în punctul $x = 0$. Astfel:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}$$

Rezultă

$$a_1 + a_2 = a_4$$

şi

$$ik_1 a_1 - ik_1 a_2 = -k_2 a_4$$

de unde

$$a_2 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} a_1 \quad \text{şi} \quad a_4 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} a_1$$

Notăm

$$A' = \frac{a_1}{k_1 + ik_2}$$

Atunci funcţia proprie a energiei este:

$$\psi_I(x) = A'[(k_1 + ik_2)e^{ik_1 x} + (k_1 - ik_2)e^{-ik_1 x}]$$

$$\psi_{II}(x) = 2k_1 A' e^{-k_2 x} \qquad x > 0$$

Dacă A' este număr real soluţia este reală. Este convenabil să introducem unghiul α definit prin:

$$\alpha = \arg(k_1 + ik_2)$$

$$\sin\alpha = \frac{k_2}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \quad \text{şi} \quad \cos\alpha = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} = \sqrt{\frac{E}{U_0}}$$

Atunci:

$$\psi_I = 2A'\sqrt{k_1^2 + k_2^2}\cos(k_1 x + \alpha) \quad \text{pentru} \quad x < 0$$

$$\psi_{II} = 2k_1 A' e^{-k_2 x} \quad \text{pentru} \quad x > 0$$

Notând:

$$2A'\sqrt{k_1^2 + k_2^2} = C$$

$$\psi_I = C\cos(k_1 x + \alpha)$$

$$\psi_{II} = C\sqrt{\frac{E}{U_0}} e^{-k_2 x}$$

Funcţia $\psi(x)$ nu este integrabilă modul pătrat. Constanta C poate fi determinată dintr-o condiţie de normare în sens generalizat.

2.2.11 Să se determine spectrul de energii şi funcţiile proprii corespunzătoare ale unei particule a cărei energie potenţială este (vezi Fig. 2.4):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ V_0 & |x| \geq a \end{cases}$$

Să se normeze funcţiile proprii corespunzătoare la valori proprii din spectrul discret.

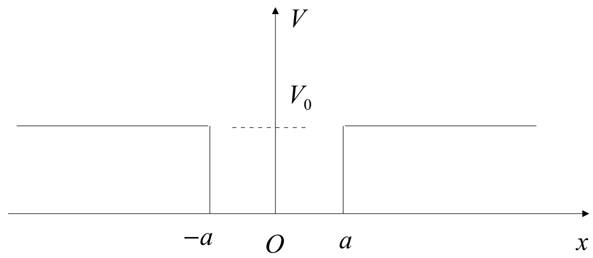

Fig. 2.4

Soluţie

Spectrul energiei este un spectru mixt: discret când $E < V_0$ şi continuu când $E > V_0$.
Notăm funcţia proprie astfel:

$$\Psi\left(x\right)=\begin{cases}\Psi_I\left(x\right), & x\leq -a\\ \Psi_{II}(x), & -a<x<a\\ \Psi_{III}\left(x\right), & x\geq a\end{cases}$$

$\Psi_I\left(x\right)$ şi $\Psi_{III}\left(x\right)$ sunt soluţii ale ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+V_0\Psi=E\Psi\ ,\ \ |x|\geq a$$

iar Ψ_{II} este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}=E\Psi,\ \ |x|<a$$

În plus trebuiesc îndeplinite condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată în punctele $x = -a$ şi $x = a$.

$$\begin{aligned} \Psi_I(-a) &= \Psi_{II}(-a) \\ \Psi_I^{'}(-a) &= \Psi_{II}^{'}(-a) \\ \Psi_{II}(a) &= \Psi_{III}(a) \\ \Psi_{II}^{'}(a) &= \Psi_{III}^{'}(a) \end{aligned}$$

a. Când $E < V_0$ spectrul de valori este discret.
În acest caz notăm cu:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Cu aceste notaţii ecuaţia Schrödinger pentru cazul $|x| \geq a$ devine:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - k_2^2\Psi = 0$$

cu o soluţie generală de formă:

$$\Psi(x) = a\exp(+k_2 x) + b\exp(-k_2 x)$$

iar ecuaţia Schrödinger pentru cazul $|x| < a$ devine:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_1^2\Psi = 0, \ \ |x| < a$$

cu o soluţie generală de forma:

$$\Psi(x) = a\cos k_1 x + b\sin k_1 x$$

Soluţia mărginită pară este de forma:

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= A\exp(k_2 x) \\ \Psi_{II}(x) &= B\cos k_1 x \\ \Psi_{III}(x) &= \Psi_I(-x) = A\exp(-k_2 x) \end{aligned}$$

Această soluţie are o astfel de formă deoarece la $+\infty$ şi $-\infty$ soluţia trebuie să fie finită. Din acest motiv la $-\infty$ termenul ce conţine pe $\exp(-k_2 x)$ nu trebuie să existe, iar la $+\infty$ termenul ce conţine pe $\exp(k_2 x)$ nu trebuie să existe.

Soluţia impară mărginită este de forma:

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= C \exp(k_2 x) \\ \Psi_{II}(x) &= D \sin k_1 x \\ \Psi_{III}(x) &= -C \exp(-k_2 x) \end{aligned}$$

În cazul soluţiei pare condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivate în punctul $x = -a$ sunt:

$$\begin{aligned} A \exp(-k_2 a) &= B \cos k_1 a \\ k_2 A \exp(-k_2 a) &= B k_1 \sin k_1 a \end{aligned}$$

Condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivate în punctul $x = a$ sunt identice cu acestea.

Sistemul de mai sus are soluţii dacă:

$$k_1 \mathrm{tg}\, k_1 a = k_2$$

Notând cu $x = k_1 a$ şi cu $y = k_2 a$, ecuaţia de mai sus devine:

$$y = x \mathrm{tg}\, x$$

În plus $x > 0$, $y > 0$ şi:

$$x^2 + y^2 = k_1^2 a^2 + k_2^2 a^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0$$

Ultimele două condiţii sunt îndeplinite simultan numai pentru anumite valori ale energiei. Aceasta rezultă din rezolvarea numerică sau grafică a acestor ecuaţii.

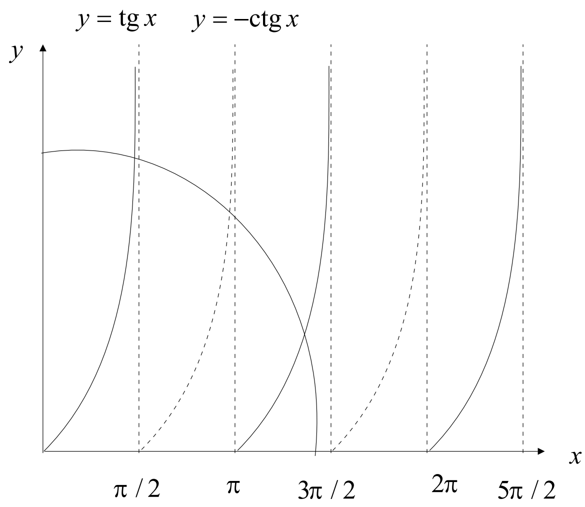

Fig. 2.5

Vom reprezenta funcţia $y = x\mathrm{tg}\, x$ în domeniile în care aceasta este pozitivă (curbele continuii din Fig. 2.5).

Curba $x^2 + y^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0$ este un sfert de cerc. În cazul acestei soluţii, spectrul de energii are cel puţin o valoare proprie în intervalul $(0, V_0)$.

În cazul soluţiei impare condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată în punctul $x = a$ sunt:

$$-C \exp(-k_2 a) = D \sin k_1 a$$
$$C k_2 \exp(-k_2 a) = D k_1 \cos k_1 a$$

Sistemul de mai sus are soluţii dacă:

$$k_2 = -k_1 \mathrm{ctg}\, k_1 a$$

Utilizând aceleaşi relaţii ca şi în cazul anterioar obţinem relaţiile:

$$y = -x\operatorname{ctg} x$$

$$x^2 + y^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0$$

Ecuaţiile de mai sus sunt reprezentate în Fig. 2.5.

Pentru ca să existe cel puţin o soluţie este necesar ca:

$$\left(\frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0\right)^{1/2} > \frac{\pi}{2}$$

În cazul că:

$$\frac{N}{2}\pi \leq \left(\frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0\right)^{1/2} \leq \frac{N+1}{2}\pi$$

cu $N = 0, 1, 2, ...$ numărul stărilor legate este egal cu $N + 1$ (pentru N=0 semnul egalităţii se exclude).

Ţinând cont de discuţia anterioară, din relaţiile de continuitate pentru funcţie şi derivate, pentru soluţia pară, rezultă:

$$B = A\frac{\exp(-k_2 a)}{\cos k_1 a}$$

Soluţia pară este:

$$\begin{aligned}
\Psi_I(x) &= A\exp(k_2 x) & x \leq -a \\
\Psi_{II}(x) &= \frac{A\exp(-k_2 a)}{\cos k_1 a}\cos k_1 x & -a < x < +a \\
\Psi_{III}(x) &= A\exp(-k_2 x) & x \geq a
\end{aligned}$$

Condiţia de normare se exprimă prin relaţia:

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

Rezultă:

$$\int_{-\infty}^{-a} |\Psi_I(x)|^2 \, dx + \int_{-a}^{a} |\Psi_{II}(x)|^2 \, dx + \int_{a}^{+\infty} |\Psi_{III}(x)|^2 \, dx = 1$$

sau:

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{-a} \exp(2k_2 x) dx + |A|^2 \frac{\exp(-2k_2 a)}{\cos^2 k_1 a} \int_{-a}^{a} \cos^2 k_1 x dx$$
$$+ |A|^2 \int_{a}^{+\infty} \exp(-2k_2 x) \, dx = 1$$

$$|A|^2 \left[\frac{1}{2k_2} \exp(-2k_2 a) + \frac{\exp(-2k_2 a)}{\cos^2 k_1 a} a + \frac{1}{2k_2} \exp(-2k_2 a) \right] = 1$$

$$|A|^2 \left[\frac{1}{k_2} + \frac{a}{\cos^2 k_1 a} \right] \exp(-2k_2 a) = 1$$

În plus mai avem relaţia:

$$\operatorname{tg} k_1 a = \frac{k_2}{k_1}$$
$$\frac{1}{\cos^2 k_1 a} = \operatorname{tg}^2 k_1 a + 1 = \frac{k_2^2}{k_1^2} + 1$$

adică:

$$|A|^2 \exp\left(-2k_2a\right)\left[\frac{1}{k_2} + a\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2}\right] = 1$$

şi:

$$|A|^2 = \frac{k_2k_1^2 \exp\left(2k_2a\right)}{k_1^2 + ak_1\left(k_2^2 + k_1^2\right)}$$

În mod analog pentru soluţia impară din relaţiile de continuitate pentru funcţie şi derivate rezultă :

$$D = -C\frac{\exp\left(-k_2a\right)}{\sin k_1a}$$

Soluţia impară este:

$$\begin{aligned}
\Psi_I\left(x\right) &= C\exp\left(k_2x\right) && x \leq -a \\
\Psi_{II}\left(x\right) &= -C\frac{\exp(-k_2a)}{\sin k_1a} && -a < x < a \\
\Psi_{III}\left(x\right) &= -C\exp\left(-k_2x\right) && x \geq a
\end{aligned}$$

Punând condiţia de normare pentru această funcţie, rezultă:

$$|C| = |A|$$

b. Când $E > V_0$ spectrul este continuu:
Notăm cu:

$$k_2^{'} = \sqrt{\frac{2m\left(E - V_0\right)}{\hbar^2}}; \qquad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Ecuaţiile Schrödinger devin:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_2^{'2}\Psi = 0, \qquad & \text{pentru } |x| \geq a \\ \frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_1^2\Psi = 0, \qquad & \text{pentru } |x| < a \end{aligned}$$

Soluţia pară este:

$$\begin{aligned} \Psi_I &= A_1 \sin k_2^{'} x + A_2 \cos k_2^{'} x & x \leq -a \\ \Psi_{II} &= B \cos k_1 x & -a < x < a \\ \Psi_{III} &= \Psi_I(-x) = -A_1 \sin k_2^{'} x + A_2 \cos k_2^{'} x & x \geq a \end{aligned}$$

Condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată în punctul $x = a$ sunt:

$$\begin{aligned} B \cos k_1 a &= -A_1 \sin k_2^{'} a + A_2 \cos k_2^{'} a \\ -Bk_1 \sin k_1 a &= -A_1 k_2^{'} \cos k_2^{'} a - A_2 k_2^{'} \cos k_2^{'} a \end{aligned}$$

Condiţiile acestea pot fi îndeplinite pentru orice valoare a energiei (acesta este un sistem de 2 ecuaţii cu 3 necunoscute). Vom exprima A_1 şi A_2 în funcţie de B. Rezultă:

$$A_1 = \frac{Bk_1 \sin k_1 a \cos k_2^{'} a - Bk_2^{'} \cos k_1 a \sin k_2^{'} a}{k_2^{'}}$$

$$A_2 = B \frac{k_1 \sin k_1 a \sin k_2^{'} a + k_2^{'} \cos k_1 a \cos k_2 a}{k_2^{'}}$$

Soluţia pară este:

$$\begin{aligned}
\Psi_I(x) &= B\left[\cos k_1 a \cos k_2^{'}(x+a) + \frac{k_1}{k_2^{'}} \sin k_1 a \sin k_2^{'}(x+a)\right] \\
x &\leq -a \\
\Psi_{II}(x) &= B \cos k_1 a \qquad\qquad -a < x < a \\
\Psi_{III}(x) &= B\left[\cos k_1 a \cos k_2^{'}(x-a) - \frac{k_1}{k_2^{'}} \sin k_1 a \sin k_2^{'}(x-a)\right] \\
x &\geq a
\end{aligned}$$

Soluţia impară rezultă printr-un calcul analog celui anterior ca fiind:

$$\begin{aligned}
\Psi_I(x) &= C\left[-\sin k_1 a \cos k_2^{'}(x+a) + \frac{k_1}{k_2^{'}} \cos k_1 a \sin k_2^{'}(x+a)\right] \\
x &\leq -a \\
\Psi_{II}(x) &= C \sin k_1 a \qquad\qquad -a < x < a \\
\Psi_{III}(x) &= C\left[\sin k_1 a \cos k_2^{'}(x-a) + \frac{k_1}{k_2^{'}} \cos k_1 a \sin k_2^{'}(x-a)\right] \\
x &\geq a
\end{aligned}$$

2.2.12 Să se calculeze valorile posibile ale energiei unei particule în groapa de potenţial:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ V_0 & x > a \end{cases}$$

Să se determine adâncimea minimă a gropii de potenţial V_0 pentru ca să existe stări legate (Fig. 2.6).

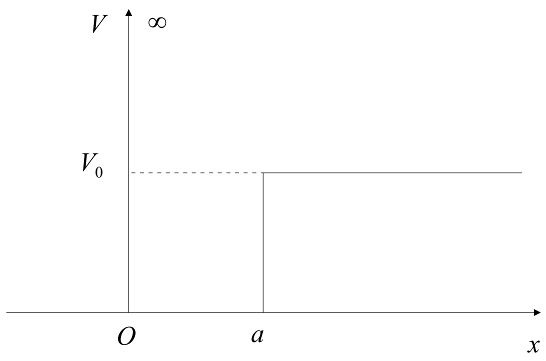

Fig. 2.6

Soluţie

Energiile stărilor legate se vor încadra în intervalul $(0, V_0)$. În regiunea $x < 0$, $\Psi_I(x) = 0$ ceea ce din punct de vedere fizic arată că regiunea este inaccesibilă particulei. Pentru celelalte regiuni funcţia proprie a energiei o vom nota cu:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_{II}(x) & 0 < x < a \\ \Psi_{III}(x) & x > a \end{cases}$$

unde Ψ_{II} este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} = E\Psi_{II}$$

iar Ψ_{III} este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_{III}}{dx^2} + V_0\Psi_{III} = E\Psi_{III}$$

În plus trebuiesc îndeplinite condiţiile de continuitate a funcţiei în punctul $x = 0$ şi de continuitate pentru funcţie şi derivată în punctul $x = a$.

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0)$$
$$\Psi_{II}(a) = \Psi_{III}(a)$$
$$\Psi'_{II}(a) = \Psi'_{III}(a)$$

Notăm: $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ şi ecuaţia pentru Ψ_{II} devine:

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + k_1^2\Psi_{II} = 0, \qquad 0 < x < a$$

Rezultă:

$$\Psi_{II}(x) = A\exp(ik_1x) + B\exp(-ik_1x)$$

Notăm cu:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Ecuaţia Schrödinger pentru Ψ_{III} devine:

$$\frac{d^2\Psi_{III}}{dx^2} - k_2^2\Psi_{III} = 0, \qquad \text{pentru } x > a$$

Rezultă:

$$\Psi_{III} = C\exp(k_2x) + D\exp(-k_2x)$$

Pentru ca soluţia să fie mărginită la infinit este necesar ca $C = 0$.

$$\Psi_{III} = D\exp(-k_2x)$$

Atunci condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată devin:

$$\begin{cases} A + B = 0 \\ A\exp(ik_1a) + B\exp(-ik_1a) = D\exp(-k_2a) \\ ik_1A\exp(ik_1a) - ik_1B\exp(-ik_1a) = -k_2D\exp(-k_2a) \end{cases}$$

Din prima ecuaţie: $B = -A$. Sistemul de ecuaţii de mai sus se reduce la:

$$A[\exp(ik_1a) - \exp(-ik_1a)] = D\exp(-k_2a)$$
$$ik_1A[\exp(ik_1a) + \exp(-ik_1a)] = -k_2D\exp(-k_2a)$$

sau:

$$2iA\sin k_1a = D\exp(-k_2a)$$
$$2iAk_1\cos k_1a = -k_2D\exp(-k_2a)$$

Sistemul de mai sus are soluţii dacă:

$$\operatorname{tg} k_1a = -\frac{k_1}{k_2}$$

Notând cu $x = k_1a$ şi cu $y = k_2a$, ecuaţia de mai sus se scrie ca:

$$\operatorname{tg} x = -\frac{x}{y}$$

sau:

$$y = -x\operatorname{ctg} x$$

În plus $x > 0$, $y > 0$ şi:

$$x^2 + y^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 = k^2$$

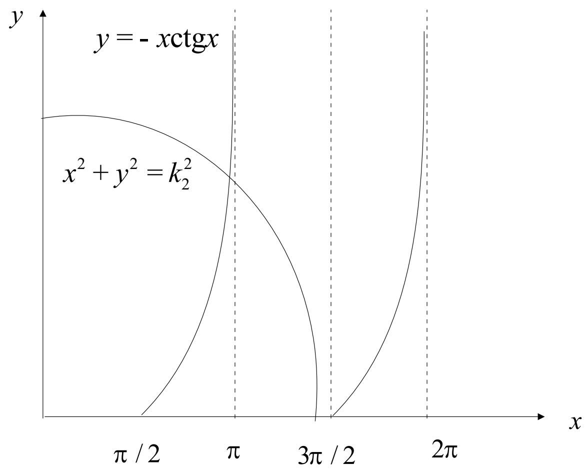

Fig. 2.7

Ultimele condiţii sunt îndeplinite simultan numai pentru anumite valori ale energiei. În Fig. 2.7 sunt reprezentate cele două ecuaţii.

Pentru a exista cel puţin o soluţie este necesar ca :

$$\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2\right)^{1/2} > \frac{\pi}{2}$$

sau:

$$a^2V_0 \geq \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}$$

de unde:

$$V_0 > \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}\frac{1}{a^2}$$

Funcţia de undă se determină din condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată.

$$D = 2iA \sin k_1 a \exp(k_2 a)$$

În plus $A = -B$ şi atunci:

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= 0 \qquad & x \le 0 \\ \Psi_{II}(x) &= 2A \cos k_2 x \qquad & 0 < x < a \\ \Psi_{III}(x) &= 2iA \sin k_1 a \exp(k_2 a) \exp(-k_2 x) \qquad & x \ge a \end{aligned}$$

Observăm că:

$$|\Psi_{III}|^2 \sim \exp(-2k_2 x)$$

adică în regiunea $x > 0$ probabilitatea de a găsi particula scade exponenţial cu creşterea lui x.

2.2.13 Electronii de conducţie din metale sunt menţinuţi în interiorul acestora de către un potenţial care, într-un model simplificat este (vezi Fig. 2.8):

$$V(x) = \begin{cases} -V_o & x < 0 \\ 0 & x \ge 0 \end{cases}$$

Să se determine coeficienţii de reflexie şi transmisie la suprafaţa metalului pentru electronii ce provin din interiorul metalului.

Soluţie

Considerând $\psi(x,t)$ funcţia de undă a particulei, atunci densitatea de probabilitate de localizare este:

$$P(x,t) = \psi^* \psi$$

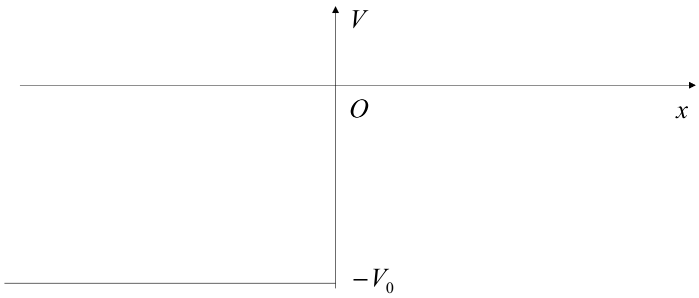

Fig. 2.8

şi densitatea curentului probabilităţii de localizare este:

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

Într-o stare de energie bine determinată, funcţia de undă are expresia:

$$\psi(x,t) = u(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

unde $u(x)$ este funcţia proprie corespunzătoare energiei E. Într-o astfel de stare, P şi j nu depind de timp. Astfel:

$$\begin{aligned} P &= u^*u \\ j &= \frac{\hbar}{2mi}\left(u^*\frac{du}{dx} - u\frac{du^*}{dx}\right) \end{aligned}$$

a. $-V_o < E < 0$

Notăm funcţia proprie a energiei:

$$u(x) = \begin{cases} u_I(x) & x < 0 \\ u_{II}(x) & x \geq 0 \end{cases}$$

cu condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată în punctul $x = 0$:

$$\begin{aligned} u_I(0) &= u_{II}(0) \\ u_I'(0) &= u_{II}'(0) \end{aligned}$$

unde u_I este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2u_I}{dx^2} - V_o u_I = E u_I$$

iar u_{II} este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{II}}{dx^2} = E u_{II}$$

Notăm

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(V_o - |E|\right)}$$

Atunci, ecuaţia din prima regiune devine:

$$\frac{d^2u_I}{dx^2} + k_1^2 u_I = 0$$

Ea are soluţia:

$$u_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad x < 0$$

Notăm cu:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Atunci, ecuaţia din a doua regiune devine:

$$\frac{d^2u_{II}}{dx^2} - k_2^2 u_{II} = 0$$

cu soluţia:

$$u_{II}(x) = Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x} \qquad x > 0$$

Din condiţia de mărginire a funcţiei rezultă $C \equiv 0$ şi

$$u_{II}(x) = De^{-k_2 x}$$

Condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată impuse în punctul $x = 0$, conduc la următorul sistem:

$$\begin{aligned} A + B &= D \\ ik_1 A - ik_1 B &= -k_2 D \end{aligned}$$

Atunci:

$$\begin{aligned} D &= 2A\frac{ik_1}{ik_1 - k_2} \\ B &= A\frac{(ik_1 + k_2)}{(ik_1 - k_2)} \end{aligned}$$

ceea ce înseamnă că spectrul de energii este continuu şi nedegenerat. Atunci, funcţia de stare va avea forma:

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} & x < 0 \\ De^{-k_2 x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Calculând densitatea curentului de probabilitate obţinem, pentru $x < 0$:

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{2m} k_1 [(A^* + B^*)(A - B) - (A + B)(-A^* + B^*)] \\ &= \frac{\hbar k_1}{m} [|A|^2 - |B|^2] \end{aligned}$$

Dacă ţinem cont de relaţia dintre A şi B obţinută mai sus, rezultă:

$$j = 0$$

Pentru a interpreta acest rezultat vom ţine cont de faptul că, pentru $x < 0$ termenul Ae^{ik_1x} din soluţia ecuaţiei atemporale Schrödinger descrie partea atemporală din unda ce se propagă în sensul axei Ox. Pentru această undă:

$$j_i = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2$$

reprezintă densitatea curentului incident. Termenul Be^{-ik_1x} descrie partea atemporală din unda ce se propagă în sens invers axei Ox. Pentru această undă

$$j_r = -\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2$$

reprezintă densitatea curentului reflectat.

Cum $|A| = |B|$ rezultă că densitatea de localizare globală va fi :

$$j = j_i + j_r = 0$$

În această situaţie, coeficientul de reflexie R definit ca:

$$R = -\frac{j_r}{j_i}$$

este:

$$R = 1$$

Pentru cazul $x > 0$ va rezulta $j = 0$, adică densitatea curentului de probabilitate de localizare transmis în această regiune este nulă. Atunci coeficientul de transmisie definit ca:

$$T = \frac{j_t}{j_i} = 0$$

Ca şi în cazul clasic, electronul ce posedă energie cinetică mai mică decât înălţimea treptei de potenţial se va reflecta. Totuşi, spre deosebire de cazul clasic, există o probabilitate de a găsi electronul în regiunea $x > 0$ (în exteriorul metalului). Aceasta este:

$$P = u_{II} u_{II}^* = D^2 e^{-2k_2 x} = 4|A|^2 \cdot \frac{V_o - |E|}{V_o} e^{-2k_2 x}$$

Fenomenul este analog cu cel al reflexiei totale din optică. Din punct de vedere al opticii geometrice, trecerea luminii dintr-un mediu cu indice de refracţie mai mare într-un mediu cu indice de refracţie mai mic, nu este posibilă dacă unghiul de incidenţă depăşeşte unghiul limită. În optica ondulatorie se arată că, în cazul acesta unda luminoasă (caracterizată prin $\vec{E}$) pătrunde în ce-l de-al doilea mediu, iar intensitatea ei descreşte tot după o lege exponenţială.

b. $E > 0$

Funcţia proprie a energiei o vom nota ca şi în cazul precedent prin u_I şi u_{II} îndeplinind aceleaşi condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată. Notăm cu:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E + V_o)}{\hbar^2}}$$

iar ecuaţia Schrödinger devine:

$$\frac{d^2u_I}{dx^2} + k_1^2 u_I = 0 \qquad x < 0$$

cu soluţia:

$$u_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad x < 0$$

Notăm cu:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

iar ecuaţia Schrödinger devine:

$$\frac{d^2u_{II}}{dx^2} + k_2^2 u_{II} = 0 \qquad x \geq 0$$

Ea are soluţia:

$$u_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \qquad x > 0$$

Funcţia de undă se va scrie, pentru acest caz:

$$u(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & x > 0 \end{cases}$$

Termenul ce conţine pe A reprezintă partea atemporală a undei plane ce soseşte la treapta de potenţial (undă incidentă); termenul cu B reprezintă unda reflectată, cel cu C unda transmisă iar cel cu D unda care soseşte din exterior la suprafaţa metalului. Deoarece unda care trece de treapta de potenţial nu mai întâlneşte un alt obstacol, aceasta ultimă undă nu există şi din acest motiv considerăm $D = 0$. Condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivată conduc la sistemul:

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ k_1(A - B) &= k_2 C \end{aligned}$$

Rezultă:

$$\begin{aligned} B &= A\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ C &= A\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{aligned}$$

Notăm cu:

$$\begin{aligned} u_i &= Ae^{ik_1x} && \text{partea atemporală a undei incidente} \\ u_r &= Be^{-ik_1x} && \text{partea atemporală a undei reflectate} \\ u_t &= Ce^{ik_2x} && \text{partea atemporală a undei transmise} \end{aligned}$$

Vom obţine pentru densitatea curentului de probabilitate de localizare expresiile:

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2 \\ j_r &= -\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2 \\ j_t &= \frac{\hbar k_2}{m}|C|^2 \end{aligned}$$

Atunci coeficienţii de reflexie şi respectiv de transmisie vor fi:

$$\begin{aligned} R &= -\frac{j_r}{j_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \\ T &= \frac{j_t}{j_i} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} \end{aligned}$$

Ţinând cont de expresiile pentru k_1 şi k_2, coeficienţii R şi T vor avea forma:

$$\begin{aligned} R &= \left(\frac{\sqrt{E+V_o}-\sqrt{E}}{\sqrt{E+V_o}+\sqrt{E}}\right)^2 = \frac{V_o^2}{(\sqrt{E+V_o}+\sqrt{E})^4} \\ T &= \frac{4\sqrt{(E+V_o)E}}{(\sqrt{E+V_o}+\sqrt{E})^2} \end{aligned}$$

În conformitate cu mecanica clasică, atunci când $E > 0$, electronul nu poate fi reflectat, adică acesta posedă suficientă energie pentru a se elibera din interiorul metalului.
În cazul problemei tratată cuantic, rezultă existenţa unei probabilităţi de reflexie diferită de zero (se elimină cazul banal $V_o = 0$).

Dacă $E \gg V_o$

$$R \simeq \frac{V_o^2}{16E^2}$$

adică, probabilitatea de reflexie scade rapid cu creşterea energiei.

Dacă $E > 0$ şi $E \ll V_o$, atunci coeficientul de reflexie va fi:

$$R = \frac{1}{\left(\sqrt{\frac{E}{V_o}+1}+\sqrt{\frac{E}{V_o}}\right)^4} \simeq \left(1-\sqrt{\frac{E}{V_o}}\right)^4 \simeq 1-4\sqrt{\frac{E}{V_o}}$$

2.2.14 Să se determine coeficienţii de transmisie şi de reflexie pentru o particulă ce se mişcă în sensul axei Ox şi întâlneşte bariera de potenţial:

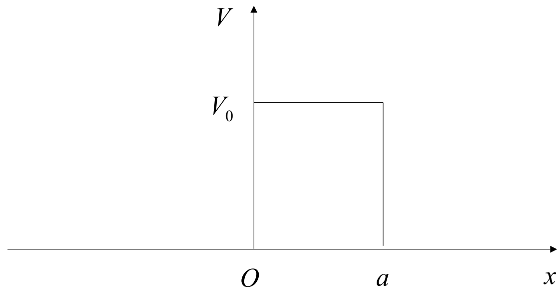

Fig. 2.9

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

în cazurile $0 < E < V_0$ şi $E > 0$ (vezi Fig. 2.9).

Soluţie:

a. $0 < E < V_0$

Notăm funcţia proprie a energiei cu:

$$u(x) = \begin{cases} u_I(x) & x < 0 \\ u_{II}(x) & 0 \leq x \leq a \\ u_{III}(x) & x > 0 \end{cases}$$

cu condiţiile de continuitate pentru funcţie şi derivate în punctul

$x = 0$ şi $x = a$:

$$u_I(0) = u_{II}(0)$$
$$u_I^{'}(0) = u_{II}^{'}(0)$$
$$u_{II}(a) = u_{III}(a)$$
$$u_{II}^{'}(a) = u_{III}^{'}(a)$$

$u_I(x)$ este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_I}{dx^2} = Eu_I \qquad x < 0$$

$u_{II}(x)$ este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{II}}{dx^2} + V_0u_{II} = Eu_{II} \qquad 0 \leq x \leq a$$

$u_{III}(x)$ este o soluţie a ecuaţiei:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{III}}{dx^2} = Eu_{III} \qquad x > a$$

Notăm cu:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{şi} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{2.1}$$

Ecuaţiile Schrödinger pentru cele trei regiuni devin:

$$\frac{d^2u_I(x)}{dx^2} + k_1^2u_I(x) = 0, \qquad x < 0$$

$$\frac{d^2u_{II}(x)}{dx^2} - k_2^2u_{II}(x) = 0, \qquad 0 \leq x \leq a$$

$$\frac{d^2u_{III}(x)}{dx^2} + k_1^2 u_{III}(x) = 0, \qquad x > a$$

Soluţiile acestor ecuaţii sunt:

$$\begin{aligned} u_I(x) &= A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x), \qquad & x < 0 \\ u_{II}(x) &= A_2 \exp(k_2x) + B_2 \exp(-k_2x), \qquad & 0 \leq x \leq a \\ u_{III}(x) &= A_3 \exp(ik_1x) + B_3 \exp(-ik_1x), \qquad & x > a \end{aligned}$$

Interpretarea acestora este următoarea:

Termenul $A_1 \exp(ik_1x)$ reprezintă partea atemporală a undei incidente ce se propagă în sensul axei Ox.

Termenul $B_1 \exp(-ik_1x)$ reprezintă partea atemporală a undei reflectate de barieră care se propagă în sens invers axei Ox.

În regiunea in care $x > a$ se propagă numai unda transmisă a cărei parte atemporală este $A_3 \exp(ik_1x)$.

Cum în această regiune nu există undă care să se propage în sens invers axei Ox, $B_3 \equiv 0$. Ţinând cont de rezultatele de la problema precedentă, obţinem densitatea curentului de probabilitate de localizare incident:

$$j_i = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2$$

densitatea curentului de probabilitate de localizare reflectat:

$$j_r = -\frac{\hbar k_1}{m} |B_1|^2$$

şi densitatea curentului de localizare transmis:

$$j_t = \frac{\hbar k_1}{m} |A_3|^2$$

Coeficientul de transmisie este:

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

iar cel de reflexie este:

$$R = -\frac{j_r}{j_i} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$$

Pentru a determina coeficienţii A_1, A_2, A_3, A_4 ţinem cont de relaţiile de continuitate pentru funcţie şi derivate. Rezultă:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2$$

$$A_2 \exp(k_2 a) + B_2 \exp(-k_2 a) = A_3 \exp(ik_1 a)$$

$$k_2 A_2 \exp(k_2 a) - k_2 B_2 \exp(-k_2 a) = ik_1 A_3 \exp(ik_1 a)$$

Se obţine:

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4ik_1k_2}{(k_2 + ik_1)^2 \exp(-k_2 a) - (k_2 - ik_1)^2 \exp(k_2 a)}$$

sau:

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ik_1k_2}{-[k_2^2 - k_1^2]\mathrm{sh} k_2 a + 2ik_1k_2 \mathrm{ch} k_2 a}$$

Coeficientul de transmisie este:

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_2^2 - k_1^2)^2 \mathrm{sh}^2 k_2 a + 4k_1^2k_2^2 \mathrm{ch}^2 k_2 a}$$

$$\mathrm{ch}^2 x = 1 + \mathrm{sh}^2 x$$

Astfel:

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_2^2 + k_1^2)^2 \mathrm{sh}^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}$$

Cum:

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{şi } k_2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

avem:

$$k_1^2 + k_2^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad \text{şi } k_1^2 k_2^2 = \frac{4m^2 E (V_0 - E)}{\hbar^4}$$

Rezultă:

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \mathrm{sh}^2 k_2 a + 4E(V_0 - E)}$$

Coeficientul de reflexie :

$$R = 1 - T = \frac{V_0^2 \mathrm{sh}^2 k_2 a}{V_0^2 \mathrm{sh}^2 k_2 a + 4E(V_0 - E)}$$

Deoarece $T \neq 0$ particula trece prin bariera de potenţial cu o anumită probabilitate, chiar dacă energie ei este insuficientă din punct de vedere clasic pentru aceasta. Aceasta se petrece ca şi cum în bariera de potenţial apare un tunel prin care particula penetrează spre cealaltă parte. Din acest motiv efectul se numeşte efect tunel.

Să studiem coeficientul de transmisie atunci când $E \ll V_0$. Atunci:

$$T \simeq \frac{4E}{V_0 \mathrm{sh}^2 k_1 a}$$

În cazul când:

$$k_2 a \gg 1$$

putem aproxima:

$$\mathrm{sh}^2 k_2 a \simeq \frac{\exp(2k_2 a)}{4}$$

În această situaţie:

$$\mathrm{sh}^2 k_2 a \gg 1$$

Rezultă:

$$T \simeq 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp(-2k_2 a) \ll 1$$

Dacă alegem $V_0 - E = 5$ MeV putem calcula factorul exponenţial pentru diverse grosimi ale barierei. Rezultatele sunt prezentate în tabelul de mai jos:

a(Å)	1	1,3	1,5	1,8	2	5	10
$e^{-2k_2 a}$	0,1	0,04	0,03	0,016	0,008	$5{,}5\times 10^{-7}$	$1{,}4\times 10^{-12}$

b. În cazul $E > V_0$ trecerea o putem face prin înlocuirea lui k_2 cu ik_2' unde $k_2' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$.

În acest caz, în rezultatul final sh$k_2 a$ se înlocuieşte cu $\sin k_2' a$ şi $V_0 - E$ cu $E - V_0$.

Atunci:

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 k_2' a + 4(E - V_0) V_0}$$

$$R = \frac{V_0^2 \sin^2 k_2' a}{V_0^2 \sin^2 k_2' a + 4\left(E - V_0\right) V_0}$$

În acest ultim caz atunci când:

$$\sin k_2' a = 0, \qquad R = 0$$

adică bariera reflectă particula. Rezultă:

$$k_2' a = n\pi$$

$$k_2'^2 a^2 = n^2 \pi^2$$

$$\frac{2m\left(E - V_0\right) a^2}{\hbar^2} = n^2 \pi^2$$

$$E - V_0 = n^2 \pi^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

şi prin urmare:

$$E_n = V_0 + n^2 \pi^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

Aceasta poartă numele de energie de rezonanţă.

Pentru energii foarte mari ($E \gg V_0$)

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4(E-V_0)V_0} \sin^2 k_2' a} \simeq \frac{1}{1 + \frac{V_0}{4E} \sin^2 k_2' 2a} \simeq 1 - \frac{V_0}{4E} \sin^2 k_2' a$$

şi practic particula nu se poate reflecta.

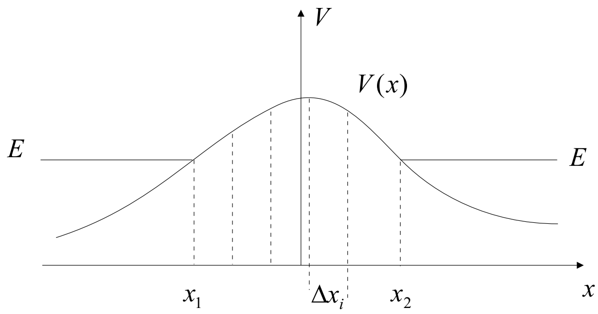

Fig. 2.10

2.2.15 O particulă de energie E, pătrunde datorită efectului tunel într-o barieră de potenţial $V = V(x)$ în punctul de coordonată x_1 şi o părăseşte în punctul de coordonată x_2. Să se studieze coeficientul de transmisie (vezi Fig. 2.10).

Soluţie:

Presupunem că energia potenţială $V(x)$ este o funcţie netedă. Împărţim domeniul $[x_1, x_2]$ în intervale Δx_i astfel încât să considerăm trecerea particulei printr-o succesiune de bariere de potenţial. Vom alege în aşa fel intervalele Δx_i astfel încât:

$$\sqrt{\frac{2m\left[V(x) - E\right]}{\hbar^2}}\ \Delta x_i \gg 1$$

adică coeficientul de transmisie pentru bariera de potenţial de lăţime Δx_i să poată fi aproximată cu:

$$T = 16\frac{E\left[V(x) - E\right]}{V_0^2(x)} \exp\left[\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{8m\left[V(x) - E\right]}\right)\Delta x_i\right]$$

Oricum exponenţiala este termenul predominant. Atunci putem să considerăm coeficientul de transmisie:

$$T_i \sim \exp\left[\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{8m\left[V\left(x\right) - E\right]}\right)\Delta x_i\right]$$

Coeficientul de transmisie total este:

$$T = \Pi T_i \sim \Pi \exp\left[\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{8m\left[V\left(x\right) - E\right]}\right)\Delta x_i\right]$$

$$T \sim \exp\left[\sum\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{8m\left[V\left(x\right) - E\right]}\right)\Delta x_i\right]$$

Trecând la limită rezultă:

$$T = C \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int\limits_{x_1}^{x_2}\sqrt{8m\left[V\left(x\right) - E\right]}dx\right]$$

unde C este o constantă.

2.2.16 Se constată că, sub influenţa unui câmp electric puternic electronii încep să părăsească metalul la temperaturi oricât de joase. Fenomenul a fost numit " emisie la rece ", iar curentul obţinut, curent autoelectronic. Considerăm că electronii în afara metalului au energia potenţială nulă, iar în interiorul metalului se află într-o groapă de potenţial $-V_0$ pe nivele energetice astfel

încât energia minimă pentru a ieşi din groapă este W (lucru de extracţie).
a. Să se calculeze în mod clasic intensitatea câmpului electric la care ar trebui să apară curentul autoelectronic.
b. Să se calculeze (cuantic) dependenţa curentului autoelectronic de intensitatea câmpului electric aplicat.

Soluţie:

a. Considerăm metalul într-un câmp electric de intensitate $\mathcal{E}$. Forţă care acţionează asupra unui electron se compune din forţa $e\mathcal{E}$ cu care câmpul electric acţionează asupra electronului şi din forţa de imagine electrică. Aceasta din urmă apare deoarece însuşi electronul crează pe suprafaţa metalului, prin influenţă sarcini electrice care-l atrag, ca şi cum la o distanţă egală cu distanţa electronului la metal, în interiorul metalului se află o sarcina $+e$. Atunci:

$$F = e\mathcal{E} - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 x^2}$$

unde cu x am notat distanţa electronului faţă de suprafaţa metalului. Energia electrostatică este:

$$V\left(x\right) = -\int_0^x F\left(x\right)dx = -\int_0^x e\mathcal{E}dx + \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0}\int_0^x \frac{dx}{x^2}$$

$$V\left(x\right) = -e\mathcal{E}x - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0}\frac{1}{x}$$

Valoarea maximă a acestei energii potenţiale se obţine acolo unde:

$$\frac{dV}{dx} = 0$$

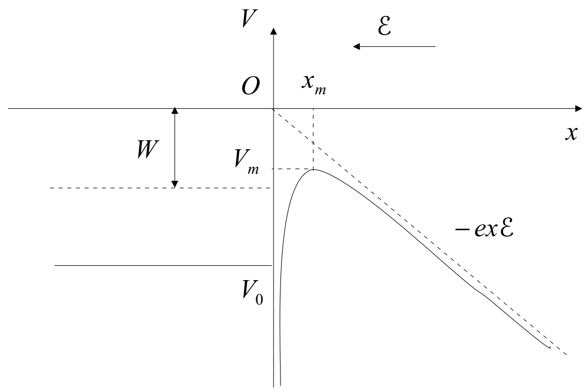

Fig. 2.11

Rezultă:

$$-e\mathcal{E}+\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0}\frac{1}{x^2}=0$$

şi:

$$x_m=\frac{1}{4}\left(\frac{e}{\pi\varepsilon_0\mathcal{E}}\right)^{1/2}$$

Atunci:

$$V_m=V\left(x_m\right)=-\frac{1}{2}\left(\frac{e^3\mathcal{E}}{\pi\varepsilon_0}\right)^{1/2}$$

Astfel, sub influenţa câmpului electric, adâncimea gropii de potenţial se micşorează cu valoarea (vezi Fig. 2.11):

$$V_m=-\frac{1}{2}\left(\frac{e^3\mathcal{E}}{\pi\varepsilon_0}\right)^{1/2}$$

Din punct de vedere clasic electronii cu energia E cuprinsă în intervalul $(-V_0, V_m)$ nu pot ieşi din interiorul metalului spre deosebire de cei cu energia cuprinsă în intervalul $(V_m, 0)$

Aceasta face ca lucrul mecanic de extracţie să devină:

$$W' = W - |V_m|$$

Atunci curentul ar trebui să apară când $W' = 0$ adică:

$$W = |V_m| = \frac{1}{2}\left(\frac{e^3\mathcal{E}}{\pi\varepsilon_0}\right)^{1/2}$$

Rezultă:

$$\mathcal{E} = \frac{W^2 4\pi\varepsilon_0}{e^3}$$

Considerând cazul wolframului pentru care $W = 4,9$ eV rezultă:

$$\mathcal{E} \simeq 2 \times 10^8 \text{ V/cm}$$

Cu toate acestea se obţin curenţi neaşteptat de mari chiar pentru câmpuri de 4×10^6 V/cm.

b. În tratarea cuantică trebuie să se ţină seama de efectul tunel. Probabilitatea de străpungere a barierei este dată de transparenţa barierei:

$$T = c\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{8m\left[V\left(x\right)-E\right]}dx\right]$$

În situaţia noastră:

$$V\left(x\right) = -e\mathcal{E}x - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0}\frac{1}{x^2}$$

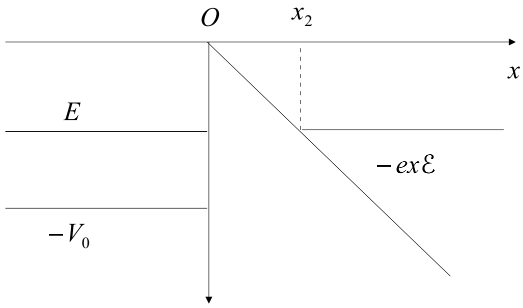

Fig. 2.12

Neglijând termenul datorat forţei imagine energia potenţială va fi de forma din Fig. 2.12.

Punând $|E| = -E$ obţinem:

$$T = c \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{8m\left(|E| - e\mathcal{E}x\right)}dx\right]$$

unde $x_1 = 0$ iar x_2 este punctul în care $E = -e\mathcal{E}x_2$, adică:

$$x_2 = \frac{|E|}{e\mathcal{E}}$$

Integrala de la exponent devine:

$$I = \int_{x_1}^{x_2}\sqrt{8m\left(|E| - e\mathcal{E}x\right)}dx = -\frac{\sqrt{8m}}{e\mathcal{E}}\int_{0}^{x_2}\sqrt{|E| - e\mathcal{E}x}(-e\mathcal{E}dx) =$$

$$I = -\frac{\sqrt{8m}}{e\mathcal{E}}\frac{\left(|E| - e\mathcal{E}x\right)^{3/2}}{\frac{3}{2}}\Bigg|_{0}^{x_2} = \frac{2\sqrt{8m}}{e\mathcal{E}}\,|E|^{3/2}$$

adică:

$$T = c \exp\left(-\frac{4}{\hbar}\frac{\sqrt{2m}}{3e\mathcal{E}}|E|^{3/2}\right)$$

Dacă notăm cu $\alpha = -\frac{4}{\hbar}\frac{\sqrt{2m}}{3eE}|E|^{3/2}$:

$$T = c \exp\left(-\frac{\alpha}{\mathcal{E}}\right)$$

Atunci densitatea de curent de probabilitate urmează aproximativ aceiaşi formă deci:

$$I = I \exp\left(-\frac{\alpha}{\mathcal{E}}\right)$$

În tabelul de mai jos este reprezentat factorul $\exp\left(-\frac{\alpha}{\mathcal{E}}\right)$ şi densitatea de curent pentru $E = -2eV$.

$\mathcal{E}$ (V/cm)	$\exp\left(-\frac{\alpha}{\mathcal{E}}\right)$	I (A/cm^2)
5×10^6	8×10^{-15}	$1,5 \times 10^{-7}$
10^7	$1,3 \times 10^{-6}$	100
2×10^7	$0,013$	4×10^6
3×10^7	1	7×10^8

2.2.17 Definim λ, constanta de dezintegrare a unui nuclid ca fiind probabilitatea de dezintegrare a nucleului în unitatea de timp. Să se demonstreze că în cazul nucleelor α radioactive este valabilă legea aproximativă (Geiger-Nuttal):

$$\ln \lambda = A - \frac{B}{\sqrt{E}}$$

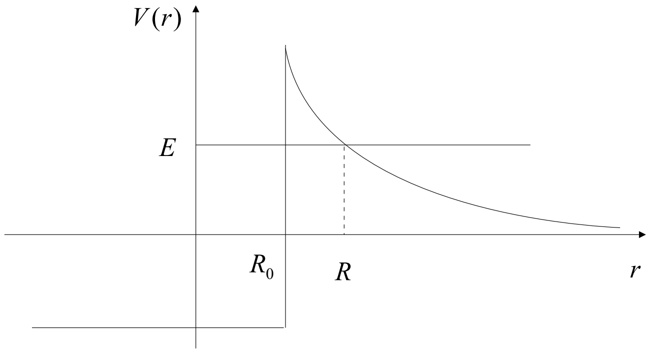

Fig. 2.13

unde $A, B = const$ iar E - este energia cinetică a particulei α atunci când se află foarte departe de nucleu. Se va considera un model simplificat al nucleului în care $V(r) = -V_0$ dacă $r < R_0$, $V(r) = \frac{e_1 e_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ dacă $r > R_0$,($e_1 = Ze$, $e_2 = 2e$). În plus se va considera că λ constanta de dezintegrare este proporţională cu coeficientul de transmisie prin bariera de potenţial (Energiile particulelor α sunt mult mai mici decât înălţimea barierei de potenţial).

Soluţie

Situaţia din problemă este prezentată în Fig. 2.13. Atunci coeficientul de transmisie se scrie ca:

$$T = c \exp\left[-\frac{\sqrt{8m}}{\hbar}\int_{R_0}^{R}\sqrt{(V[r]-E)}\ dr\right]$$

În relaţia anterioară:

$$V\left(r\right)=\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

iar:

$$E=\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0 R}$$

Vom considera integrala:

$$I=\int\limits_{R_0}^{R}\sqrt{\left[V\left(r\right)-E\right]}dr=\int\limits_{R_0}^{R}\sqrt{\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0 r}-\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0 R}}dr$$

$$I=\sqrt{\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0 R}}\int\limits_{R_0}^{R}\left(\sqrt{\frac{R}{r}-1}\right)dr=\sqrt{E}\int\limits_{R_0}^{R}\left(\sqrt{\frac{R}{r}-1}\right)dr$$

Efectuăm schimbarea de variabilă:

$$r=R\cos^2 x$$

Obţinem noile limite de integrare:

$$R=R\cos^2 x \qquad \Rightarrow x_2=0$$

$$R_0=R\cos^2 x \qquad \Rightarrow x_1=\arccos\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}$$

$$dr=-2R\cos x\sin x$$

Atunci:

$$\begin{aligned}
I &= \sqrt{E}\int\limits_{x_1}^{0}\sqrt{\frac{1}{\cos^2}-1}\,(-2R\sin x\cos x)\,dx = 2R\sqrt{E}\int\limits_{0}^{x_1}\sin^2 x dx \\
I &= 2\sqrt{E}R\int\limits^{x_1}\frac{(1-\cos 2x)}{2}dx
\end{aligned}$$

$$I = R\sqrt{E}\,[x_1 - \sin x_1\cos x_1]$$

Ţinând cont de expresia lui x_1 obţinem:

$$I = \sqrt{E}R\left[\arccos\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2} - \left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}\sin(\arccos\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}\right]$$

$$I = \sqrt{E}R\left[\arccos\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2} - \left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}\sqrt{1-\frac{R_0}{R}}\right]$$

Deoarece $E \ll V\,(R_0)$,

$$\frac{e_1 e_2}{4\pi\varepsilon_0 R} \ll \frac{e_1 e_2}{4\pi\varepsilon_0 R_0}$$

rezultă: $R \gg R_0$ şi deci:

$$\frac{R_0}{R} \ll 1$$

Atunci:

$$\arccos\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2} \simeq \frac{\pi}{2} - \left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}$$

$$\sqrt{1-\frac{R_0}{R}} \simeq 1-\frac{1}{2}\frac{R_0}{R}$$

Rezultă:

$$I=\sqrt{E}R\left[\frac{\pi}{2}-\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}-\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}+\frac{1}{2}\left(\frac{R_0}{R}\right)^{3/2}\right]$$

Termenul $\left(\frac{R_0}{R}\right)^{3/2}$ îl neglijăm:

$$I=\sqrt{E}R\left[\frac{\pi}{2}-2\left(\frac{R_0}{R}\right)^{1/2}\right]$$

Ţinem cont de expresia energiei E:

$$R=\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{E} \qquad \sqrt{E}R=\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\sqrt{E}}$$

Atunci:

$$I=\frac{e_1e_2}{\sqrt{E}4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{\pi}{2}-2\left(\frac{4\pi\varepsilon_0}{e_1e_2}E\right)^{1/2}\right]$$

$$I=\frac{\pi}{2}\frac{e_1e_2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\sqrt{E}}-\left(\frac{e_1e_2R_0}{4\pi\varepsilon_0}\right)^{1/2}$$

Factorul de transmisie devine:

$$T=c\exp\left[\frac{\sqrt{8m}}{\hbar}\left(\frac{e_1e_2R_0}{4\pi\varepsilon_0}\right)^{1/2}-\frac{\sqrt{8m}}{\hbar}\frac{\pi e_1e_2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\sqrt{E}}\right]$$

El este proporţional cu probabilitatea de dezintegrare α, adică cu λ. Rezultă:

$$\lambda = c' \exp\left[\sqrt{\frac{8me_1e_2R_0}{4\pi\varepsilon_0}}\frac{1}{\hbar} - \frac{\sqrt{8m}}{\hbar}\frac{\pi e_1 e_2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\sqrt{E}}\right]$$

Logaritmând:

$$\ln\lambda = \ln c' + \sqrt{\frac{8me_1e_2R_0}{4\pi\varepsilon_0}}\frac{1}{\hbar} - \frac{\sqrt{8m}}{\hbar}\frac{\pi e_1 e_2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\sqrt{E}}$$

expresia de mai sus o putem pune sub forma:

$$\ln\lambda = A - \frac{B}{\sqrt{E}}$$

Observaţie: În general nucleele α- radioactive sunt nucleele cu $A > 200$, deci raza nucleului R_0 nu este foarte diferită pentru acestea. Ultima relaţie explică de ce măsurătorile au arătat că energia particulelor α emise de nucleele α radioactive este cuprinsă într-un domeniu relativ îngust de energii (4 MeV-9 MeV), iar λ este cuprins într-un domeniu foarte larg $(10^{-10} - 10^{7})\, s^{-1}$.

2.2.18 Să se găsească funcţiile de undă în stările staţionare şi nivelele de energie ale unui rotator plan care posedă momentul de inerţie I. Analog cu cazul mecanicii clasice în mecanica cuantică prin rotator spaţial se înţelege un sistem descris de hamiltonianul:

$$\hat{H} = \frac{1}{2I}\hat{L}^2$$

unde L este momentul cinetic.

Soluţie:

Ecuatia Schrödinger este

$$\frac{1}{2I}\hat{L}^2\psi = E\psi$$

unde $\hat{L}^2$ este operatorul moment cinetic. Deoarece avem de-a face cu un rotator plan, considerăm că rotaţia are loc în jurul axei Oz. Atunci:

$$\hat{L} = \hat{L}_z = -i\hbar\frac{d}{d\varphi}$$

unde φ este unghiul de rotaţie în jurul axei Oz.

Atunci ecuaţia Schrödinger devine:

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} = E\psi$$

iar

$$\psi = \psi(\varphi)$$

$$\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} + \frac{2IE}{\hbar^2}\psi = 0$$

Notăm:

$$\lambda^2 = \frac{2EI}{\hbar^2}$$

Atunci soluţia ecuaţiei este:

$$\psi = C\exp\left(i\lambda\varphi\right)$$

Punem condiţia

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$$

Atunci:

$$\exp\left(i\lambda\varphi\right) = \exp[i\lambda\left(\varphi + 2\pi\right)]$$

Rezultă:

$$\lambda = m \quad , \quad m \in Z$$

Atunci:

$$m = \sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}} \quad \text{şi} \quad E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$

Din condiţia de normare

$$\int_0^{2\pi} \psi\psi * d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$

rezultă constanta C:

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Astfel în stările staţionare funcţia de undă a rotatorului plan are expresia:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(im\varphi\right)$$

2.2.19 Să se determine funcţiile de undă în stările staţionare şi nivelele de energie ale unui rotator spaţial care posedă momentul de inerţie I.

Soluţie:

Ecuaţia Schrödinger este

$$\frac{1}{2I}\hat{L}^2\psi = E\psi$$

unde exprimăm pe $\hat{L}^2$ în coordonate sferice:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

Ecuaţia Schrödinger devine:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\rho^2} + \frac{2EI}{\hbar^2}\psi = 0$$

Ecuaţia are soluţii care satisfac condiţiile de derivabilitate şi mărginire dacă:

$$\frac{2EI}{\hbar^2} = l(l+1)$$

unde $l = 0, 1, 2, 3...$ iar soluţiile sunt funcţiile sferice:

$$\psi(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi) = P_{lm}(\cos\theta)\phi_m$$

unde

$$\phi_m = e^{im\varphi}$$

iar $P_{lm}(w)$ se numesc polinoame Legendre asociate şi au expresia:

$$P_{lm}(w) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\frac{1}{2^l l!}(1-w^2)^m \frac{d^{l+m}}{dw^{l+m}}(w^2-1)^l$$

pentru $m = 0, 1, 2..., l$. Pentru

$$n = -l, -l+1, ..., -1$$

$$Y_{l,-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y^*_{lm}(\theta, \varphi)$$

Energia nivelelor energetice este:

$$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} \qquad \text{unde} \quad l = 0, 1, 2, 3....$$

2.2.20 Să se determine valorile posibile ale momentului cinetic, probabilităţile de obţinere a acestor valori, precum şi valoarea medie în stările rotatorului plan descrise de funcţia de undă

$$\psi = A\cos^2\varphi$$

Soluţie

Funcţiile de undă asociate stărilor staţionare pentru rotatorul plan sunt:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \qquad m = 0, 1, 2, 3...$$

Acestora le corespunde mărimea $L_z = m\hbar$ pentru momentul cinetic.

$$\psi = A\cos^2\varphi = A\frac{1+\cos 2\varphi}{2} = A\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4}e^{i2\varphi} + \frac{1}{4}e^{-i2\varphi}\right)$$

Comform descompuneri funcţiei de stare după funcţiile de undă asociate strărilor staţionare rezultă că valorile posibile ale momentului cinetic sunt 0, $2\hbar$ şi $-2\hbar$. Probabilitatea de apariţie a valorii zero este:

$$P\left(0\right) = \frac{\frac{1}{4}}{\frac{1}{4} + \frac{1}{16} + \frac{1}{16}} = \frac{2}{3}$$

Pentru valorile $2\hbar$ şi $-2\hbar$ aceste probabilităţi sunt

$$P\left(2\hbar\right) = P\left(-2\hbar\right) = \frac{\frac{1}{16}}{\frac{1}{4} + \frac{1}{16} + \frac{1}{16}} = \frac{1}{6}$$

Valoarea medie a momentului cinetic este $\langle L_z\rangle = \sum L_z P(L_z)$ unde $P(L_z)$ este probabilitatea de apariţie a momentului L_z.

$$\langle L_z\rangle = 0\cdot\frac{2}{3} + 2\hbar\frac{1}{6} + \left(-2\hbar\right)\frac{1}{6} = 0$$

2.2.21 Să se determine nivelele energetice şi funcţiile proprii corespunzatoare electronului din atomul de hidrogen.

Soluţie

Pentru electronul din atomul de hidrogen energia sa potenţială este:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Deoarece atomul se consideră stabil este necesar ca energia totală a sistemului să fie negativă. Din acest motiv vom nota:

$$E = -|E|$$

Deoarece câmpul de forţe în care se află electronul este unul central, soluţia ecuaţiei Schrödinger atemporală

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\psi + V(r)\psi = E\psi$$

va fi de forma:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,Y(\theta,\varphi)$$

unde $Y(\theta,\varphi)$ sunt funcţiile sferice, iar $R(r)$ este partea radială a funcţei de undă. Rezultă:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}R\right] - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R = -|E|\,R$$

Considerăm

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

Atunci:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left[-|E| + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{l(l+1)}{r}\frac{\hbar^2}{2m_e}\right]u(r) = 0$$

Se face schimbarea de variabilă

$$\rho = 2kr$$

şi ecuaţia anterioară devine:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[-\frac{m_e|E|}{2\hbar^2k^2} + \frac{e^2m_e}{4\pi\varepsilon_0 r\hbar^2 k} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u = 0$$

Constanta k trebuie să fie în aşa fel aleasă astfel încât forma ecuaţiei să fie cât mai simplă. Dacă punem

$$\frac{m_e|E|}{2\hbar^2k^2} = \frac{1}{4}$$

k este

$$k = \frac{\sqrt{2m_e|E|}}{\hbar}$$

Se notează

$$\lambda = \frac{Ze^2m_e}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 k} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{\frac{m_e}{2|E|}}$$

Atunci:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u = 0$$

Forma ecuaţiei în zona asimptotică (ρ este foarte mare) este:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{1}{4}u = 0$$

Soluţia ecuaţiei este de forma:

$$u_a = D_1 e^{-\frac{1}{2}\rho} + D_2 e^{\frac{1}{2}\rho}$$

În cazul soluţiei generale, D_1 şi D_2 sunt funcţii de ρ. Pentru ca soluţia să fie mărginită, este nevoie ca $D_2 = 0$.

$$u_a \sim e^{-\frac{1}{2}\rho}$$

Din acest motiv, vom considera o soluţie de forma

$$u = f e^{-\frac{1}{2}\rho}$$

Se obţine ecuaţia pentru f:

$$\frac{d^2f}{d\rho^2} - \frac{df}{d\rho} + \left[\frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f = 0$$

Pe baza a ce s-a discutat anterior este nevoie ca

$$f \sim \rho^{l+1}, \quad \rho > 0$$

Atunci:

$$f(\rho) = \rho^{l+1} g(\rho)$$

Ecuaţia satisfăcută de g este:

$$\rho\frac{d^2g}{d\rho^2} + [2l + 2 - \rho]\frac{dg}{d\rho} + [\lambda - l - 1]g = 0$$

Alegem funcţia g de forma

$$g(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k = 0, \quad C_0 \neq 0$$

care se înlocuieşte în ecuaţia anterioară.

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left[k(k-1) C_k \rho^{k-1} + (2l + 2 - \rho) k C_k \rho^{k-1} + (\lambda - l - 1) C_k \rho^k \right] = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \left[k(k+1) + 2(l+1)(k+1) \right] C_{k+1} + (\lambda - l - 1 - k)\, C_k \right\} \rho^k = 0$$

Se obţine o relaţie între coeficienţi sumei:

$$C_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \lambda}{(k+1)\,(k + 2l + 2)} C_k$$

Pentru k suficient de mare raportul dintre doi coeficienţi succesivi este:

$$\frac{C_{n+1}}{C_n} \sim \frac{1}{k+1}$$

Acest raport este acelaşi cu cel al coeficianţilor sumei:

$$e^{\rho} = 1 + \frac{1}{1!}\rho + \frac{1}{2!}\rho^2 + ... + \frac{1}{k!}\rho^k + \frac{1}{(k+1)!}\rho^{k+1} + ...$$

Astfel, pentru valori mari ale lui ρ suma se comportă ca seria e^{ρ}. Atunci, în domeniul asimptotic:

$$u(r) \sim \rho^{l+1} e^{\frac{\rho}{2}}$$

fapt ce este inacceptabil, deoarece în acest caz partea radială devine nemărginită.

Pentru ca $u(r)$ să fie mărginită trebuie ca seria să se întrerupă, adică $g(\rho)$ să fie un polinom. Fie n_r puterea maximă a lui ρ în funcţia $g(\rho)$.

$$n_r + l + 1 - \lambda = 0$$

Numărul cunatic $n_r = 0, 1, 2, ...$ poartă numele de număr cuantic radial

$$\lambda = n_r + l + 1$$

Introducem notaţia $\lambda = n$, unde n poartă numele de număr cuantic principal. Deoarece $n_r = 0, 1, 2, ...$ şi $l = 0, 1, 2, ...$ atunci n ia valoarile $1, 2, 3, ...$

Din relaţia $n = n_r + l + 1$ obţinem

$$l = n - n_r - 1$$

adică

$$l \leq n - 1$$

Astfel când n este fixat, l poate lua valoarea $0, 1, 2, ..., n-1$.Odată ce parametrul λ este fixat şi valorile proprii ale energiei sunt determinate

$$\frac{e^2}{4\pi_0\varepsilon_0\hbar}\sqrt{\frac{m_e}{2\left|E\right|}} = n$$

Rezultă:

$$E_n = -\frac{m_e}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, ...$$

Pentru determinarea funcţiilor de undă se porneşte de la ecuaţia

$$\rho\frac{d^2g}{d\rho^2}+[2l+2-\rho]\frac{dg}{d\rho}+[\lambda-l-1]g=0$$

care devine:

$$\frac{d^2g}{dz^2}+\left(\frac{c}{z}-1\right)\frac{dg}{dz}-\frac{a}{z}g=0$$

dacă se pune $z=\rho$, $a=l+1-\lambda$, $c=2\left(l+1\right)$

Coeficienţii ecuaţiei au poli de ordin unu. Soluţiile ecuaţiei se pot exprima prin serii de puteri ale variabilei z, care conţin cel mult un număr finit de puteri negative.

$$g=z^{\beta}\sum_{k=0}^{\infty}c_kz^k=\sum_{k=0}^{\infty}c_kz^{k+\beta}$$

Înlocuind expresia lui g în ecuaţia anterioară se obţine:

$$\sum_{k=0}^{\infty}c_k\left(\beta+k\right)\left(\beta+k-1+c\right)z^{k+\beta-2}=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\left(\beta+k+a\right)z^{k+\beta-1}$$

sau

$$c_0\beta\left(\beta-1+c\right)z^{\beta-2}+\sum_{k=0}^{\infty}c_{k+1}\left(\beta+k+1\right)\left(\beta+k+c\right)z^{k+\beta-1}$$
$$=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\left(\beta+k+a\right)z^{k+\beta-1}$$

Pentru ca această egalitatea să fie adevărată este necesar ca:

$$\beta\left(\beta-1+c\right)=0$$

$$c_{k+1}\left(\beta+k+1\right)\left(\beta+k+c\right)=c_k\left(\beta+k+a\right)$$

Rezultă că $\beta=0$, sau $\beta=1-c$. Există două soluţii liniar independente ale ecuaţiei corespunzătoare celor două valori ale lui β.

$$g_1\left(z\right)=\sum_{k=0}^{\infty}c_kz^k$$

$$g_2\left(z\right)=z^{1-c}\sum_{k=0}^{\infty}c_k'z^k$$

Cele două soluţii sunt liniar independente dacă c este diferit de un întreg. Dacă $c=1$ cele două soluţii coincid.

În cazul $\beta=0$ raportul coeficienţilor este:

$$\frac{c_{k+1}}{c_k}=\frac{k+a}{\left(k+1\right)\left(k+c\right)}=\frac{a+k}{c+k}\frac{1}{k+1}$$

Alegând $c_0=1$ atunci

$$c_1=\frac{a}{c}$$

$$c_2=\frac{a\left(a+1\right)}{c\left(c+1\right)}\frac{1}{2!}$$

$$c_3=\frac{a\left(a+1\right)\left(a+2\right)}{c\left(c+1\right)\left(c+2\right)}\frac{1}{3!}$$

$$c_k=\frac{a\left(a+1\right)\left(a+2\right)...\left(a+k-1\right)}{c\left(c+1\right)\left(c+2\right)...\left(c+k-1\right)}\frac{1}{k!}$$

Astfel expresia lui g devine:

$$g_1(z) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a(a+1)(a+2)...(a+k-1)}{c(c+1)(c+2)...(c+k-1)} \frac{1}{k!} z^k = {}_1F_1(a,c,z)$$

${}_1F_1(a,c,z)$ poată numele de funcţia hipergeometrică degenerată.

În cazul $\beta = 1 - c$ raportul coeficienţilor seriei este:

$$\frac{c'_{k+1}}{c'_k} = \frac{(1-c+k+a)}{(2-c+k+)} \left(\frac{1}{k+1} \right)$$

Se face o analogie cu cazul raportului dintre coeficienţi când $\beta = 0$, punând

$$a \to a + 1 - c$$

$$c \to 2 - c$$

Considerând $c'_0 = 1$ se obţine:

$$g_2(z) = z^{1-\beta}\ {}_1F_1(a+1-c, 2-c, z)$$

Dacă c este întreg doar una din soluţiile g_1 şi g_2 are sens. Dacă c nu este întreg soluţia generală este

$$g(z) = z^{1-\beta} A_1 F_1(a,c,z) + A_2 z^{1-\beta}\ {}_1F_1(a+1-c, 2-c, z)$$

Pentru $a = -N$ (N - întreg) funcţia se reduce la un polinom de gradul N. Se observă că pentru $k = N$, $c_{k+1} = 0$ iar restul coeficienţilor seriei sunt nuli.

Astfel se obţine pentru g expresia:

$$g(\rho) = {}_1F_1(l+1-\lambda, 2l+2, \rho)$$

Pentru ca soluţia să fie acceptabilă din punct de vedere fizic este necesar ca funcţia obţinută să se reducă la un polinom. Aşa cum am discutat mai sus este necesar ca

$$l+1-\lambda = n_r$$

atunci:

$$\lambda = -n_r + l + 1 = n$$

În acest caz funcţia hipergeometrică degenerată se reduce la un poliniom:

$$g(\rho) = 1 + \sum_{k=1}^{n-l-1} \frac{(k+l-n)(k-1+l-n)\ldots(1+l-n)}{(k+2l+1)(k-1+2l+1)\ldots(2+2l)\,k!}\rho^k$$

Astfel funcţiile radiale au expresiile

$$R_{nl} = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l \; {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \rho)$$

O altă modalitate de a exprima soluţiile ecuaţiei în este aceea în care intervin termenii polinoamele Laguerre asociate. Vom defini pentru început polinoamele Laguerre:

$$L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q}\left(e^q e^{-\rho}\right)$$

Ele pot fi obţinute pornind de la funcţia generatoare

$$U(\rho, s) = \frac{\exp[-\rho s/(l-s)]}{l-s} = \sum_{q=1}^{\infty} \frac{L_q(\rho)}{q!} s^q \qquad s<1$$

Ecuaţia satisfăcută de aceste polinoame este:

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+(1-\rho)\frac{d}{dq}+q\right]L_q(\rho)=0$$

Polinoamele Laguerre asociate $L_q^p(\rho)$ se definesc prin relaţia

$$L_q^p(\rho)=\frac{d^p}{d\rho^p}L_q(\rho)$$

Ecuaţia satisfăcută de aceste polinoame este :

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+(p+1-\rho)\frac{d}{d\rho}+(q-p)\right]L_q^p(\rho)=0$$

Se observă că până la o constantă multiplicativă soluţia $g(\rho)$ a ecuaţiei (când $\lambda=n$) este $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$.

Expresia analitică a acestor polinoame este:

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)=\sum_{k=0}^{n-l-1}(-1)^{k+1}\frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1-k)!\,(2l+1+k)!}\frac{\rho^k}{k!}$$

Comparând expresia polinoamelor asociate cu soluţia în care intervine funcţia hipergeometrică degenerată rezultă relaţia:

$$L_{n+1}^{2l+1}(\rho)=\frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1)!\,(2l+1)!}\,{}_1F_1(l+1-n,2l+2,\rho)$$

Funcţiile proprii ale energiei au forma:

$$u(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Ele trebuie să indeplinească condiţia de normare

$$\iiint |u|^2 \, dv = 1$$

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_{nl}(r) \, Y_{lm}(\theta, \varphi) \, r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr = 1$$

Dacă se tine cont de relaţia care exprimă condiţia de normare a funcţiilor sferice şi dacă partea radială a soluţiilor este exprimată cu ajutorul funcţiei hipergeometrice degenerate rezultă constanta de normare:

$$N_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n\,(n-l-1)!} \left(\frac{2}{nr_0}\right)^3}$$

unde

$$r_0 = \frac{\hbar^2 \, (4\pi\varepsilon_0)}{m_e e^2} = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m}$$

reprezintă raza primei orbite Bohr.

Putem exprima funcţiile radiale în funcţie şi de polinoamele Laguerre asociate:

$$R_{nl} = \left\{ \left(\frac{2Z}{nr_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\,[(n+l)!]^2} \right\}^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+1}^{2l+1}(\rho)$$

Deoarece probabilitatea ca electronul să se afle într-o regiune a spaţiului astfel ca $r \in (r \ , \ r+dr)$, $\theta \in (\theta \ , \ \theta + d\theta)$, $\varphi \in (\varphi \ , \ \varphi + d\varphi)$ este

$$dP\,(r, \theta, \varphi) = R_{nl}^2(r) \, |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \, r^2 \sin\theta d\theta d\varphi dr$$

prin integrare după θ şi φ se poate determina probabilitatea ca particula să se afle într-o regiune a spaţiului unde $r \in (r\ ,\ r + dr)$ indiferent de φ şi θ. Astfel ţinându-se cont de proprietatea de normare a funcţiilor sferice se obţine:

$$dP\left(r\right) = R_{nl}^2\left(r\right) r^2 dr$$

Expresiile primelor funcţii radiale ale atomului de hidrogen sunt:

$$R_{10} = 2\left(\frac{1}{r_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$$

$$R_{20} = 2\left(\frac{1}{2r_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2r_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2r_0}\right)$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2r_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{r_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2r_0}\right)$$

$$R_{30} = \left(\frac{1}{3r_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{2r}{3r_0} + \frac{2r^2}{27r_o^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{3r_0}\right)$$

$$R_{31} = \frac{4\sqrt{2}}{9}\left(\frac{1}{3r_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{6r_0}\right) \left(\frac{r}{r_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{3r_0}\right)$$

$$R_{31} = \frac{4}{27\sqrt{10}}\left(\frac{1}{3r_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{r_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{3r_0}\right)$$

2.2.22 Starea fundamentală a atomului de hidrogen este descrisă de funcţia de undă

$$u_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_o^3}} e^{-\frac{r}{r_o}}$$

unde r_0 este raza primei orbite Bohr. Să se determine valoarea medie a distanţei electronului faţă de nucleu şi valoarea cea mai probabilă a acestei distanţe.

Soluţie

$$< r >= \int_{\infty} u_{100}^* r u_{100} dv = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} u_{100}^*(r) r u_{100} r^2 dr$$

$$< r >= 4\pi \int_0^{\infty} \frac{1}{\pi r_o^3} r^3 e^{-\frac{2r}{r_0}} dr = \frac{4}{r_o^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{r_0}} dr = \frac{3}{2} r_0$$

Densitatea de probabilitate de localizare a electronului în această stare este

$$\rho(r) = r^2 u^* u = \frac{r^2}{\pi r_o^3} e^{-\frac{2r}{r_0}}$$

Pentru determinarea valorii la care aceasta este maximă se derivează $\rho(r)$ la r şi se egalează cu zero.

$$\frac{d\rho(r)}{dr} = \frac{2r}{\pi r_o^3} e^{-\frac{2r}{r_0}} - \frac{2r^2}{\pi r_o^4} e^{-\frac{2r}{r_0}} = 0$$

Rezultă $r = r_0$

2.2.23 Să se calculeze impulsul mediu al unei particule descrisă de urmatoarele funcţii de undă
a) e^{ikx}
b) $\cos kx$
c) $e^{-\alpha x^2}$ unde în fiecare caz x variază de la $-\infty$ la $+\infty$.

Soluţie

Operatorul impuls este

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

Atunci

$$< p_x >= |c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u^* \hat{p}_x u dx$$

unde

$$|c|^2 = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} u^* u dx}$$

Rezultă:

$$< p_x >= \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} u^* u dx} \int u^* \left(\frac{du}{dx}\right) dx$$

a) Pentru

$$u = e^{ikx} \quad \text{şi} \quad \frac{du}{dx} = iku$$

Rezultă:

$$< p_x >= k\hbar$$

b) Pentru

$$u = \cos kx \quad \text{şi} \quad \frac{du}{dx} = -k \sin kx$$

Rezultă

$$< p_x >= 0$$

c) Pentru

$$u = e^{-\alpha x^2} \quad \text{şi} \quad \frac{du}{dx} = -2\alpha x e^{-\alpha x^2}$$

Rezultă

$$< p_x >= 0$$

2.2.24 Să se determine nivelele energetice şi funcţiile proprii corespunzătoare în cazul unei particule care are energie potenţială

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{c}{r^2}$$

unde c este o constantă pozitivă.

Soluţie

Deoarece energia potenţială nu depinde de unghiurile θ şi φ, soluţia ecuaţiei Schrodinger atemporală este de forma:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

Atunci ecuaţia satisfăcută de partea radială a funcţiei de undă $u(r)$ este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{du}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] - \left(\frac{e^2}{r} - \frac{c}{r^2}\right)u = Eu$$

Introducem mărimile adimensionale

$$\rho = \frac{r}{a} \quad \text{unde} \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

şi

$$\varepsilon = \frac{2E\hbar^2}{me^4} = -\sigma^2$$

deoarece vom considera doar cazul spectrului discret de energie $E < 0$.

Notăm cu:

$$s(s+1) = l(l+1) + \frac{2mc}{\hbar^2}$$

Atunci ecuaţia pentru partea radială devine:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{du}{d\rho} - \frac{s(s+1)}{\rho^2}u + \left(\frac{2}{\rho} - \sigma^2\right)u = 0$$

Introducem funcţia $\chi = \rho u$. Ecuaţia satisfăcută de χ este:

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left[\frac{2}{\rho} - \sigma^2 - \frac{s(s+1)}{\rho^2}\right]\chi = 0$$

În cazul că:

$$\rho \to \infty \qquad \chi_\infty = e^{-\sigma\rho}$$

În cazul că

$$\rho \to 0 \qquad \chi_0 = \rho^{\rho+1}$$

Substituind în ecuaţia anterioară o soluţie de forma

$$\chi(\rho) = e^{-\sigma\rho}\rho^{s+1}f$$

găsim pentru funcţia f ecuaţia:

$$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2} + [2(s+1) - 2\sigma\rho]\,\frac{df}{d\rho} - 2[\sigma(s+1) - 1]f = 0$$

Căutăm soluţia sub forma unei serii de puteri

$$f = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\rho^k$$

Egalând cu zero coeficientul lui ρ^k găsim relaţia de recurenţă:

$$a_{k+1} = a_k\frac{2\,[\sigma(k+s+1) - 1]}{(k+1)(k+2s+2)} \qquad \text{unde} \quad k = 0, 1, 2, ...$$

Deoarece pentru valori mari ale lui k

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2\sigma}{k}$$

seria ar tinde către $e^{2\sigma\rho}$ şi când $\rho \to \infty$ fapt ce ar determina ca funcţia de undă să tindă la infinit în acest caz. Pentru a evita acest lucru este necesar să tăiem seria de puteri, adică să punem $\sigma(k+s+1) - 1 = 0$. Găsim:

$$\sigma = \sqrt{-\frac{2\hbar^2E}{me^4}} = \frac{1}{k+s+1}$$

Atunci nivelele de energie ale particulei sunt:

$$E_{ks} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(k+s+1)^2}$$

unde $k = 0, 1, 2, ..$ iar

$$s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2mc}{\hbar^2}} \simeq l + \frac{mc}{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}$$

dacă

$$\frac{2mc}{\hbar^2} \ll l + \frac{1}{2}$$

Introducem numărul cuantic principal

$$n = k + l + 1$$

Atunci expresia energiei devine

$$E_{nl} = \frac{-me^4}{2\hbar^2\left[n + \frac{mc}{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right]^2}$$

Astfel energia depinde de numerele cuantice n şi l. Funcţiile proprii corespunzatoare sunt

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\rho) = Y_{lm}(\theta,\varphi)e^{-\sigma\rho}\rho^s\sum_{p=0}^{k} a_p\rho^p$$

Nivelul E_{nl} este $(2l+1)$ degenerat.

2.2.25 Să se rezolve ecuaţia Schrodinger pentru o particulă aflată într-o groapă de potenţial de adâncime infinită cu simetrie sferică definită de potenţialul:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pentru} \quad r < R \\ \infty & \text{pentru} \quad r \geq R \end{cases}$$

Soluţie

Pentru o particulă aflată într-un câmp centrul de forţe cu simetrie sferică ecuaţia Schrödinger

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi + V(r)\psi = E\psi$$

are o soluţie de forma:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi)f(r)$$

unde $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ sunt funcţiile sferice iar $f(r)$ este partea radiala care satisface ecuaţia:

$$\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{df}{dr} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]f = 0$$

pentru $r < R$. Pentru $r > R$, $f = 0$. Astfel din condiţia de continuitate soluţia ecuaţiei trebuie să se anuleze pentru $r = R$, adică $f(R) = 0$

Notăm

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

şi

$$\chi(r) = r^{\frac{1}{2}}f(r)$$

Atunci $\chi(r)$ satisface ecuaţia Bessel

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

cu soluţiile:

$$\chi(r) = J_{\pm(l+\frac{1}{2})}(kr)$$

Dar

$$J_{\pm(l+\frac{1}{2})}(kr) \to r^{\pm(l+\frac{1}{2})} \quad \text{când} \quad r \to 0$$

Astfel singura soluţie care satisface condiţia de mărginire este:

$$J_{(l+\frac{1}{2})}(kr)$$

Dacă $l = 0$:

$$J_{\frac{1}{2}}(kr) \to \frac{a}{\sqrt{2}} \sin kr$$

Nivelele de energie care corespund acestor funcţii pot fi determinate din condiţia de continuitate în $r = R$ adică din ecuaţia

$$J_{l+\frac{1}{2}}(kR) = 0$$

Notăm aceste soluţii cu $b_n^{(l)}$. Atunci:

$$E_n(l) = \frac{h^2 \left(b_n^{(l)}\right)^2}{2mR^2}$$

Pentru $l = 0$

$$b_n^{(0)} = n\pi \quad \text{şi} \quad E_n(0) = \frac{h^2 n^2 \pi^2}{2mR^2}$$

2.3 Oscilatorul cuantic

2.3.1 Să se determine funcţiile proprii şi spectrul energetic al unui oscilator liniar armonic.

Soluţie

Oscilatorul liniar armonic este un sistem ideal care constă dintr-o particulă de masă m şi dimensiuni neglijabile ce se poate deplasa sub influenţa unei forţe elastice dirijată.

$$F = -kx \qquad (k > 0)$$

Pentru orice x forţa F este atractivă şi provine dintr-o energie potenţială:

$$V(x) = \frac{kx^2}{2}$$

Ecuaţia Schrödinger adimensională este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}u = Eu$$

Ţinând cont de relaţia $k = m\omega^2$, ecuaţia Schrödinger devine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2}u = Eu$$

de unde:

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

Vom efectua o schimbare de variabilă:

$$\xi = \beta x$$

$$\frac{du}{dx} = \frac{du}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \beta\frac{du}{d\xi}$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \beta^2\frac{d^2u}{d\xi^2}$$

şi atunci ecuaţia Schrödinger devine:

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + \frac{2m}{\beta^2\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2}{2\beta^2}\xi^2\right)u = 0$$

Punem condiţia ca valoarea coeficientului lui ξ^2 să fie 1:

$$\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2\beta^4} = 1$$

adică:

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Notăm cu:

$$\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2\beta^2} = \frac{2mE\hbar}{\hbar^2 m\omega} = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Ecuaţia Schrödinger devine:

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)u = 0$$

Constanta λ conţine valoarea E necunoscută. Ecuaţia Schrödinger are soluţii pentru orice λ număr complex. Ne interesează însă doar soluţiile ce satisfac condiţiile de regularitate.

Metoda pe care o vom aplica este metoda polinomială. Facem transformarea:

$$\xi^2 = v$$

$$\frac{du}{d\xi} = \frac{du}{dv}\frac{dv}{d\xi} = 2\xi\frac{du}{dv} = 2\sqrt{v}\frac{du}{dv}$$

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} = 2\frac{du}{dv} + 4\xi^2\frac{d^2u}{dv^2} = 2\frac{du}{dv} + 4v\frac{d^2u}{dv^2}$$

Ecuaţia Schrödinger devine:

$$4v\frac{d^2u}{dv^2} + 2\frac{du}{dv} + (\lambda - v)\,u = 0$$

sau:

$$4\frac{d^2u}{dv^2} + \frac{2}{v}\frac{du}{dv} + \left(\frac{\lambda}{v} - 1\right)u = 0$$

Vom considera această ecuaţie în regiunea asimtotică:

$$x \to \pm\infty, \qquad \xi \to \pm\infty, \qquad v \to \pm\infty$$

În această regiune ecuaţia devine:

$$4\frac{d^2u}{dv^2} - u = 0$$

ale cărei soluţie este:

$$u\,(x) = A\exp\left(-\frac{v}{2}\right) + B\exp\left(\frac{v}{2}\right)$$

Deoarece soluţia trebuie să fie mărginită la infinit $B \equiv 0$ iar soluţia în regiunea asimptotică este de forma:

$$u\left(x\right) = A \exp\left(-\frac{v}{2}\right) = A \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

Din acest motiv pentru ecuaţia Schrödinger vom căuta soluţii de forma:

$$u\left(\xi\right) = H(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\frac{du}{d\xi} = -\xi \exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right) H(\xi) + \exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right)\frac{dH(\xi)}{d\xi} \tag{2.2}$$

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} = \left(\xi^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H\left(\xi\right) - 2\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \frac{dH\left(\xi\right)}{d\xi} + \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \frac{d^2H\left(\xi\right)}{d\xi^2}$$

Ecuaţia Schrödinger devine după simplificarea exponenţialei $e^{-\xi^2/2}$:

$$\frac{d^2H\left(\xi\right)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH\left(\xi\right)}{d\xi} + \left(\lambda - 1\right) H\left(\xi\right) = 0$$

Aceasta este o ecuaţie diferenţială de ordin doi. Căutăm o soluţie de forma:

$$H\left(\xi\right) = \xi^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^{k+s}$$

$s \geq 0$ (astfel funcţia ar deveni infinită în origine). Exponentul s este în aşa fel ales ca $a_0 \neq 0$.

Derivând obţinem:

$$H'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (k+s) \xi^{k+s-1}$$

$$H''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (k+s)(k+s-1) \xi^{k+s-2}$$

Introducând rezultatele precedente în ecuaţia Schrödinger scrisă în noile variabile, obţinem:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k (k+s)(k+s-1) \xi^{k+s-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2a_k (k+s) \xi^{k+s} + \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - 1) a_k \xi^{k+s} = 0$$

adică:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k (k+s)(k+s-1) \xi^{k+s-2} = \sum_{k=0}^{\infty} [2a_k (k+s) + (1-\lambda) a_k] \xi^{k+s}$$

Ecuaţia s-a transformat într-o egaliatatea a două serii de puteri ale lui ξ. Egalitatea este îndeplinită dacă sunt egali coeficienţii aceloraşi puteri ale lui ξ din cele două serii. Pentru a se vedea mai clar acest lucru vom rescrie egalitatea astfel:

$$a_0 s\,(s-1) + a_1\,(s+1)\,s + \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}\,(k+2+s)\,(k+s+1)\,\xi^{k+s} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k[(1-\lambda)+2(k+s)]\xi^{k+s}$$

Rezultă condiţiile:

$$\begin{aligned} a_0 s\,(s-1) &= 0 \\ a_1 s\,(s+1) &= 0 \\ a_{k+2}\,(k+2+s)\,(k+s+1) &= a_k[(1-\lambda)+2(k+s)] \end{aligned}$$

$k = 1, 2, 3...$

Astfel coeficienţii se determină din 2 în 2: a_0 determină coeficienţii $a_2, a_4, ...$ iar a_1 determină coeficienţii: $a_3, a_5, ...$ astfel că putem separa $H\,(\xi) = H^{(0)}\,(\xi) + H^{(1)}\,(\xi)$.

Din $s\,(s-1) = 0$ rezultă $s = 0$ şi $s = 1$

Din $s\,(s+1) = 0$ rezultă $s = 0$ şi $s = -1$. Prima soluţie nu aduce nimic nou iar $s = -1$ este nepotrivită deoarece seria ar începe cu ξ^{-1} şi ar deveni infinită.

Dacă $s = 0$ a doua condiţie ar putea fi îndeplinită doar când $a_1 \neq 0$.

Există două situaţii:

$$\begin{array}{ll} s=0 & a_1=0 \text{ sau } a_1\neq 0 \\ s=1 & a_1=0 \end{array}$$

În plus:

$$\frac{a_{k+2}}{a_k}=\frac{(1-\lambda)+2\,(k+s)}{(k+s+2)\,(k+s+1)}$$

Când $k\to\infty$; $\frac{a_{k+2}}{a_k}\to 0$ şi deci pentru ξ finit seria este convergentă. Dacă numărul de termeni ai seriei este infinit, seriile $H^{(0)}\,(\xi)$ şi $H^{(1)}\,(\xi)$ se comportă ca $\exp\xi^2$. Pentru aceasta vom considera o argumentare intuitivă.

Valoarea asimptotică a seriei este dată de puterile superioare ale acesteia. Atunci pentru valori mari ale lui k:

$$\frac{a_{k+2}}{a_k}=\frac{2}{k}$$

Iar:

$$\exp\left(\xi^2\right)=1+\frac{\xi^2}{1!}+\frac{\xi^4}{2!}+\frac{\xi^6}{3!}+...+\frac{\xi^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!}+\frac{\xi^{k+2}}{\left(\frac{k}{2}+1\right)!}+....$$

Atunci pentru această serie raportul coeficienţilor lui ξ^{k+2} şi ξ^k este:

$$\frac{\left(\frac{k}{2}\right)!}{\left(\frac{k}{2}+1\right)!}=\frac{2}{k+2}$$

Comportarea asemănătoare a coeficienţilor a două puteri succesive ale variabilei ξ^2, pentru valori mai mari ale indicelui justifică faptul că seriile $H\,(\xi)$ şi $\exp(\xi^2)$ se comportă asemănător când $\xi\to\infty$. Pentru ca funcţia $u\,(\xi)$ să fie mărginită la infinit, este necesar ca $H(\xi)$ să fie un polinom.

Considerăm cazul:

$$s = 0, \qquad a_1 \neq 0$$

Vom pune condiţia ca $a_k \neq 0$ şi $a_{k+2} = 0$.
Considerăm $k = 2m$ număr par şi atunci:

$$1 - \lambda + 2(2m) = 0$$

$$\lambda = 1 + 4m$$

Considerăm $k = 2m + 1$ număr impar şi atunci:

$$1 - \lambda + 2(2m + 1) = 0$$
$$\lambda = 3 + 4m$$

Aceasta înseamnă că $H^{(0)}(\xi)$ şi $H^{(1)}(\xi)$ nu pot fi reduse simultan la polinoame. Rezultă că $a_1 = 0$.

Daca: $a_1 = 0$; $H^{(1)}(\xi) = 0$ şi rămâne decât condiţia că $H^{(0)}(\xi)$ să se reducă la un polinom, $\lambda = 1, 5, 9, ...$

În cazul $s = 1$; $a_1 = 0$ şi $H^{(0)}(\xi) = 0$ condiţia ca seria $H^{(1)}(\xi)$ să se întrerupă este ca:

$$2(1 + 2m) + 1 - \lambda = 0$$

deci:

$$\lambda = 4m + 3, \text{ adică } \quad \lambda = 3, 7, 11, ...$$

În această situaţie soluţia:

$$u = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H(\xi)$$

rămâne mărginită şi în cazul că $\xi \to \infty$. Astfel ecuaţia are soluţii finite dacă λ este impar $\lambda = 2n + 1$ şi deoarece:

$$\lambda = \frac{2E_n}{\hbar\omega}$$

rezultă:

$$E_n = (2n + 1)\frac{\hbar\omega}{2}$$

Nivelele de energie sunt echidistante:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

Oscilatorul liniar armonic nu poate avea orice energie, ci numai anumite energii, care formează un şir discret de nivele echidistante.

Energia stării fundamentale este $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ şi ea este în concordanţă cu relaţia de nedeterminare Heisenberg.

2.3.2 Să se rezolve ecuaţia Schrödinger tridimensională pentru un oscilator armonic a cărui energie potenţiala este

$$U(r) = \frac{m\omega^2}{2} r^2$$

Soluţie

Pentru o particulă aflată într-un câmp central de forţe ecuaţia Schrödinger atemporală este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(r)\psi = E\psi$$

Deoarece cîmpul de forţe este central soluţia ecuaţiei Schrödinger este de forma

$$\psi(r,\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi)f(r)$$

unde $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ sunt funcţiile sferice. Astfel pentru componenta radială $f(r)$ rezultă ecuaţia:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{df}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}f\right] + \frac{m}{2}\omega^2 r^2 f = Ef$$

Considerăm schimbarea de variabilă:

$$u = fr$$

Introducem notaţiile:

$$\xi = r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

şi

$$\lambda = \frac{E}{\hbar\omega}$$

utilizate în problema legată de oscilatorul armonic liniar.

Ecuaţia va lua forma:

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} + \left[2\lambda - \frac{l(l+1)}{\xi^2} - \xi^2\right] u = 0$$

Când $\xi \to \infty$ ecuaţia devine

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \xi^2 u = 0$$

Soluţia acestei ecuaţii este

$$u_\infty = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Când $\xi \to 0$ considerăm $u \sim \xi^\alpha$ şi prin substitutie în ecuaţia pentru u se obţine:

$$\alpha(\alpha - 1)\xi^{\alpha-2} + 2\lambda\xi^\alpha - l(l+1)\xi^{\alpha-2} - \xi^{\alpha+2} = 0$$

Împărţim cu $\xi^{\alpha-2}$ şi obţinem:

$$\alpha(\alpha - 1) - l(l+1) + 2\lambda\xi^2 - \xi^4 = 0$$

Când $\xi \to 0$ ultimii doi termeni devin foarte mici şi

$$\alpha(\alpha - 1) = l(l+1)$$

De aici $\alpha_1 = l + 1$ şi $\alpha_2 = -l$
Doar $\alpha_1 = l + 1$ face că funcţia să fie finită în $\xi \to 0$
Atunci funcţia $u\,(\xi)$ va fi de forma

$$u(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\xi^{l+1}\nu(\xi)$$

Substituind în ecuaţia pentru u se obţine:

$$\frac{d^2\nu}{d\xi^2} + 2\frac{d\nu}{d\xi}\left[\frac{(l+1)}{\xi} - \xi\right] + 2\left[\lambda - l - \frac{3}{2}\right]\nu = 0$$

Considerăm soluţia acestei ecuaţii ca fiind o serie:

$$\nu = \sum_{k=k_0}^{\infty} a_k \xi^k$$

Egalăm coeficienţii puterilor lui ξ cu zero şi se obţine relaţia de recurenţă:

$$a_{k+2} = a_k \frac{2\left[k + l + \frac{3}{2} - \lambda\right]}{(k+2)(k+2l+3)}$$

Când $k \to \infty$ relaţia de mai sus devine:

$$a_{k+2} \simeq \frac{2a_k}{k}$$

Determinăm puterea celui mai mic exponent, k_0 egalând cu zero coeficientul puterii lui ξ^{k_0}. Rezultă:

$$k_0(k_0 - 1) + 2(l+1)k_0 = 0$$

de unde $k_0 = 0$. Acesta corespunde soluţiei finite în origine, deoarece în cazul

$$k_0 = -2l - 1$$

în origine $\nu\left(\xi\right)$ va tinde la ∞.

Din relaţia dintre coeficienţii a_{k+2} şi a_k din regiunea asimptotică rezultă că atunci când $\xi \to \infty$ seria se apropie de e^{ξ^2} şi $u\left(\xi\right) \to e^{\frac{\xi^2}{2}}$ care tinde la ∞. Pentru a tăia această serie punem condiţia:

$$k + l + \frac{3}{2} - \lambda = 0$$

Atunci:

$$\lambda = k + l + \frac{3}{2}$$

Deoarece seria începe cu $k_0 = 0$, k trebuie să fie un număr par $k = 2n$ cu $n = 0, 1, 2...$ Atunci:

$$\lambda = 2n + l + \frac{3}{2}$$

astfel că energia oscilatorului armonic tridimesional are forma:

$$E_{nl} = \hbar\omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right)$$

Funcţia de undă corespunzătoare acestei energii este:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{e^{-\xi^2}\xi^{l+1}\nu_n(\xi)}{\xi}Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Fiecare nivel este degenerat. Când $N = 2n+l$ este par găsim $l = 0, 2, 4, ...$ Când N este impar $l = 1, 3, 5, ...$ În plus fiecare nivel (pentru n şi l fixaţi), adică pentru o energie bine determinată, este $(2l + 1)$ degenerat în raport cu m.

2.3.3 Cunoscând că polinoamele Hermite sunt generate astfel:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^2(e^{-\xi^2})}{d\xi^n}$$

să se demonstreze relaţia

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi)$$

Soluţie

$$H_{n+1}(\xi) = (-1)^{n+1} e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(e^{-\xi^2}\right) = -(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(e^{-\xi^2}\right)$$

$$\frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(e^{-\xi^2}\right) = \frac{d^n}{d\xi^n} \left(\frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2}\right) - 2\frac{d^n}{d\xi^n} \left(\xi e^{-\xi^2}\right)$$

unde:

$$\frac{d^n}{d\xi^n} \left(\xi e^{-\xi^2}\right) = \xi \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2}\right) + n\frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} \left(e^{-\xi^2}\right)$$

Rezultă:

$$\frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(e^{-\xi^2}\right) = -2\left[\xi \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2}\right) + n\frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} \left(e^{-\xi^2}\right)\right]$$

Atunci:

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2}\right) - 2n(-1)^n \left[\frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} \left(e^{-\xi^2}\right)\right] e^{\xi^2}$$

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi)$$

2.3.4 Cunoscând că funcţiile proprii ale energiei pentru oscilatorul armonic sunt date de formula

$$u(x) = N_n e^{-\frac{\beta^2 x^2}{2}} H_n(\beta x)$$

unde $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ şi că polinoamele Hermite pot fi determinate pornind de la funcţia generatoare

$$S(s,\xi) = e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$$

să se determine constanta de normare.

Soluţie

Condiţia de normare este:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|u_n\left(\beta x\right)\right|^2 dx = 1$$

Aceasta înseamnă că:

$$\frac{|N_n|^2}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1$$

Considerăm două funcţii generatoare ale polinoamelor Hermite

$$S(s,\xi) = e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(\xi)$$

$$S(t,\xi) = e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^m}{m!} H_m(\xi)$$

Se înmulţesc relaţiile de mai sus şi se obţine

$$S(s,\xi)S(t,\xi)=e^{-s^2+2s\xi}e^{-t^2+2t\xi}=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}\frac{t^m}{m!}H_n(\xi)H_m(\xi)$$

Se înmulţeşte egalitatea cu $e^{-\xi^2}$ şi se integrează intre $-\infty$ şi ∞.

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}S(s,\xi)S(t,\xi)d\xi=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}\frac{t^m}{m!}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}H_n(\xi)H_m(\xi)d\xi$$

Integrala din stânga este:

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}S(s,\xi)S(t,\xi)d\xi=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2+2(s+t)\xi-(s+t)^2}e^{2st}d\xi$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}S(s,\xi)S(t,\xi)d\xi=e^{2st}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(\xi-s-t)^2}d\left(\xi-s-t\right)=e^{2st}\sqrt{\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}S(s,\xi)S(t,\xi)d\xi=\sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2st)^n}{n!}$$

Astfel:

$$\sqrt{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2st)^n}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}\frac{t^m}{m!}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}H_n(\xi)H_m(\xi)d\xi$$

Rezultă:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi = 0$$

dacă $n \neq m$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}$$

Atunci:

$$N_n = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}$$

2.3.5 Să se demonstreze relaţia de recurenţă pentru funcţiile proprii ale energiei oscilatorului armonic $u_n(x)$

$$\beta x u_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}} u_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}} u_{n-1}(x)$$

Soluţie

Folosim relaţiile

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$$

care se scriu ca:

$$H_{n+1}(\beta x) = 2\beta x H_n(\beta x) - 2n H_{n-1}(\beta x)$$

şi

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\frac{\beta^2 x^2}{2}} H_n(\beta x)$$

Atunci

$$\sqrt{\frac{\sqrt{\pi}2^{n+1}(n+1)!}{\beta}} u_{n+1} = 2\beta x \sqrt{\frac{\sqrt{\pi}2^n n!}{\beta}} u_n - 2n \sqrt{\frac{\sqrt{\pi}2^{n-1}(n-1)!}{\beta}} u_{n-1}$$

$$\sqrt{2n(n+1)} u_{n+1}(x) = 2\beta x \sqrt{n} u_n(x) - n\sqrt{2} u_{n-1}(x)$$

De aici rezultă

$$\beta x u_n(x) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} u_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}} u_{n-1}(x)$$

2.3.6 Să se calculeze $< x >, < x^2 >$ pentru oscilatorul armonic liniar în reprezentarea sistemului de funcţii proprii ale operatorului energie.

Soluţie

Utilizăm relaţia demonstrată în problema anterioară:

$$\beta x u_n(x) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} u_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}} u_{n-1}(x)$$

Înmulţim cu $u_n(x)$ şi integrăm pe toată axa reală:

$$\beta \int\limits_{-\infty}^{+\infty} u_n x u_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} u_n u_{n+1} dx + \sqrt{\frac{n}{2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} u_n u_{n-1} dx = 0$$

Rezultă că:

$$< x >= 0$$

Înmulţim prima relaţie cu $x\beta$

$$\beta^2 x^2 u_n(x) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \beta x u_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}} \beta x u_{n-1}(x)$$

Atunci:

$$\beta^2 x^2 u_n(x) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \left[\sqrt{\frac{n+2}{2}} u_{n+2}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \beta x u_{n-1}(x) \right] + \left[\sqrt{\frac{n}{2}} u_n(x) + \sqrt{\frac{n-1}{2}} u_{n-2}(x) \right] \sqrt{\frac{n}{2}}$$

adică

$$\beta^2 x^2 u_n = \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{2}} u_{n+2} + \frac{2n+1}{2} u_n + \sqrt{\frac{n(n-1)}{2}} u_{n-2}$$

Înmulţim egalitatea cu u_n şi integrăm între $-\infty$ şi $+\infty$. Rezultă:

$$\beta^2 < x^2 >= \frac{2n+1}{2}$$

$$< x^2 >= \frac{2n+1}{2\beta^2} = \frac{2n+1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}$$

2.3.7 Să se determine nivelele de energie ale unui oscilator armonic tridimensional a cărui energie potenţială este:

$$U = \frac{k_1x^2}{2} + \frac{k_2y^2}{2} + \frac{k_3y^3}{3}$$

Soluţie

Ecuaţia lui Schrödinger în cazul oscilatorului armonic tridimensional este:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \left(\frac{k_1x^2}{2} + \frac{k_2y^2}{2} + \frac{k_3z^2}{2}\right)\psi = E\psi$$

Pentru rezolvarea ecuaţiei utilizăm metoda separării variabilelor. Alegem funcţia ψ de forma:

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

Înlocuim în ecuaţia Scrhödinger pe ψ şi apoi împărţim rezultatul la $\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$. Rezultă:

$$\left(-\frac{1}{\psi_1}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\frac{m\omega_1^2}{2}x^2\right)+\left(-\frac{1}{\psi_2}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dy^2}+\frac{m\omega_2^2}{2}y^2\right)+$$

$$+\left(-\frac{1}{\psi_3}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dz^2}+\frac{m\omega_3^2}{2}z^2\right)=E$$

unde am notat:

$$\omega_i^2=\frac{k_i}{m} \qquad (i=1,2,3)$$

Deoarece x, y si z sunt variabile independente fiecare paranteză trebuie să fie egală cu o constantă. Notam cu E_1, E_2, E_3 cele trei constante care trebuie să îndeplinească condiţia:

$$E=E_1+E_2+E_3$$

Problema se reduce la rezolvarea a trei ecuaţii diferenţiale de ordin doi, care sunt de tipul ecuaţiei oscilatorului armonic liniar.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\frac{m\omega_1^2}{2}x^2\psi_1=E_1\psi_1$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dy^2}+\frac{m\omega_2^2}{2}y^2\psi_2=E_2\psi_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3}{dz^2}+\frac{m\omega_2^2}{2}z^2\psi_3=E_3\psi_3$$

Introducem variabilele unidimensionale $\xi_1=x\sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}}$, $\xi_2=y\sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}}$, $\xi_3=z\sqrt{\frac{m\omega_3}{\hbar}}$ şi utilizăm rezultatul obţinut în cazul oscilatorului unidimensional. Obţinem:

$$E_{n_1n_2n_3}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2+\left(n_3+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_3$$

Funcţia de undă este:

$$\psi(x,y,z) = \sqrt[4]{\frac{m^3\omega_1\omega_2\omega_3}{\pi^3\hbar^3}}\frac{H_{n_1}(\xi_1)H(\xi_2)H(\xi_3)}{\sqrt{2^{n_1 n_2 n_3}\cdot n_1!n_2!n_3!}}e^{-\frac{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}{2}}$$

2.3.8 Folosind rezultatele problemei (2.3.7) să se calculeze ordinul degenerării unui nivel de energie al unui oscilator tridimensional izotrop.

Soluţie

Pentru un oscilator izotrop $k_1 = k_2 = k_3$ şi $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$ astfel încât nivelele de energie depind de un singur număr cuantic:

$$N = n_1 + n_2 + n_3$$

fiind date de relaţia

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

Funcţiile proprii sunt:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(r) = N_{n_1 n_2 n_3} e^{-\frac{1}{2}\beta^2 r^2} H_{n_1}(\beta x)H_{n_2}(\beta y)H_{n_2}(\beta z)$$

unde

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$N_{n_1n_2n_3} = \sqrt[4]{\frac{m^3\omega^3}{\hbar^3\pi^3}}$$

şi

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2$$

Toate funcţiile cu aceeaşi valoare a lui $n_1+n_2+n_3$ corespund la aceeaşi energie. Deoarece aceste funcţii sunt liniar independente ordinul degenerării nivelului E_N coincide cu numărul de triplete (n_1, n_2, n_3) caracteristice energiei E.

Pentru a calcula numărul de triplete fixăm valoarea numărului n_3. Atunci $n_1 + n_2 = N - n_3$. În acest caz valoarea unui număr determină pe celălalt şi numărul de posibilităţi este $N - n_3 + 1$ (se consideră şi valoarea zero). Apoi se consideră toate valorile lui n_3 compatibile cu N. Atunci gradul de degenerare este:

$$g_N = \sum_{n_3=0}^{N}(N - n_3 + 1) = \frac{1}{2}(N + 1)(N + 2)$$

Se observă că pentru oscilatorul izotrop singurul nivel nedegenerat este $N = 0$.

2.3.9 Să se determine funcţiile şi valorile proprii ale energiei pentru un oscilator cu sarcina q aflat într-un câmp electric omogen de intensitate $\mathcal{E}$.

Soluţie

În acest caz ecuaţia Schrödinger este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\left(\frac{m\omega^2}{2}x^2-e\mathcal{E}x\right)\psi=E\psi$$

Efectuăm schimbarea de variabilă:

$$x_1=x-\frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}$$

şi introducem notaţia:

$$E_1=E+\frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

$$\frac{d\psi}{dx}=\frac{d\psi}{dx_1}\frac{dx_1}{dx}=\frac{d\psi}{dx_1}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{d^2\psi}{dx_1^2}$$

$$\frac{m\omega^2}{2}x^2=\frac{m\omega^2}{2}\left(x_1+\frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}\right)^2$$

$$\frac{m\omega^2}{2}x^2=\frac{m\omega^2}{2}x_1^2+e\mathcal{E}x_1+\frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

$$e\mathcal{E}x=\mathcal{E}(x_1+\frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2})=e\mathcal{E}x_1+\frac{e^2\mathcal{E}^2}{m\omega^2}$$

Ţinând cont de acestea ecuaţia Schrödinger devine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx_1^2}+\frac{m\omega^2}{2}x_1^2\psi=E_1\psi$$

Ecuaţia este analoagă cu cea a oscilatorului armonic liniar. Funcţiile de undă sunt:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi h}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} H_n(\xi)$$

unde:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1$$

Valorile proprii sunt:

$$E_1 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

De aici rezultă

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

Spectrul de energie este discret şi este deplasat în jos cu valoarea:

$$\Delta E = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$$

2.4 Modelul vectorial al atomului

2.4.1 Într-un atom de heliu excitat, unul din electroni se găseşte în starea p, iar celălalt în starea d. Să se găsească valorile posibile ale numărului cuantic orbital L şi valorile corespunzătoare momentului cinetic orbital al atomului.

Soluţie

Electronul aflat în starea p este caracterizat de numărul cuantic orbital $l_1 = 1$ iar electronul aflat în starea d este caracterizat de numărul cuantic orbital $l_2 = 2$. Numărul cuantic L corespunzător momentului cinetic rezultant poate avea una din valorile:

$$|l_2 - l_1|, \quad |l_2 - l_1 + 1|........|l_2 + l_1|$$

În cazul nostru, L poate lua valorile $1, 2, 3$, iar momentul cinetic orbital poate lua valorile:

$$|\vec{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$$

adică:

$$\begin{aligned} L &= 1 \quad \Rightarrow \quad |\vec{L}| = \sqrt{3}\hbar \\ L &= 2 \quad \Rightarrow \quad |\vec{L}| = \sqrt{6}\hbar \\ L &= 3 \quad \Rightarrow \quad |\vec{L}| = \sqrt{12}\hbar \end{aligned}$$

2.4.2 Care sunt valorile posibile ale momentului cinetic total al unui electron care se găseşte în starea f.

Soluţie

În acest caz trebuie compus momentul cinetic orbital caracterizat prin numărul cuantic $l = 3$, şi momentul cinetic de spin caracterizat prin numărul cuantic de spin $s = 1/2$. Momentul cinetic total va fi caracterizat de numărul cuantic j care poate lua valorile:

$$j = l - 1/2 = 5/2$$
$$j = l + 1/2 = 7/2$$

iar momentul cinetic total poate lua valorile:

$$\begin{aligned} j &= 5/2 \quad \Rightarrow \quad |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar = \frac{\sqrt{35}}{2}\hbar \\ j &= 7/2 \quad \Rightarrow \quad |\vec{J}| = \frac{\sqrt{63}}{2}\hbar \end{aligned}$$

2.4.3 Să se găsească toţi termenii spectrali posibili pentru o combinaţie dintre doi electroni, unul fiind în starea p, altul în starea d, în cazul unui cuplaj de tip Russell-Saunders. Să se indice notaţiile spectrale ale acestora.

Soluţie

Momentul cinetic total este rezultatul compunerii momentului cinetic total orbital şi a momentului total de spin caracterizate de numerele cuantice $l_1 = 1$, $l_2 = 2$ şi respectiv $s_1 = 1/2$, $s_2 = 1/2$. Rezultă că L poate lua valorile $1, 2, 3$.

Momentul de spin total poate fi caracterizat doar de numerele cuantice de spin $S = 0$ şi $S = 1$ ($s_1 = 1/2$, $s_2 = 1/2$). În cazul cuplajului $\vec{L} - \vec{S}$, avem:

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2; \qquad \vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2; \qquad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Valorile posibile ale numerelor cuantice orbital şi de spin sunt:

$$\begin{aligned} L &= l_1 + l_2;\ l_1 + l_2 - 1; ....|l_1 - l_2| \\ S &= s_1 + s_2;\ s_1 + s_2 - 1; .....|s_1 - s_2| \end{aligned}$$

iar valorile posibile ale lui J pentru L şi S daţi, sunt:

$$J = L + S;\ L + S - 1; ....|L - S|$$

În cazul problemei noastre $L = 1, 2, 3$ iar $S = 0, 1$.

• Dacă $L = 1$, $S = 0$ atunci $J = 1$ iar starea este una de singlet şi se notează ${}^1P_1$. S-a ţinut cont de notaţia termenilor spectrali

$${}^{2S+1}L_J$$

• Dacă $L = 1$, $S = 1$ atunci $J = 0, 1, 2$ şi vom avea o stare de triplet care se notează:

$$\begin{array}{rcl} J & = & 0 \Rightarrow {}^3P_o \\ J & = & 1 \Rightarrow {}^3P_1 \\ J & = & 2 \Rightarrow {}^3P_2 \end{array}$$

• Dacă $L = 2$, $S = 0$ atunci $J = 2$ iar starea este una de singlet notată ${}^1D_2$.

• Dacă $L = 2$, $S = 1$, atunci numărul cuantic J poate lua trei valori $J = 1, 2, 3$, iar starea corespunzătoare este o stare de triplet care se notează:

$$\begin{array}{rcl} J & = & 1 \Rightarrow {}^3D_1 \\ J & = & 2 \Rightarrow {}^3D_2 \\ J & = & 3 \Rightarrow {}^3D_3 \end{array}$$

• Dacă $L = 3$, $S = 0$ atunci $J = 3$ iar starea este una de singlet şi se notează cu $^1F_3$.

• Dacă $L = 3$, $S = 1$ atunci $J = 2, 3, 4$ iar starea va fi una de triplet notată prin:

$$\begin{aligned} J &= 2 \quad \Rightarrow \quad {}^3F_2 \\ J &= 3 \quad \Rightarrow \quad {}^3F_3 \\ J &= 4 \quad \Rightarrow \quad {}^3F_4 \end{aligned}$$

2.4.4 Să se stabilească multiplicitatea termenilor spectrali în cazurile:
a. atomul are doi electroni de valenţă
b. atomul are trei electroni de valenţă

Soluţie

a. Pentru cei doi electroni de valenţă numerele cuantice de spin sunt $s_1 = s_2 = 1/2$; atunci $S = 0, 1$.

• În cazul $S = 0$ multiplicitatea termenului este:

$$2S + 1 = 1$$

• În cazul $S = 1$, multiplicitatea termenilor este:

$$2S + 1 = 3$$

b. Pentru trei electroni de valenţă trebuie să calculăm numărul cuantic S ce corespunde spinului total.
Pentru doi electroni $S_{1,2}$ ia valorile 0 şi 1.

• Dacă $S_{1,2} = 0$ şi $S_3 = 1/2$, atunci $S = 1/2$ iar multiplicitatea va fi 2.
• Dacă $S_{1,2} = 1$ şi $S_3 = 1/2$ atunci $S = 1/2$ cu multiplicitatea 2 şi respectiv $S = 3/2$ cu multiplicitatea egală cu 4.

3.4.5 Un foton emis de un atom poartă cu el un anumit moment cinetic. Cum se explică regula de selecţie pentru numărul cuantic ce caracterizează momentul cinetic total, în afară de cazurile $\Delta J = 0$.

Soluţie

Trebuie avut în vedere că la emisia unui foton momentul cinetic total al atomului variază atât ca direcţie cât şi ca mărime. În cazul că $\Delta J = \pm 1$, momentul cinetic total variază ca mărime, iar când $\Delta J = 0$ momentul cinetic variază ca direcţie.

2.4.6 Un atom se găseşte în starea ^1F_o. Să se calculeze valorile posibile ale proiecţiilor momentului magnetic pe direcţia unui câmp magnetic exterior.

Soluţie

Deoarece $2S+1 = 1$, numărul cuantic corespunzător spinului este $S = 0$. Pentru că atomul se găseşte în starea F, atunci numărul cuantic ce caracterizează momentul cinetic orbital este $L = 3$. Numărul cuantic M ia valorile:

$$M: \ -3, \ -2, \ -1, \ 0, \ 1, \ 2, \ 3$$

iar proiecţia μ_z a momentului magnetic ia valorile:

$$-3\mu_B, \ -2\mu_B, \ -\mu_B, \ 0, \ \mu_B, \ 2\mu_B, \ 3\mu_B$$

unde μ_B este magnetonul Bohr-Procopiu

2.4.7 Să se calculeze factorul lui Landée pentru atomi cu un singur electron de valenţă aflaţi în stările S şi P.

Soluţie

Expresia factorului Landée este:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

unde S este numărul cuantic corespunzător spinului total, L este numărul cuantic corespunzător momentului cinetic orbital total iar J este numărul cuantic corespunzător momentului cinetic total.

- În starea S numărul $L = 0$, numărul cuantic de spin este $S = 1/2$, iar $J = 1/2$. Rezultă $g = 2$.
- În starea P, $L = 1$, numărul cuantic de spin este $S = 1/2$, iar J poate lua două valori. Pentru $J = 1/2$, $g = 2/3$ iar pentru $J = 3/2$, $g = 4/3$

2.4.8 Să se scrie termenul spectral pentru care se cunosc următoarele mărimi:

$$g = 6/7 \qquad S = 1/2 \qquad J = 5/2$$

Soluţie

Din formula factorului Landée:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

unde $S = 1/2$ şi $J = 5/2$ rezultă $L = 3$, iar termenul spectral este:

$$^2D_{5/2}$$

Capitolul 3

FIZICA SOLIDULUI

3.1 Vibraţiile reţelei cristaline

3.1.1 Să se determine legile de dispersie ale frecvenţelor de vibraţie în cazul unei reţele unidimensionale a cărei celulă elementară este alcătuită din două specii de atomi cu masele m_1 şi m_2 $(m_1 < m_2)$. Distanţa dintre doi atomi alăturaţi este a. Forţa de interacţie dintre doi atomi alăturaţi este de forma $F = \beta\left(u_n - u_{n-1}\right)$, unde u_n şi u_{n-1} sunt deplasările celor doi atomi faţă de poziţiile lor de echilibru.

Soluţie

Considerăm că atomii cu masa m_1 ocupă poziţiile pare iar cei cu masa m_2 ocupă poziţiile impare. Ecuaţiile de mişcare pentru cele două tipuri de atomi sunt:

$$m_1\ddot{u}_{2n} = \beta\left(u_{2n+1} - u_{2n}\right) - \beta\left(u_{2n} - u_{2n-1}\right)$$

$$m_1 \ddot{u}_{2n+1} = \beta \left(u_{2n+2} - u_{2n+1}\right) - \beta \left(u_{2n+1} - u_{2n}\right)$$

Pentru acest sistem de ecuaţii căutăm soluţii de forma:

$$u_{2n} = A \exp i \left(\omega t + 2nqa\right)$$

$$u_{2n+1} = A \exp \left[i\omega t + \left(2n+1\right) qa\right]$$

Substituind aceste soluţii în ecuaţiile de mai sus rezultă:

$$\left(2\beta - m_1 \omega^2\right) A - \left(2\beta \cos qa\right) B = 0$$

$$\left(-2\beta \cos qa\right) A + \left(2\beta - m_2 \omega^2\right) B = 0$$

Sistemul de ecuaţii de mai sus este un sistem de ecuaţii omogen. El admite soluţii dacă determinantul sistemului este nul.

$$\begin{vmatrix} 2\beta - m_1\omega^2 & -2\beta \cos qa \\ -2\beta \cos qa & 2\beta - m_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

Rezultă ecuaţia bipătrată:

$$\omega^4 - 2\beta \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \omega^2 + \frac{4\beta^2 \sin^2 qa}{m_1 m_2} = 0$$

care are două soluţii:

$$\omega_1^2 = \frac{\beta}{m_r} + \beta \left[\frac{1}{m_r^2} - \frac{4 \sin^2 qa}{m_1 m_2}\right]^{1/2}$$

$$\omega_2^2 = \frac{\beta}{m_r} - \beta \left[\frac{1}{m_r^2} - \frac{4 \sin^2 qa}{m_1 m_2}\right]^{1/2}$$

unde

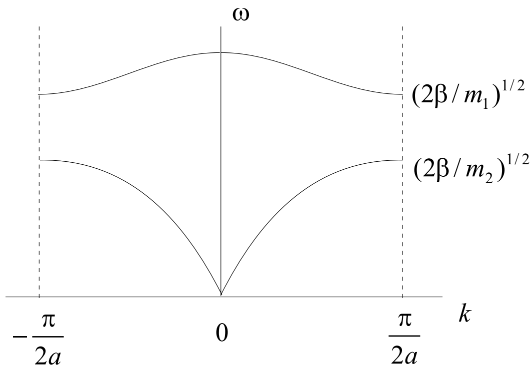

Fig. 3.1

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \qquad \text{iar} \qquad |qa| < \pi/2$$

ω_2 poartă numele de frecvenţa ramurii optice în timp ce ω_1 poartă denumirea de frecvenţa ramurii acustice. Forma ramurii optice şi acustice sunt arătate în figura 3.1

Discuţie

Vom considera cazul când $qa \ll 1$ $(q \to 0)$. Atunci:

$$\omega_1 \approx \left(\frac{2\beta}{m_r} - \frac{2\beta q^2 a^2 m_r}{m_1 m_2}\right)^{1/2} = \left[2\beta\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)\right]^{1/2}$$

$$\omega_2 = 0$$

În cazul în care $k = \pi/2a$

$$\omega_1 = (2\beta/m_1)^{1/2}$$
$$\omega_2 = (2\beta/m_2)^{1/2}$$

3.1.2 Să se calculeze capacitatea calorică la volum constant a unei substanţe alcătuită din N oscilatori armonici independenţi.

Soluţie

Deoarece oscilatorii sunt independenţi funcţia de partiţie Z a sistemului depinde de funcţia de partiţie Z_i a unui singur oscilator astfel:

$$Z = (Z_i)^N$$

Pentru a calcula pe Z_i se consideră hamiltonianul unui singur oscilator:

$$H_i = \frac{1}{2m} p_i^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x_i^2$$

Atunci

$$Z_i = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\left[\frac{1}{2m}p_i^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right]} dp_i dx_i,$$

unde $\beta = 1/k_B T$.

$$Z_i = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta m}{2}\omega^2 x_i^2} dx_i \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta}{2m}p_i^2} dp_i$$

$$Z_i = \left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{2\pi}{\beta\omega} = \frac{2\pi k_B T}{\omega}$$

Rezultă:

$$Z = (Z_i)^N = \left(\frac{2\pi k_B T}{\omega}\right)^N$$

Energia liberă este:

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T N \ln \frac{2\pi k_B T}{\omega}$$

iar entropia este:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B N \ln \frac{2\pi k_B T}{\omega} + k_B N$$

Energia internă este:

$$U = F + TS = N k_B T$$

iar capacitatea calorică a sistemului:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = k_B N$$

3.1.3 Să se calculeze capacitatea calorică la volum constant a unei substanţe alcătuită din N oscilatori armonici cuantici independenţi a căror spectru de energie este dat de expresia:

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 1, 2...$$

Soluţie

Deoarece oscilatorii sunt independenţi se calculează funcţia de partiţie pentru un singur oscilator.

$$Z_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

unde $\beta = 1/k_B T$. Se obţine::

$$Z_0 = e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\hbar\omega} = \frac{e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

Pentru întreg sistemul funcţia de partiţie este::

$$Z = (Z_0)^N = \frac{e^{-\frac{\beta N\hbar\omega}{2}}}{\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)^N}$$

iar energia liberă:

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln \frac{e^{-\frac{\beta N\hbar\omega}{2}}}{\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)^N}$$

$$F = N\left[\frac{\hbar\omega}{2} + k_B T \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right]$$

Entropia este:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -N k_B \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) + \frac{1}{T}\left(\frac{N\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \cdot e^{-\beta\hbar\omega}\right)$$

$$S = N\left[\frac{\hbar\omega}{T\left(e^{\beta\hbar\omega} - 1\right)} - k_B \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right]$$

iar energia internă:

$$U = F + TS = N\left[\frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\right]$$

Capacitatea calorică este:

$$C_p = C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = N k_B (\beta\hbar\omega)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{\left(e^{\beta\hbar\omega} - 1\right)^2}$$

3.1.4 Să se determine expresiile capacităţii calorice obţinută în problema precedentă în cazul temperaturilor foarte mici şi a temperaturilor foarte mari.

Soluţie

Notăm $T_0 = \hbar\omega/k$, această mărime având dimensiunile unei temperaturi. Se obţine:

$$C_V = Nk\left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \frac{\exp\left(\frac{T_0}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{T_0}{T}\right) - 1\right]^2}$$

Când $T \ll T_0$

$$\exp\left(\frac{T_0}{T}\right) \gg 1$$

şi

$$C_V = Nk\left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right)$$

Când $T \gg T_0$

$$\exp\frac{T_0}{T} \simeq 1 + \frac{T_0}{T} + \frac{1}{2}\left(\frac{T_0}{T}\right)^2$$

Atunci:

$$E = \frac{\exp\left(\frac{T_0}{T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{T_0}{T}\right) - 1\right]^2} \simeq \frac{1 + \frac{T_0}{T} + \frac{1}{2}\left(\frac{T_0}{T}\right)^2}{\left[\frac{T_0}{T} + \frac{1}{2}\left(\frac{T_0}{T}\right)^2\right]^2}$$

$$E \simeq \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \left[1 + \frac{T_0}{T} + \frac{1}{2}\left(\frac{T_0}{T}\right)^2\right]\left[1 - \frac{T_0}{T}\right]$$

$$E \simeq \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \left[1 - \frac{1}{2}\left(\frac{T_0}{T}\right)^2\right]$$

Rezultă:

$$C_V = Nk\left[1 - \frac{1}{2}\left(\frac{T_0}{T}\right)^2\right]$$

3.1.5 Să se calculeze coeficientul de dilatare termică pentru un solid pentru care energia potenţială a doi atomi care se găsesc deplasaţi cu distanţa x faţă de poziţia lor de echilibru este:

$$E_p = a_1x^2 - a_2x^3 - a_3x^4$$

unde a_1, a_2, a_3 sunt constante pozitive.

Soluţie

Dilatarea cristalului este dată de valoarea medie a deplasării x. Mărimea medie x se calculează cu ajutorul funcţiei de distribuţie Boltzmann

$$\langle x\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\beta E_p\right) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta E_p\right) dx}$$

unde $\beta = 1/kT$

Vom considera integrala de la numărător:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left[-\beta\left(a_1x^2 - a_2x^3 - a_3x^4\right)\right] dx$$

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\beta a_1 x^2\right) \exp\left(\beta a_2 x^3 + \beta a_3 x^4\right)$$

Deoarece putem face aproximaţia:

$$\exp\left(\beta a_2 x^3 + \beta a_3 x^4\right) = 1 + \beta a_2 x^3 + \beta a_3 x^4$$

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(x + \beta a_2 x^4 + \beta a_3 x^5\right) \exp\left(-\beta a_1 x^2\right) dx$$

Expresia de mai sus cuprinde trei integrale:

$$I_{11} = \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\beta a_1 x^2\right) dx = 0$$

$$I_{12} = \beta a_2 \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-\beta a_1 x^2} dx = -\frac{a_2}{2a_1} \int_{-\infty}^{\infty} x^3 e^{-\beta a_1 x^2} d\left(-\beta a_1 x^2\right)$$

$$I_{12} = \frac{3a_2}{2a_1} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\beta a_1 x^2\right) dx = \frac{3a_2}{4a_1}\sqrt{\frac{\pi}{d^3}}$$

$$I_{13} = \beta a_3 \int_{-\infty}^{\infty} x^5 \exp\left(-\beta a_1 x^2\right) dx = 0$$

Integralele I_{11} şi I_{13} sunt nule deoarece sunt integrale din funcţii impare între limitele $\pm\infty$.

Pentru calculul integralei de la numitor se face aproximaţia:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta E_p\right) dx \approx \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta a_1 x^2\right) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta a_1}}$$

Atunci:

$$\langle x \rangle = \frac{3a_2}{4a_1^2} kT$$

Coeficientul de dilatare se calculează cu relaţia:

$$\alpha = \frac{1}{x_0} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial T} = \frac{1}{x_0} \frac{3a_2}{4a_1^2} k$$

unde x_0 este distanţa de echilibru a atomilor. Ea se obţine considerând derivata energiei potenţiale egală cu zero.

$$\frac{dE_p}{dx} = 2a_1 x - 3a_2 x^2 - 4a_2 x^3 = 0$$

Neglijând termenul ce conţine pe x^3 rezultă:

$$x_0 = \frac{2a_1}{3a_2}$$

Atunci:

$$\alpha = \frac{9a_2^2}{8a_1^3} k$$

3.1.6 Pentru un cristal în echilibru termic să se determine concentraţia de defecte Schottky. Defectele Schottky apar prin trecerea unui atom dintr-un nod al reţelei din interior spre un nod al reţelei de pe suprafaţa cristalului. Se cunoaşte energia de activare E_i necesară acestui proces.

Soluţie

Notăm cu n numărul de vacanţe şi cu N numărul de noduri. Energia necesară pentru a forma n vacanţe este $U = nE_i$. Entropia sistemului este:

$$S = k \ln P$$

unde P este numărul de microstări compatibile cu macrostarea respectivă.

$$P = C_N^n = \frac{N!}{n!\,(N-n)!}$$

Atunci:

$$S = k \ln \frac{N!}{n!\,(N-n)!}$$

Energia liberă a cristalului este dată de relaţia:

$$F = U - TS$$

$$F = nE_i - Tk \ln \frac{N!}{n!\,(N-n)!}$$

Deoarece N, n, $N-n$ sunt numere mari utilizăm formula lui Stirling

$$\ln x = x \ln x - x$$

Atunci:

$$\ln \frac{N!}{n!\,(N-n)!} = N \ln N - n \ln n - (N-n) \ln (N-n)$$

şi

$$F = nE_i - Tk\,[N \ln N - n \ln n - (N-n) \ln (N-n)]$$

Echilibrul se realizează când energia liberă este minimă.

$$\frac{\partial F}{\partial n} = 0$$

Rezultă:

$$E_i - Tk\,[-\ln n - 1 + \ln (N-n) + 1] = 0$$

De aici:

$$n = \frac{N}{1 + \exp\left(\frac{E_i}{kT}\right)}$$

3.1.7 În cazul unui cristal la echilibru termic, să se calculeze concentraţia de defecte Frenkel. Defectele Frenkel se formează prin deplasarea unui atom dintr-un nod al reţelei cristaline într-o poziţie situată între alte două noduri (interstiţiu). Se cunosc N numărul de noduri ale reţelei cristaline, N_1 numărul de interstiţii şi energia de activare a acestui proces E_i.

Soluţie

Energia necesară transferului a n atomi în poziţii interstiţiale este:

$$U = nE_i$$

Entropia sistemului este:

$$S = -k \ln P$$

unde P numărul de microstări compatibile cu macrostarea dată este:

$$P = \frac{N!}{(N-n)!n!} \frac{N_1!}{(N_1 - n)\, n!}$$

Folosind formula lui Stirling:

$$\begin{aligned} \ln P = & N \ln N - n \ln n - (N-n) \ln (N-n) \\ & + N_1 \ln N_1 - n \ln n - (N_1 - n) \ln (N_1 - n) \end{aligned}$$

Punem condiţia ca energia liberă $F = U - TS$ să fie minimă:

$$\frac{\partial F}{\partial n} = 0$$

Rezultă:

$$\frac{E_i}{kT} - \ln n + \ln (N-n) - \ln n + \ln (N_1 - n) = 0$$

Atunci:

$$n^2 = (N - n)\,(N_1 - n) \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$$

Dacă $n \ll N$ şi $n \ll N_1$:

$$n \simeq \sqrt{NN_1} \exp\left(-\frac{E_i}{2kT}\right)$$

3.1.8 Se consideră un cristal format din N atomi. Se cunoaşte dN_ν numărul frecvenţelor asociate oscilatorilor atomici din volumul V care sunt cuprinse în intervalul ν şi $\nu + d\nu$

$$dN_\nu = 4\pi V \frac{3}{v_s^2}\nu^2 d\nu$$

unde

$$\frac{3}{v_s^2} = \frac{1}{v_l^2} + \frac{1}{v_t^2}$$

iar ν_l este viteza de propagare a undei longitudianale şi ν_t este viteza de propagare a undei transversale. Să se determine frecvenţa Debye $\nu_{D.}$ Frecvenţa Debye (ν_D) este frecvenţa maximă de vibraţie a reţelei cristaline.

Soluţie

Punem condiţia ca numărul total de moduri de vibraţie să fie $3N$, deoarece numărul de grade de libertate a sistemului este aproximativ $3N$.

$$\int\limits_0^{\nu_D} dN_\nu = 3N$$

Atunci

$$\frac{12\pi V}{v_s^2}\int_0^{\nu_D}\nu^2 d\nu = 3N$$

Rezultă:

$$\nu_D = \left(\frac{3Nv_s^2}{4\pi V}\right)^{1/3}$$

3.1.9 Să se determine pe baza modelui Debye capacitatea calorică a unui corp solid a) la temperaturi joase b) la temperaturi ridicate. Considerăm că fononii urmează distribuţia Bose-Einstein.

Soluţie

Energia oscilatorilor care formează solidul este:

$$U = \int_0^{\nu_D}\frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1}dN_\nu$$

$$U = \frac{12\pi V}{v_s^2}\int_0^{\nu_D}\frac{h\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1}d\nu$$

Notăm cu

$$x = \frac{h\nu}{kT}$$

Atunci:

$$\nu = \frac{kT}{h}x \quad \text{şi} \quad d\nu = \frac{kT}{h}dx$$

Rezultă:

$$U = \frac{12\pi V h}{v_s^2}\left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1}dx$$

unde am notat cu

$$\theta_D = \frac{h\nu_D}{k}$$

temperatura Debye. Atunci:

$$U = \frac{12\pi V}{v_s^2}\nu_D \frac{kT^4}{\theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1}dx$$

Dacă se ţine cont de expresia lui ν_D determinată în problema precedentă rezultă:

$$U = 9Nk\frac{T^4}{\theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1}dx$$

a) La temperaturi joase $T \ll \theta_D$ iar θ_D/T are o valoare relativ mare, astfel că integrala de mai sus se poate extinde la infinit. Putem scrie că:

$$U = 9Nk\frac{T^4}{\theta_D^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1}dx$$

Deoarece

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1}dx = \frac{\pi^4}{15}$$

rezultă:

$$U = \frac{3\pi^4}{5}\frac{Nk}{\theta_D^3}T^4$$

şi

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{12\pi^4}{5}Nk\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

b) În cazul temperaturilor ridicate $T \gg \theta_D$, iar x este mic astfel că:

$$\frac{x^3}{e^x - 1} \simeq \frac{x^3}{1 + x + \frac{x^2}{2} - 1} \simeq x^2\left(1 - \frac{x}{2}\right) \simeq x^2$$

Atunci:

$$U = 9Nk\frac{T^4}{\theta_D^3}\int_0^{\theta_D/T} x^2 dx = 3NkT$$

Căldura specifică este:

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = 3Nk$$

Această valoare este egală cu cea calculată pe baza fizicii clasice.

3.2 Statistica purtătorilor de sarcină în metale şi semiconductori

3.2.1 Să se determine densitatea de stări pentru un gaz de fermioni care ocupă un volum V. Se va considera că volumul corespunzător unei stări energetice în spaţiul fazelor este h^3.

Soluţie

Vom determina volumul din spaţiul fazelor $d\Omega = Vd\tau$ care corespunde intervalului energetic E, $E+dE$, unde $d\tau$ corespunde volumului din spaţiul impulsului corespunzător intervalului energetic considerat.

$$d\tau = dp_x dp_y dp_z$$

Integrând pe toate unghiurile polare rezultă:

$$d\tau = 4\pi p^2 dp$$

Deoarece

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

unde m este masa (efectivă) a fermionului

$$dE = \frac{p}{m} dp$$

Cum $p = \sqrt{2mE}$ rezultă că

$$d\tau = 4\pi m\sqrt{2mE}dE$$

Astfel

$$d\Omega = 4\sqrt{2}\pi V m^{3/2} E^{1/2} dE$$

Volumul unei stări în spaţiul fazelor corespunzătoare unei stări energetice este h^3. Atunci numărul de stări este:

$$dN_s = 2 \times \frac{d\Omega}{h^3} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{3/2} E^{1/2} dE$$

unde factorul 2 provine din faptul că o stare de energie dată poate fi ocupată de 2 electroni cu spini opuşi.

Astfel densitatea de stări energetice este:

$$g\left(E\right) = \frac{dN_s}{dE} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

3.2.2 Să se determine energia Fermi E_F a electronilor din metale la temperatura $T = 0$ K. Energia Fermi la $T = 0$ K este energia maximă pe care o poate avea un electron în metal.

Soluţie

La $T = 0$ K toate stările energetice sunt ocupate până la nivelul E_F. Atunci numărul de electroni din unitatea de volum este:

$$n = \int_0^{E_F} g\left(E\right) dE$$

$$n = \int_0^{E_F} \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} dE$$

Rezultă

$$n = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2}$$

Astfel energia Fermi este:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$$

În această expresie m reprezintă masa efectivă a electronului.

3.2.3 Cunoscînd funcţia de distibuţie Fermi- Dirac

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right)+1}$$

să se arate că pentru o funcţie $F(E)$ continuă şi diferenţiabilă la $E=\mu$, la temperaturi nu prea mari că:

$$\int_0^\infty F(E)\, f(E)\, dE = \int_0^\mu F(E)\, dE + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 F'(\mu)$$

Soluţie

Considerăm integrala:

$$I = \int_0^\infty \frac{F(E)}{\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right)+1} dE$$

Efectuăm substituţia:

$$E-\mu = kTz$$

Atunci:

$$I = kT \int\limits_{-\mu/kT}^{\infty} \frac{F(\mu+kTz)}{e^z+1} dz$$

$$I = kT \int\limits_0^{\mu/kT} \frac{F(\mu - kTz)}{e^{-z}+1} dz + kT \int\limits_0^{\infty} \frac{F(\mu + kTz)}{e^{z}+1} dz$$

Punem în prima integrală

$$\frac{1}{e^{-z}+1} = 1 - \frac{1}{e^{z}+1}$$

Atunci

$$I = \int_0^{\mu/kT} F(\mu - kTz)\, kTdz - T \int_0^{\mu/kT} \frac{F(\mu - kTz)}{e^{z}+1} kdz +$$
$$+ T \int_0^{\mu/kT} \frac{F(\mu + kTz)}{e^{z}+1} kdz$$

În cea de-a doua integrală facem limita superioară ∞ deoarece la temperaturi joase $\mu/T \gg 1$. Atunci:

$$I = \int_0^{\mu} F(E)\, dE + T \int_0^{\infty} \frac{F(\mu + kTz) - F(\mu - kTz)}{e^{z}+1} kdz$$

Dezvoltăm în serie Taylor după puterile lui kTz

$$F(\mu + kTz) = F(\mu) + F'(\mu)\, kTz + F''(\mu)\, \frac{k^2T^2z^2}{2}$$

$$F(\mu - kTz) = F(\mu) - F'(\mu)\, kTz + F''(\mu)\, \frac{k^2T^2z^2}{2}$$

Astfel

$$\int_0^\infty \frac{F(\mu + kTz) - F(\mu - kTz)}{e^z + 1} dz = k^2 T F'(\mu) \int_0^\infty \frac{z}{e^z + 1} dz$$

Deoarece:

$$\int_0^\infty \frac{z}{e^z + 1} dz = \frac{\pi^2}{6}$$

Rezultă în final că:

$$I = \int_0^\mu F(E)\, dE + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 F'(\mu)$$

3.2.4 Să se se determine dependenţa de temperatură a nivelului Fermi la temperaturi joase (în apropiere de zero absolut) pentru metale. Nivelul Fermi este dat de valoarea lui $\mu-$ potenţialul chimic.

Soluţie

În cazul metalelor concentraţia de electroni variază foarte puţin cu temperatura T. Pentru a calcula concentraţia de electroni, ţinem cont că aceasta este egală cu suma numărului mediu de electroni din toate stările de energie posibile.

$$n = \int_0^\infty g(E) f(E)\, dE$$

unde $g(E)$ este densitatea de stări energetice iar $F(E)$ este funcţia de distibuţie Fermi-Dirac. Pentru temperaturi mici aplicăm formula discutată anterior.

$$n = \int_0^{\mu} g\left(E\right) dE + \frac{\pi^2}{6}\left(kT\right)^2 g'\left(\mu\right)$$

Rezultă:

$$n = \frac{1}{2n^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \int_0^{\mu} E^{1/2} dE + \frac{\pi^2}{6} k^2 T^2 \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{\mu}}$$

$$n = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \mu^{3/2}\left[1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right]$$

Dar la $T = 0$ K

$$n = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2}$$

Rezultă:

$$E_F^2 = \mu^{3/2}\left[1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right]$$

şi

$$\mu = E_F\left[1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right]^{-2/3}$$

Într-o primă aproximaţie putem înlocui în paranteză pe μ cu E_F şi apoi dezvoltăm după $\left(\frac{kT}{E_F}\right)^2 \ll 1$. Rezultă:

$$\mu = E_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{E_F}\right)^2\right]$$

În cazul metalelor rezultă că modificarea poziţiei nivelului Fermi este neglijabilă.

3.2.5 Să se calculeze energia medie a unui electron într-un metal la temperatura $T = 0$ K şi să se stabilească expresia energiei unui gaz de fermioni la zero absolut.

Soluţie

Deoarece la 0 K toate stările sunt ocupate cu electroni până la nivelul Fermi energia medie se poate scrie ca

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{E_F} Eg\left(E\right)dE}{\int_0^{E_F} g\left(E\right)dE}$$

unde $g\left(E\right)$ este desitatea de stări. Se ţine cont de expresia lui $g\left(E\right)$ determinată în problema 3.2.1

$$g\left(E\right) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

şi se obţine:

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^{E_F} E^{3/2}dE}{\int_0^{E_F} E^{1/2}dE} = \frac{3}{5}E_F$$

Astfel energia gazului de femioni din unitatea de volum la 0 K este:

$$U = n\left\langle E \right\rangle = \frac{3n}{5}E_F$$

3.2.6 Să se calculeze energia medie pe unitatea de volum a electronilor dintr-un metal aflaţi la o temperatură T şi să se determine capacitatea calorică a acestora.

Soluţie

În acest caz

$$U = \int_0^{\infty} Eg(E) f(E) dE$$

unde $f(E)$ este funcţia de distribuţie Fermi Dirac. Pentru calculul acestei integrale vom utiliza formula:

$$\int_0^{\infty} F(E) f(E) dE = \int_0^{\mu} F(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 F'(\mu)$$

unde:

$$F(E) = Eg(E)$$

Rezultă:

$$U = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\int_0^{\mu} E^{3/2} dE + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left(\mu^{3/2} \right)' \right]$$

$$U = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{3}{2} \mu^{1/2} \right]$$

Cum

$$\mu = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]$$

$$\mu^{5/2} = E_F^{5/2} \left[1 - \frac{5\pi^2}{24} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 + \frac{5\pi^2}{192} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^4 \right]$$

$$\mu^{1/2} = E_F^{1/2} \left[1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]$$

rezultă:

$$U = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{5/2} \left[\frac{2}{5} + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 - \frac{\pi^4}{96} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^4 \right]$$

Neglijăm temenul la puterea a 4-a din paranteză deoarece este foarte mic.

$$U = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{5/2} \left[\frac{2}{5} + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]$$

Se ţine cont de expresia nivelului Fermi la 0 K

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n \right)^{2/3}$$

Se obţine:

$$U = \frac{3}{5} n E_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]$$

Capacitatea calorică volumică este:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right) = \frac{\pi^2}{2} nk \frac{kT}{E_F}$$

3.2.7 Să se calculeze presiunea gazului electronic dintr-un metal la o temperatură apropiată de 0 K.

Soluţie

Deoarece energia gazului de electroni pe unitatea de volum este:

$$U_0 = \frac{3n}{5} E_F$$

energia gazului electronic din volumul V este:

$$U = \frac{3n}{5} E_F V$$

cu

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$$

Dar cum $n = N/V$ unde N este numărul total de electroni din volumul considerat, rezultă:

$$U = \frac{3N}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 N\right)^{2/3} V^{-2/3}$$

Presiunea gazului de electroni este:

$$p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = \frac{(3\pi)^{2/3}}{5} \frac{\hbar^2}{2m} n^{5/3}$$

3.2.8 Să se calculeze concentraţia de electroni dintr-un semiconductor intrinsec nedegenerat în funcţie de temperatură, la temperaturi nu prea mari. Se consideră că pentru electronii din banda de conducţie a semiconductorului este îndeplinită condiţia

$$\frac{E-\mu}{kT} \gg 1$$

Soluţie

În acest caz funcţia de distribuţie Fermi-Dirac trece într-o funcţie boltzmanniană

$$f\left(E\right) = \frac{1}{\exp\left[\frac{E-\mu}{kT}\right]+1} \simeq \exp\left[-\frac{E-\mu}{kT}\right]$$

Notăm cu E_C limita inferioară a benzii de conducţie. Atunci:

$$n = \int_{E_C}^{\infty} g_n\left(E\right) f\left(E\right) dE$$

unde $g_n\left(E\right)$ este densitatea de stări.

$$\frac{p^2}{2m_n} = E - E_C$$

deoarece în cazul semiconductorilor trebuie ţinut seama de limita energetică inferioară E_C a benzii de conducţie. Am notat cu m_n masa efectivă a electronilor.

Repetând raţionamentul din problema 3.2.1 se obţine:

$$g_n\left(E\right) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_n}{\hbar}\right)^{3/2}\left(E-E_C\right)^{1/2}$$

Astfel

$$n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_{E_C}^{\infty}(E-E_C)^{1/2}\exp\left[-\frac{E-\mu}{kT}\right]dE$$

Efectuăm schimbarea de variabilă:

$$x = \frac{E-E_C}{kT}$$

Se obţine:

$$n = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_n kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{E_C-\mu}{kT}\right)\int_0^{\infty}x^{1/2}e^{-x}dx$$

$$n = \frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{2m_n kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{E_C-\mu}{kT}\right) = N_C\exp\left(-\frac{E_C-\mu}{kT}\right)$$

unde N_C este concentraţia efectivă de electroni

$$N_C = \frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{2m_n kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

În mod analog se poate determina şi concentraţia golurilor:

$$p = \frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{2m_p kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{\mu-E_V}{kT}\right) = N_V\exp\left(-\frac{\mu-E_V}{kT}\right)$$

unde m_p este masa efectivă a golurilor iar N_V este concentraţia efectivă de goluri.

$$N_V = \frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{2m_p kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

3.2.9 Ţinând cont de rezultatele obţinute în problema precedentă să se determine variaţia cu temperatura a poziţiei nivelului Fermi μ cu temperatura în cazul unui semiconductor intrinsec.

Soluţie

Pentru aceasta se pune condiţia de neutralitate a semiconductorului, adică concentraţia de goluri trebuie să fie egală cu concentraţia de electroni:

$$\frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{2m_n kT}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{E_C-\mu}{kT}} = \frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{2m_p kT}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{\mu-E_V}{kT}}$$

Rezultă:

$$(m_n)^{3/2}\exp\left(-\frac{E_C-\mu}{kT}\right) = (m_p)^{3/2}\exp\left(-\frac{\mu-E_V}{kT}\right)$$

Se logaritmează expresia de mai sus şi se obţine:

$$\frac{\mu-E_C}{kT} + \frac{3}{2}\ln m_e = \frac{E_V-\mu}{kT} + \frac{3}{2}\ln m_p$$

Rezultă:

$$\mu = \frac{E_C+E_V}{2} + \frac{kT}{2}\ln\left(\frac{m_p}{m_n}\right)^2$$

3.2.10 Să se determine poziţia nivelui Fermi într-un semiconductor dopat cu impurităţi donoare. Se consideră cunoscută N_d

concentraţia de atomi donori şi numărul de impurităţi donoare ionizate:

$$N_{di} = \frac{N_d}{1 + 2\exp\left(\frac{\mu - E_D}{kT}\right)}$$

unde E_D este energia nivelui donor.

Soluţie

Condiţia de neutralitate este:

$$n = p + N_{di}$$

Deoarece $np = n_i^2$ iar n este foarte mare concentraţia de goluri este foarte mică. Vom considera că $p \simeq 0$. Dacă se consideră semiconductorul nedenegerat

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - \mu}{kT}\right)$$

Atunci:

$$N_C \exp\left(-\frac{E_C - \mu}{kT}\right) = \frac{N_d}{1 + 2\exp\left(\frac{\mu - E_D}{kT}\right)}$$

De aici rezultă ecuaţia de gradul doi:

$$\left(e^{\frac{\mu}{kT}}\right)^2 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_D}{kT}} e^{\frac{\mu}{kT}} - \frac{1}{2}\frac{N_d}{N_C} e^{\frac{E_D + E_c}{kT}} = 0$$

Rezultă:

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = -- \frac{1}{4} e^{\frac{E_D}{kT}} \left[1 - \sqrt{1 + 8\frac{N_d}{N_C} \exp\frac{E_C - E_D}{kT}}\right]$$

La temperaturi joase:

$$8\frac{N_d}{N_C}\exp\frac{E_C - E_d}{kT} \gg 1$$

Dezvoltând radicalul în serie se obţine:

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = \sqrt{\frac{N_d}{2N_C}}\exp\frac{E_C + E_d}{kT}$$

Astfel:

$$\mu = \frac{E_C + E_d}{2} + kT\ln\frac{N_d}{2N_C}$$

cu

$$N_C = \frac{1}{4\pi^3}\left(\frac{2m_n kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

La temperaturi foarte joase (în particular la 0 K) nivelul Fermi μ se găseşte la jumătatea distanţei dintre banda de conducţie şi nivelul donor.

3.2.11 Să se studieze dependenţa de temperatură a concentraţiei de electroni într-un conductor extrinsec dopat cu impurităţi donoare.

Soluţie

Concentraţia electronilor în banda de conducţie este:

$$n = N_C\exp\left(-\frac{E_C - \mu}{kT}\right)$$

În cazul unui semiconductor dopat cu impurităţi donoare în cazul că:

$$8\frac{N_d}{N_C}\exp\frac{E_C - E_D}{kT} \gg 1$$

nivelul Fermi este:

$$\mu = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{kT}{2}\ln\frac{N_d}{2N_C}$$

Atunci concentraţia electronilor se scrie ca:

$$n = \sqrt{\frac{N_C N_D}{2}}\exp\frac{E_D - E_C}{2kT}$$

Deoarece:

$$N_C = \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2m_n kT}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

rezultă:

$$n = CT^{3/4}\exp\frac{E_D - E_C}{2kT}$$

Atunci

$$\ln\frac{n}{T^{3/4}} = \mathrm{const} + \frac{E_D - E_C}{2kT}$$

Notînd cu:

$$E_i = E_D - E_C$$

energia de ionizare a donorului, rezultă:

$$\ln\frac{n}{T^{3/4}} = \mathrm{const} + \frac{E_i}{2kT}$$

3.3 Fenomene de transport

3.3.1 Se consideră un fir de Cu cu lungimea $l = 1$ m la capetele căruia se aplică tensiunea $U = 10$ mV . Concentraţia de electroni în cupru este $n = 8,43 \times 10^{28}$ electroni/m^3. Cunoscând rezistivitatea cuprului $\rho = 1,55 \times 10^{-8}$ Ωm şi sarcina electronului $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C să se determine:

a) mobilitatea electronilor μ_n

b) viteza de drift a electronilor

c) timpul în care un electron stăbate distanţa l

Soluţie

a)

$$\sigma = ne\mu_n = \frac{1}{\rho}$$

$$\mu_n = \frac{1}{\rho en} = 4,78 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{Vs}$$

b) viteza de drift este:

$$v = \mu_n E = \mu_n \frac{U}{l} = 4,78 \times 10^{-5} \text{ m/s}$$

c) timpul în care este parcurs conductorul este:

$$t = \frac{l}{v} = 20920 \text{ s}$$

3.3.2 Să se determine viteza de transport (drift) a electronilor printr-un fir de argint cu diametrul $d = 0,1$ mm prin care trece un curent $I = 1$ mA. Se ştie că fiecare atom de argint contribuie cu un electron în banda conducţie. Se cunoaşte masa molară a argintului $\mu = 107,87$ kg/kmol, densitatea $\rho = 10,4 \times 10^3$ kg/m^3, numărul lui Avogadro $N_A = 6,023 \times 10^{26}$ molecule/kmol şi sarcina electronului $e = 1,6 \times 10^{-19}$ C.

Soluţie

Scriem densitatea de curent

$$j = \frac{I}{S} = \frac{4I}{\pi d^2} = nev$$

unde n este concentraţia de atomi

$$n = \frac{\rho}{\mu} N_A$$

Atunci:

$$\frac{4I}{\pi d^2} = \frac{\rho}{\mu} N_A ev$$

Rezultă:

$$v = \frac{4I\mu}{\rho N_A e \pi d^2} = 1,37 \times 10^{-5} \text{ m/s}$$

3.3.3 Să se calculeze rezistivitatea unui monocristal de Ge intrinsec şi a unui cristal de Si intrinsec la temperatura $T = 300$ K. Se cunosc pentru germaniu: concentraţia intrinsecă a purtătorilor de sarcină $n_i = p_i = 2,5 \times 10^{19}$ m^{-3}, mobilitatea electronilor $\mu_n = 0,36$ m^2/Vs şi mobilitatea golurilor $\mu_p = 0,17$ m^2/Vs. Se cunosc pentru siliciu: concentraţia intrinsecă a purtătorilor de sarcină $n_i = p_i = 2 \times 10^{16}$ m^{-3}, mobilitatea electronilor

$\mu_n = 0,12$ m^2/Vs şi mobilitatea golurilor $\mu_p = 0,05$ m^2/Vs

Soluţie

Rezistivitatea unui semiconductor este:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{e\,(n\mu_n + p\mu_p)}$$

În cazul semiconductorului intrinsec

$$n = p = n_i$$

Rezultă:

$$\rho = \frac{1}{en_i\,(\mu_n + \mu_p)}$$

Valorile numerice sunt:

$$\rho_{Ge} = 0,472\ \Omega\text{m}$$
$$\rho_{\text{Si}} = 1838\ \Omega\text{m}$$

3.3.4 Să se calculeze cu câte grade trebuie încălzită o bară de Ge intrinsec aflată la temperatura $T = 300$ K pentru a-şi reduce la jumătate rezistenţa, neglijând variaţia mobilităţilor cu temperatura. Se cunoaşte lărgimea benzii interzise pentru germaniu $E_g = E_C - E_V = 0,72$ eV.

Soluţie

Deoarece:

$$R = \rho \frac{l}{S}$$

pentru ca rezistenţa să scadă de 2 ori este necesar ca rezistivitatea să scadă de 2 ori

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{en_i\left(\mu_n + \mu_p\right)}$$

Concentraţia intrinsecă este:

$$n_i\left(T\right) = \sqrt{N_V N_C} \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{2kT}\right)$$

Dacă $\rho_2 = \rho_1/2$ rezultă că $\sigma_2 = 2\sigma_1$
Atunci

$$e\left(\mu_n + \mu_p\right) n\left(T + \Delta T\right) = 2e\left(\mu_n + \mu_p\right) n\left(T\right)$$

şi

$$\exp\left[-\frac{E_C - E_V}{2k\left(T + \Delta T\right)}\right] = 2\exp\left(-\frac{E_C - E_V}{2kT}\right)$$

Prin logaritmarea expresiei de mai sus rezultă:

$$\Delta T = \frac{2kT^2 \ln 2}{E_g - 2kT\ln 2} = 15,7\ {}^\circ\mathrm{C}$$

3.3.5 Variaţia rezistivităţii electrice a metalelor este descrisă prin formula lui Grüneisen

$$\rho(T) = AT^5 \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^5}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx$$

unde

$$x = \frac{h\nu}{kT}$$

Să se găsească dependenţa de temperatură a rezistivităţii metalelor în domeniul temperaturilor înalte şi joase.

Soluţie

La temperaturi înalte $x \ll 1$, şi exponenţialele se dezvoltă în serie:

$$(e^x - 1)\left(1 - e^{-x}\right) \simeq (1 + x - 1)(1 - 1 + x) = x^2$$

Atunci:

$$\rho(T) = AT^5 \int_0^{\frac{\theta}{T}} x^3 dx = \frac{A\theta^4}{4} T$$

Aceasta înseamnă că la temperaturi ridicate rezistivitatea creşte liniar cu temperatura. La temperaturi scăzute limita integralei poate fi considerată ∞ şi integrala este o constantă. Atunci:

$$\rho(T) \propto T^5$$

3.3.6 Să se determine rezistivitatea maximă a unui semiconductor şi să se compare cu rezistivitatea germaniului. Se cunosc pentru germaniu concentraţia intrinsecă a purtătorilor de sarcină $n_i = p_i = 2,5 \times 10^{19}$ m^{-3}, mobilitatea electronilor $\mu_n = 0,36$ m^2/Vs şi mobilitatea golurilor $\mu_p = 0,17$ m^2/Vs

Soluţie

Rezistivitatea este:

$$\rho = \frac{1}{e\left(n\mu_n + p\mu_p\right)}$$

În plus

$$np = n_i^2 \qquad \text{şi} \qquad p = \frac{n_i^2}{n}$$

Atunci:

$$\rho = \frac{1}{e\left(n\mu_n + \frac{n_i^2}{n}\mu_p\right)}$$

Pentru a determina rezistivitatea maximă punem condiţia:

$$\frac{d\rho}{dn} = \frac{1}{e}\frac{\mu_n - \frac{n_i^2}{n^2}\mu_p}{\left(n\mu_n + \frac{n_i^2}{n}\mu_p\right)^2} = 0$$

Rezultă:

$$n = n_i\sqrt{\frac{\mu_p}{\mu_n}}$$

şi

$$p = n_i \sqrt{\frac{\mu_n}{\mu_p}}$$

Atunci

$$\rho_{\max} = \frac{1}{2en_i\sqrt{\mu_p \mu_n}}$$

În cazul germaniului intrinsec $n = p = n_i$ şi rezistivitatea acestuia este:

$$\rho_i = \frac{1}{en_i\left(\mu_n + \mu_p\right)}$$

Se observă că:

$$\frac{\rho_{\max}}{\rho_i} = \frac{\mu_n + \mu_p}{2\sqrt{\mu_p \mu_n}}$$

Rezultă:

$$\rho_{\max} = 0,50 \quad \Omega\text{m}$$

$$\rho_i = 0,47 \quad \Omega\text{m}$$

3.3.7 La temperatura $T_1 = 300$ K, concentraţia purtătorilor de sarcină într-un semiconductor este 2×10^{19} m^{-3}. Cu cât creşte concentraţia purtătorilor de sarcină când temperatura creşte cu un grad? Se cunosc: lărgimea benzii interzise $E_g = 0,67$ eV şi constanta lui Boltzmann $k = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K.

Soluţie

Concentraţia purtătorilor de sarcină într-un semiconductor intrinsec este de forma:

$$n_i = CT^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

Variaţia numărului de purtători se scrie:

$$\Delta n = CT_2^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT_2}\right) - CT_1^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT_1}\right)$$

Deoarece $T_2 = T_1 + 1$ atunci:

$$\Delta n \simeq CT_1 e^{-\frac{E_g}{2kT_1}} \left[e^{\frac{E_g}{2k}\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right)} - 1\right]$$

Astfel:

$$\Delta n \simeq n_1 \left[e^{\frac{E_g}{2k}\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right)} - 1\right] = 0,88 \times 10^{18}\ \mathrm{m}^{-3}$$

3.3.8 Într-un semiconductor de tip n concentraţia donorilor complet ionizaţi este $N_d = 8 \times 10^{20}\ \mathrm{m}^{-3}$ iar concentraţia intrinsecă a purtătorilor de sarcină este $n_i = 3 \times 10^{19}\ \mathrm{m}^{-3}$. Să se calculeze concentraţia purtătorilor liberi.

Soluţie

Fie n şi p concentraţiile de electroni şi goluri. Condiţia de neutralitate este:

$$n = N_d + p$$

Deoarece

$$np = n_i^2$$

rezultă:

$$p^2 + pN_d - n_i^2 = 0$$

Ecuaţia are soluţia:

$$p = \frac{N_d}{2}\left(\sqrt{1 + \left(\frac{2n_1}{N_d}\right)^2} - 1\right) = 1,12 \times 10^{18}\ \mathrm{m}^{-3}$$

Concentraţia electronilor este:

$$n = \frac{n_i^2}{p} = 8.01 \times 10^{20}\ \mathrm{m}^{-3}$$

3.4 Proprietăţi magnetice

3.4.1 Să se arate că dacă se neglijează variaţia volumului la magnetizarea unei substanţe magnetice omogene căldura specifică este dată de expresia

$$c_H = \left(\frac{\partial u}{\partial H}\right)_T - \mu_0 H \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H$$

când intensitatea câmpului magnetic este constantă. M este densitatea de magnetizare, H este intensitatea câmpului magnetic, c_H este căldura specifică a unităţii de volum, u energia internă a unităţii de volum, iar μ_0 permitivitatea vidului.

Soluţie

Pentru unitatea de volum variaţia energiei interne a unei substanţe magnetice este:

$$du = \delta Q + \mu_0 H dM$$

sau

$$\delta Q = du - \mu_0 H dM$$

Pentru $u = u(T, H)$

$$du = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_H dT + \left(\frac{\partial u}{\partial H}\right)_T dH$$

Pentru $M = M(T, H)$

$$dM = \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H dT + \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T dH$$

Se obţine:

$$\delta Q = \left[\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right) - \mu_0 H \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)\right] dT + \left[\left(\frac{\partial u}{\partial H}\right) - \mu_0 H \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)\right] dH$$

şi atunci:

$$c_H = \left(\frac{\delta Q}{dT}\right)_H = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_H - \mu_o H \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H$$

3.4.2 Dacă se neglijează variaţia volumului când are loc magnetizarea să se demonstreze că pentru o substanţă omogenă are loc relaţia:

$$\chi_S = \left(\frac{c_M}{c_H}\right)\chi_T \tag{3.1}$$

unde

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T \tag{3.2}$$

este susceptibilitatea magnetică izotermă iar

$$\chi_S = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_S \tag{3.3}$$

este susceptibilitatea magnetică adiabatică.

În relaţiile de mai sus c_M este căldura specifică a unităţii de volum la densitate de magnetizare constantă, iar c_H este căldura specifică a unităţii de volum la intensitate constantă a câmpului magnetic.

Soluţie

Starea sistemului este caracterizată de parametri T, H , M care sunt legaţi printr-o ecuaţie de stare. Atunci $u = u(H, M)$ unde u este energia internă a unităţii de volum. Pentru unitatea de volum principiul I al termodinamicii se scrie:

$$\delta Q = du - \mu_0 H dM$$

Pentru o transformare adiabatică ($\delta Q = 0$) se obţine:

$$du = \mu_0 H dM$$

sau:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_H dM + \left(\frac{\partial u}{\partial H}\right)_M dH - \mu_0 H dM = 0$$

şi regrupând termenii:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial H}\right)_M dH + \left[\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_H - \mu_0 H\right] dM = 0$$

de unde:

$$\chi_S = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_S = -\frac{\left(\frac{\partial u}{\partial H}\right)_M}{\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_H - \mu_0 H}$$

Dar:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial H}\right)_M = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_M \left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_M = c_M \left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_M$$

şi:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_H - \mu_0 H = \left[\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_H - \mu_0 H \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H\right] \left(\frac{\partial T}{\partial M}\right)_H$$

Cum în problema precedentă am demostrat că:

$$c_H = \left(\frac{\delta Q}{dT}\right)_H = \left[\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_H - \mu_0 H \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H\right]$$

Atunci:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_H - \mu_0 H = c_H \left(\frac{\partial T}{\partial M}\right)_H$$

Rezultă:

$$\chi_S = -\frac{c_M \left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_M}{c_H \left(\frac{\partial T}{\partial M}\right)_H} = \frac{c_M}{c_H}\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T = \frac{c_M}{c_H}\chi_T$$

3.4.3 La o substanţă paramagnetică ideală susceptibilitatea variază cu temperatura după o lege de forma $\chi = C/T$ unde C este o constantă pozitivă. Să se determine căldura schimbată de unitatea de volum a substanţei cu mediul extern când temperatura este menţinută la valoarea T_1 iar intensitatea câmpului magnetic creşte de la 0 la H_1. Variaţia volumului se va considera neglijabilă.

Soluţie

Se utilizează forma primului principiu al termodinamicii pentru substanţe magnetice (mărimile se consideră raportate la unitatea de volum)

$$du = \delta q - pdv + \mu_0 H dM$$

Cum $T =$ const, $v =$ const rezultă $du = 0$ astfel că:

$$\delta q = -\mu_0 H dM$$

Dar:

$$M = \chi H = \frac{CH}{T}$$

Atunci:

$$dM = \frac{CdH}{T}$$

Cum $T = T_1$ din relaţiile de mai sus rezultă:

$$\delta q = -\mu_0 \frac{CH}{T_1} dH$$

Se integrează şi se obţine:

$$q = -\int_0^{H_1} \mu_0 \frac{CH}{T_1} dH = -\frac{\mu_0 C}{2T_1} H_1^2$$

3.4.4 Pentru o substanţă s-a găsit că densitatea de magnetizare este funcţie de raportul H/T. Să se arate că energia internă a unităţii de volum este independentă de M şi să se determine expresia entropiei (se va neglija variaţia volumului).

Soluţie

Aplicând primul principiu al termodinamicii pentru substanţe magnetice:

$$du = Tds + \mu_0 HdM$$

rezultă:

$$ds = \frac{du - \mu_0 H dM}{T}$$

unde s, u se referă la entropia şi energia unităţii de volum.

Se consideră $u = u(T, M)$ şi se arată că

$$\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_T = 0$$

Într-adevăr:

$$du = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_M dT + \left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_T dM$$

Se obţine:

$$ds = \frac{1}{T}\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_M dT + \frac{1}{T}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_T - \mu_0 H\right] dM$$

Deoarece ds este o diferenţială totală exactă:

$$\frac{\partial}{\partial M}\left[\frac{1}{T}\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_M\right]_T = \frac{\partial}{\partial T}\left\{\frac{1}{T}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_T - \mu_0 H\right]\right\}_M$$

sau:

$$\frac{1}{T}\frac{\partial^2 u}{\partial M \partial T} = -\frac{1}{T^2}\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_T + \frac{1}{T}\frac{\partial^2 u}{\partial T \partial M} - \mu_0 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{H}{T}\right)_M$$

de unde:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_T = -\mu_0 T^2 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{H}{T}\right)_M$$

Cum $M = f\left(H/T\right)$ şi $M = \text{const}$ rezultă că $H/T = \text{const}$ şi:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial M}\right)_T = 0$$

Această relaţie arată că energia internă a unităţii de volum este independentă de magnetizare.

Deoarece:

$$dM = f'\left(\frac{H}{T}\right) d\left(\frac{H}{T}\right)$$

se obţine:

$$ds = \frac{du\left(T\right)}{T} - \mu_0 \frac{H}{T} f'\left(\frac{H}{T}\right) d\left(\frac{H}{T}\right)$$

Pentru $x = H/T$ se obţine:

$$s = \int \frac{du\left(T\right)}{T} - \mu_0 \int\limits_0^{H/T} x f'\left(x\right) dx$$

Integrând prin părţi cel de-al doilea termen obţinem:

$$s = \int \frac{du\left(T\right)}{T} - \mu_0 \frac{H}{T} f\left(\frac{H}{T}\right) + \mu_0 \int\limits_0^{H/T} f\left(x\right) dx$$

3.4.5 Să se calculeze aplicând statistica clasică, magnetizarea unei substanţe ai cărei atomi au momentul magnetic μ în câmpul magnetic B. Se cunoaşte n numărul de atomi din unitatea de volum. Să se arate că pentru câmpuri mici magnetizarea este invers proporţională cu temperatura.

Soluţie

În câmp magnetic momentele magnetice se aliniază aproximativ paralel cu acesta. Dacă θ este unghiul pe care un moment magnetic îl face cu direcţia lui B atunci magnetizarea este:

$$M = n\mu \langle \cos\theta \rangle$$

unde $\langle \cos\theta \rangle$ este valoarea medie a cosinusului unghiului făcut de $\vec{\mu}$ cu direcţia lui $\vec{B}$. Deoarece energia de interacţie a unui moment magnetic cu câmpul magnetic este:

$$U = -\vec{\mu}\vec{B} = -\mu B \cos\theta$$

Media $\langle \cos\theta \rangle$ este:

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{\int_0^\pi \cos\theta e^{\beta\mu B \cos\theta} \sin\theta d\theta}{\int_0^\pi e^{\beta\mu B \cos\theta} \sin\theta d\theta}$$

Pentru a efectua acest calcul facem schimbarea de variabilă:

$$s = \cos\theta \quad \text{şi} \quad ds = -\sin\theta d\theta$$

şi notăm cu

$$x = \beta\mu B = \frac{\mu B}{kT}$$

Atunci:

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{\int_{-1}^1 s e^{sx} ds}{\int_{-1}^1 e^{sx} dx} = \frac{d}{ds} \ln \int_{-1}^1 e^{sx} ds$$

$$\langle\cos\theta\rangle = \frac{d}{dx}\ln\frac{e^x - e^{-x}}{x}$$

$$\langle\cos\theta\rangle = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} - \frac{1}{x} = \mathrm{cth}x - \frac{1}{x}$$

Funcţia

$$L(x) = \mathrm{cth}x - \frac{1}{x}$$

poartă numele de funcţia lui Langevin.

Astfel magnetizarea se poate scrie ca:

$$M = n\mu L(x) = n\mu L\left(\frac{\mu B}{kT}\right)$$

În cazul câmpurilor magnetice mici

$$x = \frac{\mu B}{kT} \ll 1$$

astfel că energia de interacţie dintre momentul magnetic şi câmp este mult mai mică decât valoarea energiei de agitaţie termică. Atunci:

$$\frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \simeq \frac{1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + 1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6}}{1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} - 1 + x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6}}$$

$$\frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \simeq \frac{2 + x^2}{2x + \frac{x^3}{3}}$$

Astfel:

$$L(x) = \frac{2 + x^2}{2x + \frac{x^3}{3}} - \frac{1}{x} = \frac{x}{3 + \frac{x^2}{2}} \simeq \frac{x}{3}$$

Rezultă magnetizarea:

$$M = n\mu \frac{\mu B}{3kT} = \frac{n\mu^2 B}{3kT}$$

3.4.6 Se consideră un gaz în condiţii normale format din atomi în starea $^2\mathrm{D}_{3/2.}$ Să se determine magnetizarea şi valoarea de saturaţie a acesteia.

Soluţie

În acest caz tratarea problemei va fi una cuantică. Vom ţine cont de expresia momentului magnetic

$$\mu = g\mu_B \frac{J}{\hbar}$$

unde μ_B este magnetonul Bohr, J este momentul cinetic iar g este factorul Landeé

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S\,(S+1) - L\,(L+1)}{2J\,(J+1)}$$

În cazul atomilor consideraţi $S = 1/2$, $L = 2$ şi $J = 3/2$. Rezultă $g = \frac{4}{5}$

Energia de interacţie cu cîmpul magentic este:

$$U = -g\mu_B \frac{J_z}{\hbar} B$$

unde $J_z = m_j\hbar$ şi $m_j = -J, -J+1, ..., J$. Deoarece m_j ia valori discrete funcţia de partiţie pentru un singur atom este:

$$Z_0 = \sum_{m_j=-J}^{J} \exp\left(-\frac{g\mu_B B m_j}{kT}\right)$$

Astfel Z_0 este suma unei progresii geometrice

$$Z_0 = e^{-aJ} + e^{-a(J-1)} + ... + e^{a(J-1)} + e^{aJ}$$

cu raţia $\exp a$, unde:

$$a = \frac{g\mu_B B}{kT}$$

Atunci:

$$Z_0 = e^{-aJ}\frac{e^{a(2J+1)} - 1}{e^a - 1} = \frac{\mathrm{sh}\frac{(2J+1)a}{2}}{\mathrm{sh}\frac{a}{2}}$$

Funcţia de partiţie pentru întreg sistemul este:

$$Z = (Z_0)^n$$

unde n este numărul de atomi din unitatea de volum. Rezultă:

$$F = -nkT\left[\ln\left(\mathrm{sh}\frac{(2J+1)\,a}{2}\right) - \ln\left(\mathrm{sh}\frac{a}{2}\right)\right]$$

Magnetizarea este:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial B} = -\frac{\partial F}{\partial a}\frac{\partial a}{\partial B}$$

unde

$$\frac{\partial a}{\partial B} = \frac{g\mu_B}{kT}$$

Rezultă:

$$M = \frac{ng\mu_B}{2}\left[(2J+1)\,\mathrm{cth}\frac{(2J+1)\,a}{2} - \mathrm{cth}\frac{a}{2}\right]$$

$$M = ng\mu_B J\left[\frac{2J+1}{2J}\mathrm{cth}\frac{(2J+1)}{2J}aJ - \frac{1}{2J}\mathrm{cth}\frac{1}{2J}aJ\right]$$

Notăm cu

$$x = aJ = \frac{g\mu_B BJ}{kT}$$

Atunci:

$$\mathcal{B}\,(J) = \frac{2J+1}{2J}\mathrm{cth}\frac{(2J+1)}{2J}x - \frac{1}{2J}\mathrm{cth}\frac{x}{2J}$$

Această funcţie $\mathcal{B}\,(J)$ poartă numele de funcţia lui Brillouin.

Magnetizarea de saturaţie se obţine pentru câmpuri mari când $x \to \infty$. Atunci $\mathrm{cth}x \to 1$. Rezultă:

$$M = ng\mu_B B$$

3.4.7 Când o particulă cu spinul $\frac{1}{2}$ este plasată în câmpul magnetic B, nivelul energetic al acesteia se despică în două nivele μB şi $-\mu B$, unde μ este momentul magnetic al particulei respective.

Se presupune că un astfel de sistem care constă din N particule este menţinut într-un câmp magnetic B la temperatura T. Să se găsească energia internă, entropia şi capacitatea calorică a sistemului.

Soluţie

Funcţia de partiţie pentru o particulă este:

$$Z_i = e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B} = 2\mathrm{ch}\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)$$

Deoarece spinii particulelor sunt independenţi funcţia de partiţie a sistemului este egală cu puterea a N-a a funcţiei de partiţie pentru o singură particulă.

Atunci

$$Z = Z_i^N = 2^N\left[\mathrm{ch}\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)\right]^N$$

Energia liberă este:

$$F = -Nk_B T\ln\left[2\mathrm{ch}\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)\right]$$

iar entropia sistemului este:

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = Nk_B\ln\left[2\mathrm{ch}\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)\right] - \frac{\mu BN}{T}\mathrm{th}\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)$$

Energia internă a sistemului este:

$$U = F + TS = -N\mu B\mathrm{th}\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)$$

3.4.8 Să se calculeze susceptibilitatea diamagnetică a hidrogenului aflat în starea fundamentală caracterizată de funcţia de undă:

$$\Psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

unde a_0 este raza primei orbite Bohr.

Soluţie

Când este aplicat un câmp magnetic apare un câmp electric conform legii inducţei:

$$\oint_C \vec{E} dl = -\int_S \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} dS$$

Curba pe care se face integrala curbilinie este un cerc, E are aceeaşi valoare pe traiectroria circulară iar $\vec{B}$ nu depinde de coordonatele spaţiale. Atunci:

$$2\pi r E = -\frac{dB}{dt}\pi r^2$$

Rezultă:

$$E = -\frac{r}{2}\frac{dB}{dt}$$

Conform legii a II-a a lui Newton electronul de masă m_e este accelerat cu forţa $F = -eE$ şi:

$$m_e \frac{dv}{dt} = -eE = \frac{er}{2}\frac{dB}{dt}$$

Integrând pe intervalul de timp Δt în care câmpul magnetic creşte de la valoarea 0 la B se obţine:

$$\Delta v = \frac{er}{2m_e} B$$

Această variaţie a vitezei determină apariţia unui moment magnetic în sens opus lui B

$$\Delta\vec{\mu} = -\frac{er}{2}\Delta\vec{v} = -\frac{e^2r^2}{4m_e}\vec{B}$$

Datorită creşterii vitezei ar trebui să se modifice raza orbitei, însă acest lucru nu se petrece deoarece creşterea vitezei este foarte mică.

Totuşi planul orbitei nu este neapărat perpendicular pe vectorul $\vec{B}$. Atunci simultan cu mişcarea electronului pe orbită, apare o mişcare de precesie în jurul directei câmpului magnetic. Din acest motiv r^2 trebuie înlocuit cu $x^2 + y^2$. Atunci:

$$\Delta\mu = -\frac{e^2B}{4m_e}\left(x^2 + y^2\right)$$

Mediem această relaţie şi se obţine:

$$\langle\mu\rangle = -\frac{e^2B}{4m_e}\left(\left\langle x^2\right\rangle + \left\langle y^2\right\rangle\right)$$

Dar cum:

$$\left\langle x^2\right\rangle = \left\langle y^2\right\rangle = \left\langle z^2\right\rangle = \frac{\left\langle r^2\right\rangle}{3}$$

Rezultă:

$$\langle\mu\rangle = -\frac{e^2B}{6m_e}\left\langle r^2\right\rangle$$

Magnetizarea este:

$$M = n\langle\mu\rangle = -n\frac{e^2B}{6m_e}\left\langle r^2\right\rangle$$

Calculul mediei lui r^2 se face cu ajutorul funcţiei de undă a electronului din atomul de hidrogen:

$$\left\langle r^2 \right\rangle = \int \int \int \Psi^* (r) \, r^2 \Psi (r) \, dv$$

$$\left\langle r^2 \right\rangle = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} r^4 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) dr$$

Se ţine cont că:

$$\int_0^{\infty} r^k \exp(-\alpha r) \, dr = \frac{k!}{\alpha^{k-1}}$$

Atunci:

$$\int_0^{\infty} r^4 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) = \frac{3}{4} a_0^5$$

şi

$$\left\langle r^2 \right\rangle = 3a_0^2$$

Rezultă

$$M = n \langle \mu \rangle = -n \frac{e^2 B}{2m_e} a_o^2 = -n \frac{e^2 \mu_0 H}{2m_e} a_o^2 = \chi H$$

Rezultă că:

$$\chi = -\frac{n \mu_0 e^2}{2m_e} a_o^2$$

3.4.9 O substanţă diamagentică conţine n ioni pe unitatea de volum iar momentul magnetic al fiecărui ion este $\mu_{0.}$ Să se determine $n_1 - n_2$ dacă substanţa se introduce într-un câmp magnetic $\vec{B}$. (n_1 este numărul de momente magnetice orientate în sensul câmpului magnetic şi n_2 reprezintă numărul de momente magnetice orientate în sens contrar câmpului magnetic).

Soluţie

Energia de interacţei dintre câmpul magnetic şi momentele magnetice este $\pm\mu_0 B$. Atunci raportul n_1/n_2 se scrie:

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\exp\left[-\left(E-\mu_0 B\right)/kT\right]}{\exp\left[-\left(E+\mu_0 B\right)/kT\right]} = \exp\frac{2\mu_0 B}{kT}$$

În plus

$$n_1 + n_2 = N$$

Atunci:

$$n_1 = \frac{N}{1+\exp\left(-\frac{2\mu_0 B}{kT}\right)}$$

şi

$$n_2 = \frac{N}{1+\exp\left(\frac{2\mu_0 B}{kT}\right)}$$

Rezultă:

$$n_1 - n_2 = N\frac{\exp\left(\frac{2\mu_0 B}{kT}\right)-1}{\exp\left(\frac{2\mu_0 B}{kT}\right)+1}$$

3.4.10 Să se calculeze magnetizarea paramagnetică pentru gazul electronilor liberi de conducţie la 0 K în cazul unor câmpuri magnetice slabe.

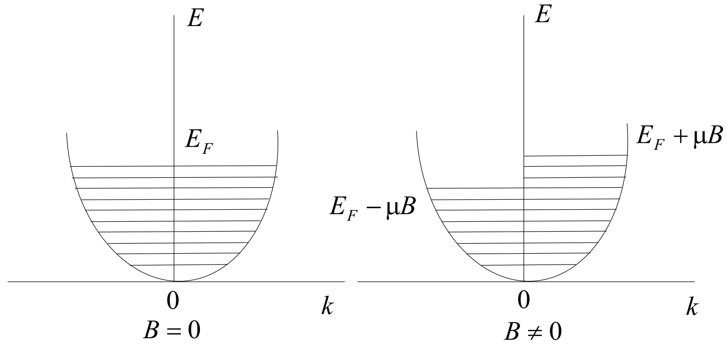

Fig. 3.2

Soluţie

În prezenţa câmpului magnetic energia electronului devine:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \mu B$$

unde cu m s-a notat masa efectivă a electronului şi cu μ momentul magnetic al electronului. Notăm cu n_1 concentraţia de electroni cu spinul orientat în sensul câmpului şi cu n_2 concentraţia de electroni cu spinul orientat în sens contrar (Fig. 3.2).

Atunci:

$$\frac{\hbar^2 k_{F_1}^2}{2m} = E_F - \mu B$$

$$\frac{\hbar^2 k_{F_2}^2}{2m} = E_F + \mu B$$

Astfel:

$$n_1 = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{k_{F_1}} k^2 dk = \frac{k_{F_1}^3}{6\pi^2}$$

$$n_2 = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{k_{F_2}} k^2 dk = \frac{k_{F_2}^3}{6\pi^2}$$

Magnetizarea este:

$$M = \mu_B\left(n_1 - n_2\right) = \frac{\mu_B}{6\pi^2}\left(k_{F_1}^3 - k_{F_2}^3\right)$$

$$M = \frac{\mu}{6\pi^{3/2}}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2\left[\left(E_F + B\mu\right)^{3/2} - \left(E_F - B\mu\right)^{3/2}\right]$$

Pentru câmpuri mici:

$$\left(E_F \pm B\mu\right)^{3/2} = E_F^{3/2}\left(1 \pm \frac{3}{2}\frac{\mu B}{E_F}\right)$$

În acest caz magnetizarea devine:

$$M = \frac{\mu^2}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} E_F^{1/2} B$$

Capitolul 4

FIZICĂ NUCLEARĂ

4.1 Structura nucleului

4.1.1 Să se calculeze raza nucleului $^{64}_{29}$Cu. Se cunoaşte $R_o = 1,45 \times 10^{-15}$ m.

Soluţie

$$R = R_o \sqrt[3]{A} = 1,45 \times 10^{-15} \sqrt[3]{64} = 5,8 \times 10^{-15} \text{ m}$$

4.1.2 Să se evalueze densitatea materiei nucleare ştiind că raza nucleului se calculează cu formula $R = R_o A^{1/3}$ cu $R_o = 1,45 \times 10^{-15}$ m.

Soluţie

Masa unui nucleu cu numărul de masă A este:

$$M = Au \qquad u = 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

unde u este unitatea atomică de masă. Volumul nucleului este:

$$V = \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{4\pi R_o^3}{3} A$$

Atunci densitatea materiei nucleare va fi:

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{3}{4\pi} \frac{u}{R_o^3} \simeq 1,3 \times 10^8 \text{ t/cm}^3$$

4.1.3 Să se determine densitatea nucleară ρ cunoscând că raza nucleului este $R = R_0 A^{1/3}$ $(R_0 = 1,45 \times 10^{-15} \text{ m})$, energia medie de legătură a unui nucleon este $B = 8,5$ MeV iar masa medie a nucleonului exprimată în unităţi de energie este $mc^2 = 938,9$ MeV. Se cunoaşte $c = 3 \times 10^8$ m/s.

Soluţie

Energia de legătură totală este:

$$BA = A\left(mc^2\right) - Mc^2$$

unde M este masa totală a nucleului. Rezultă:

$$M = \frac{A\left(B - mc^2\right)}{c^2}$$

Volumul nuclear este:

$$V = \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{4\pi r_0^3 A}{3}$$

Densitatea nucleară este:

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{3\,(B - mc^2)}{4\pi r_0^3 c^2} = 1,3 \times 10^{17}\ \mathrm{kg/m^3}$$

4.1.4 Cu cât diferă raza nucleului rezultat prin fuziunea a două nuclee de ${}^{8}_{4}\mathrm{Be}$ faţă de raza nucleului de beriliu. Se cunoaşte $R_o = 1,45 \times 10^{-15}$ m.

Soluţie

Raza nucleului de Beriliu este:

$$R_1 = R_o \sqrt[3]{8} = 2R_o$$

Raza nucleului obţinut prin fuziune va fi:

$$R_2 = R_o \sqrt[3]{16} = 2\sqrt[3]{2} R_o$$

Atunci rezultă:

$$R_2 - R_1 = (2\sqrt[3]{2} - 2)R_o = 7,54 \times 10^{-16}\ \mathrm{m}$$

4.1.5 Să se calculeze energia necesară pentru a descompune un nucleu de ${}^{20}_{10}\mathrm{Ne}$ în două particule α şi un nucleu de ${}^{12}_{6}\mathrm{C}$ cunoscând energia de legătură pe nucleon $B_{Ne} = 8,03$ MeV/nucleon, $B_\alpha = 7,07$ MeV/nucleon şi $B_C = 7,68$ MeV/nucleon.

Soluţie

Energia de reacţie este:

$$Q = [M_{Ne} - 2M_\alpha - M_C]c^2$$

Doarece energia de legătură are expresia:

$$W = AB = [Zm_p + (A - Z)m_n - M]c^2$$

unde m_p este masa protonului, atunci:

$$M = Zm_p + (A - Z)m_n - \frac{AB}{c^2}$$

Dar:

$$\begin{aligned} M_{Ne} &= 10m_p + 10m_n - \frac{20B_{Ne}}{c^2} \\ M_\alpha &= 2m_p + 2m_n - \frac{4B_\alpha}{c^2} \\ M_C &= 6m_p + 6m_n - \frac{12B_C}{c^2} \end{aligned}$$

Atunci:

$$Q = (8B_\alpha + 12B_C - 20B_{Ne}) = -11,88 \text{ MeV}$$

iar energia necesară pentru descompunere va avea valoarea:

$$|Q| = 11,88 \text{ MeV}$$

4.1.6 Să se calculeze energia medie de legătură pe nucleon în nucleul de ${}^{16}_{8}O$. Se dau: masa atomului de ${}^{16}_{8}O$, $M_O = 15,99491$u, masa neutronului $m_n = 1,00867$u şi $M_H = 1,00783$u, unde u este unitatea atomică de masă.

Soluţie

Energia de legătură este:

$$W = [ZM_H + (A - Z)m_n - M_O]c^2$$

Energia de legătură pe nucleon va fi:

$$B = \frac{W}{A}$$

Pentru calculul numeric se ţine cont că:

$$uc^2 = 931,5 \text{ MeV}$$

Rezultă:

$$B = 7,98 \text{ MeV/nucleon}$$

4.1.7 Să se determine aproximativ, energia medie pe nucleon (în MeV) pentru nucleele în care numărul de neutroni este egal cu numărul de protoni $N = Z$. Se cunosc $M_H = 1,00783$u şi $m_n = 1,00867$u.

Soluţie

Energia de legătură va fi:

$$W = [ZM_H + (A - Z)m_n - M(A, Z)]c^2$$

Considerăm aproximativ că:

$$M(A, Z) \simeq Au = 2Zu$$

Atunci:

$$W = [Z(M_H + m_n) - 2Zu]c^2$$

iar energia de legătură pe nucleon este:

$$B = \frac{W}{A} = \frac{W}{2Z} = \frac{M_H + m_n - 2u}{2}c^2 = 7,68 \text{ MeV}$$

4.1.8 Să se calculeze energia de legătură a particulei α în nucleul de ${}_{5}^{11}\text{B}$. Se dau: $M_\alpha = 4,002\text{u}$, $M_{Li} = 7,01601\text{u}$ şi $M_B = 11,0093\text{u}$.

Soluţie

Nucleul care corespunde lui $A = 11 - 4 = 7$ şi $Z = 5 - 2 = 3$ este nucleul de Litiu ${}_{3}^{7}\text{Li}$.

$$W = [M_\alpha + M_{Li} - M_B]c^2 = 8,11 \text{ MeV}$$

4.1.9 Dacă energia de interacţie internucleonică este independentă de sarcină, nucleele oglindă ${}^{35}_{18}\mathrm{Ar}$ şi ${}^{35}_{17}\mathrm{Cl}$ pot fi considerate ca având aceeaşi structură nucleară. Diferenţa de energie $\Delta W = 5,97$ MeV între stările lor fundamentale poate fi atribuită diferenţei dintre energia potenţială electrostatică şi diferenţei dintre energiile de repaus ale protonului şi neutronului. Presupunând că nucleele sunt sfere încărcate uniform, să se determine raza lor. Se cunosc $m_n = 1,008665$ şi $m_p = 1,007276$u

Soluţie

Vom calcula energia potenţială a unei sfere de rază R încărcată cu sarcina Q.
Lucrul mecanic necesar pentru a încărca un strat de grosime dr cu sarcina dq este:

$$dL = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o r} dq$$

unde q este sarcina din sfera de rază r. Considerând ρ densitatea de sarcină, presupusă uniformă în tot nucleul:

$$q = \rho \frac{4\pi r^3}{3}$$

şi

$$dq = 4\pi r^2 \rho dr$$

Atunci:

$$dL = \frac{4\pi}{3\varepsilon_0} \rho^2 r^4 dr$$

Calculul lucrului mecanic pentru a încărca o sferă de rază R cu o sarcină uniform distribuită este:

$$L = \frac{4\pi}{3\varepsilon_o}\rho^2 \int_0^R r^4 dr = \frac{4\pi\rho^2}{3\varepsilon_o}\frac{R^5}{5}$$

Deoarece energia electrostatică W_e este:

$$W_e = L$$

şi

$$Q = \frac{4\pi R^3}{3}\rho$$

rezultă:

$$W_e = \frac{3Q^2}{20\pi\varepsilon_o R} \quad \text{dar} \quad Q = Ze$$

Atunci:

$$W_e = \frac{3Z^2e^2}{20\pi\varepsilon_o R}$$

Rezultă:

$$\Delta W_e = W_{Ar} - W_{Cl} = \frac{3(Z_{Ar}^2 - Z_{Cl}^2)e^2}{20\pi\varepsilon_o R}$$

Diferenţa de energie datorată diferenţei de masă dintre proton şi neutron este:

$$\begin{aligned} \Delta W_m &= (m_p - m_n)c^2 = (938,272 - 939,566) \text{ MeV} \\ &= -1,29 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Dar:

$$\Delta W = \Delta W_e + \Delta W_m$$

Rezultă:

$$R = \frac{3(Z_A^2 - Z_{Cl}^2)e^2}{20\pi\varepsilon_0(\Delta W - \Delta W_m)} = 4,2 \times 10^{-15} \text{ m}$$

4.1.10 La bombardarea unei ţinte subţiri de ^{208}Pb, cu densitatea de supeficială $\rho_d = 20$ mg/cm^2, cu neutroni rapizi a căror lungime de undă este mult mai mică decât raza nucleului, se observă o difuzie elastică izotropă a unei fracţiuni $f = 1,45 \times 10^{-4}$. Să se calculeze raza nucleului.

Soluţie

Raportul dintre numărul de particule difuzate şi numărul de particule din flux este egal cu raportul dintre aria ocupată de nuclee şi aria totală.

Numărul de nuclee corespunzătoare unităţii de suprafaţă (1 cm^2) este:

$$N = \frac{\rho_d}{\mu} N_A$$

unde $\mu = 208$ g/mol iar N_A este numărul lui Avogadro. Aria ocupată de aceste nuclee este:

$$S = \pi R^2 N$$

şi $f = S/S_o$ unde $S_o = 1$cm^2. Astfel:

$$f = \pi R^2(\rho_d/\mu)N_A$$

Rezultă:

$$R = \sqrt{\frac{f\mu}{\pi\rho_d N_A}} = 8,9 \times 10^{-15} \text{ m}$$

4.1.11 Un fascicul de neutroni cade pe o folie de bor (densitatea borului este $\rho = 2,5 \times 10^3$ kg/m^3, masă molară $\mu_B = 10,8$) şi $f = 95\%$ din ei sunt absorbiţi. Dacă secţiunea eficace de absorbţie este $\sigma = 4000$ b (1b=1 barn = 10^{-28}m^2), să se calculeze grosimea l a foliei.

Soluţie

Numărul de atomi de bor dintr-o placă de suprafaţă S şi grosime l este:

$$N = \frac{lS\rho}{\mu_B} N_A$$

Suprafaţa totală de absorbţie este:

$$S_a = \frac{lS\rho N_A}{\mu_B}\sigma$$

Dar

$$f = \frac{S_a}{S} = \frac{l\rho N_A \sigma}{\mu_B}$$

Atunci:

$$l = \frac{f\mu_B}{\rho N_A \sigma} = 17 \ \mu\text{m}$$

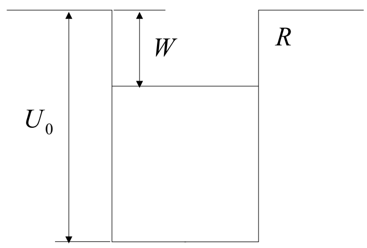

Fig. 4.1

4.1.12 Energia potenţială de interacţie a nucleonilor în deuteron are forma unei gropi de potenţial dreptunghiulară cu lărgimea R şi adâncimea U_o.
a. să se determine funcţia de undă $\psi(r)$ a stării fundamentale
b. să se determine valoarea lui U_o ştiind că $R = 2,82$ fm şi $W = 2,23$ MeV (vezi Fig. 4.1).

Soluţie

a. Ecuaţia lui Schrödinger se va scrie:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle\psi - U\psi = -W\psi$$

unde μ este masa redusă:

$$\mu = \frac{m_n m_p}{m_p + m_n} \simeq \frac{m_p}{2}$$

Vom scrie această ecuaţie în coordonate sferice şi ţinem seama că în starea fundamentală ψ nu depinde de θ şi φ:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) - U\psi = -W\psi$$

În plus:

$$U = \begin{cases} U_o & r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Vom face substituţia:

$$\psi = \frac{u}{r}$$

Pentru cazul când $r \leq R$, ecuaţia Schrödinger devine:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(U_o - W)u = 0$$

Notăm cu:

$$k_1^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(U_o - W)$$

Soluţia ecuaţiei va avea forma:

$$u_1 = A\sin k_1 r + C\cos k_1 r$$

şi

$$\psi_1 = A\frac{\sin k_1 r}{r} + C\frac{\cos k_1 r}{r}$$

Deoarece când $r \to 0$, $\sin(k_1 r)/r \to k_1$ şi $\cos(k_1 r)/r \to \infty$ este necesar să considerăm $C = 0$. Atunci:

$$\psi_1 = \frac{A\sin k_1 r}{r}$$

În cazul când $r > R$ ecuaţia Schrödinger devine:

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}Wu = 0$$

Notând cu:

$$k_2^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}W$$

soluţia ecuaţiei devine:

$$u_2 = De^{-k_2 r} + Fe^{k_2 r}$$

Deoarece $e^{k_2 r} \to \infty$ atunci când $r \to \infty$ este necesar ca $F = 0$. Atunci:

$$u_2 = De^{-k_2 r}$$

şi

$$\psi_2 = D\frac{e^{-k_2 r}}{r}$$

b. Impunem condiţiile de continuitate pentru u şi du/dr în punctul $r = R$:

$$\begin{aligned} u_1(R) &= u_2(R) \\ \left.\frac{du_1}{dr}\right|_{r=R} &= \left.\frac{du_2}{dr}\right|_{r=R} \end{aligned}$$

Rezultă:

$$\begin{aligned} A\sin k_1 R &= De^{-k_2 R} \\ k_1 A\cos k_1 R &= -k_2 De^{-k_2 R} \end{aligned}$$

Prin împărţirea celor două relaţii rezultă:

$$\operatorname{tg} k_1 R = -\frac{k_1 \hbar}{\sqrt{2\mu W}}$$

Se consideră $\alpha = k_1 R$ şi

$$\operatorname{tg} \alpha \quad = \quad -\frac{\alpha \hbar}{R\sqrt{\mu W}}$$

Rezultă:

$$\alpha \quad \simeq \quad 1,9$$

Atunci:

$$1,9 \quad = R\sqrt{\tfrac{2\mu}{\hbar^2}(U_o - W)}$$

Rezultă:

$$U_o \quad = \quad 21 \text{ MeV}$$

4.1.13 Plecând de la modelul de deuteron din problema precedentă, să se determine distanţa cea mai probabilă dintre neutron şi proton în starea fundamentală.

Soluţie

Probabilitatea ca o particulă să se afle la o distanţă cuprinsă în intervalul $(r,\ r + dr)$ este:

a. cazul $r < R$

$$dW_1(r) = 4\pi r^2 \psi(r) dr = 4\pi A^2 \sin^2(k_1 r) dr$$

b. cazul $r > R$

$$dW_2(r) = 4\pi D^2 e^{-2k_2 r} dr$$

Densităţile de probabilitate în cele două regiuni sunt:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{dW_1}{dr} = 4\pi A^2 \sin^2 k_1 r \qquad r < R \\ \rho_2 &= \frac{dW_2}{dr} = 4\pi D^2 e^{-2k_2 r} \qquad r \geq R \end{aligned}$$

Impunem condiţia $d\rho/dr = 0$. Se observă că numai în cazul $r < R$, derivata densităţii de probabilitate se poate anula. Din anularea ei rezultă:

$$\cos k_1 r \sin k_1 r = 0 \quad \Rightarrow \quad k_1 r = \pi/2$$

adică:

$$r\sqrt{\frac{2\mu(U_o - W)}{\hbar^2}} = \pi/2$$

Rezultă:

$$r = \frac{\pi\hbar}{2\sqrt{2\mu(U_o - W)}} = 2,33 \text{ fm}$$

4.1.14 Dacă hamiltonianul interacţiei spin-orbită pentru un nucleon este:

$$V_{s-o} = \frac{2\lambda}{\hbar^2}\vec{L}\vec{S}$$

unde λ este o constantă, $\vec{L}$ este momentul cinetic orbital, $\vec{S}$ este momentul cinetic de spin ($s = 1/2$), să se determine diferenţa de energie dintre stările ce corespund lui $j = \pm 1/2$.

Soluţie

Momentul cinetic total al nucleonului este:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Ridicăm la pătrat relaţia anterioară şi va rezulta:

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}$$

Astfel:

$$\vec{L}\vec{S} = \frac{\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2}{2}$$

Deoarece valorile proprii ale lui $\vec{J}^2$ sunt $j(j+1)\hbar^2$, ale lui $\vec{L}^2$ sunt $l(l+1)\hbar^2$ şi ale lui $\vec{S}^2$ sunt $1/2(1/2+1)\hbar^2$, atunci valorile proprii ale operatorului $\vec{L}\vec{S}$ sunt:

$$\frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - 1/2(1/2+1)]$$

Energiile celor două stări vor fi:

$$\begin{aligned} E_1 &= \lambda[(l+1/2)(l+3/2) - l(l+1) - 3/4] \qquad j = l + 1/2 \\ E_2 &= \lambda[(l-1/2)(l+1/2) - l(l+1) - 3/4] \qquad j = l - 1/2 \end{aligned}$$

iar diferenţa de energie cerută va avea expresia:

$$\Delta E = E_1 - E_2 = \frac{\lambda(2l+1)}{2}$$

4.1.15 Să se obţină expresia care determină factorul giromagnetic al nucleonului cu ajutorul lui g_s şi g_l, factorii giromagnetici de spin şi orbital. Se pleacă de la relaţia:

$$\vec{\mu} = g_s\vec{s} + g_l\vec{L}$$

unde $\vec{\mu}$, momentul magnetic total al nucleonului este exprimat în magnetoni nucleari.

Soluţie

Notăm cu $\vec{J} = \vec{L} + \vec{s}$ momentul cinetic total, şi:

$$\vec{\mu} = g\vec{J}$$

unde g este factorul căutat. Astfel putem scrie:

$$g\vec{J} = g_s\vec{s} + g_l\vec{L}$$

Multilicând relaţia cu $\vec{J}$ obţinem:

$$g\vec{J}^2 = g_s\vec{s}\vec{J} + g_l\vec{L}\vec{J}$$

Deoarece:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{s}$$

avem:

$$\vec{s} = \vec{J} - \vec{L}$$

$$\vec{L} = \vec{J} - \vec{s}$$

Atunci:

$$\vec{L}\vec{J} = \frac{\vec{J}^2 + \vec{L}^2 - \vec{s}^2}{2}$$

şi

$$\vec{s}\vec{J} = \frac{\vec{J}^2 + \vec{s}^2 - \vec{L}^2}{2}$$

Rezultă:

$$g\vec{J}^2 = \frac{1}{2}\left[g_l\left(\vec{J}^2 + \vec{L}^2 - \vec{s}^2\right) + g_s\left(\vec{J}^2 + \vec{s}^2 - \vec{L}^2\right)\right]$$

Relaţia anterioară este o relaţie între operatori. Înlocuind cu valorile proprii ale acestora se obţine:

$$\vec{J}^2 \quad \rightarrow \quad j\,(j+1)\,\hbar^2$$

$$\vec{L}^2 \quad \rightarrow \quad l\,(l+1)\,\hbar^2$$

$$\vec{s}^2 \quad \rightarrow \quad s\,(s+1)\,\hbar^2$$

În relaţiile de mai sus j este numărul cuantic al momentului cinetic total, l este numărul cuantic al momentului cinetic orbital şi $\vec{s}$ numărul cuantic de spin. Atunci

$$g = \frac{1}{2}\left[g_l + g_s + (g_l - g_s)\,\frac{l\,(l+1) - s\,(s+1)}{j\,(j+1)}\right]$$

4.1.16 Să se deducă expresia momentului magnetic al protonului dacă factorii giromagnetici pentru proton sunt $g_s = 5,58$ şi $g_l = 1$. Să se deducă şi expresia momentului magnetic al neutronului dacă se cunosc factorii giromagnetici $g_s = -3,82$ şi $g_l = 0$. Să se particularizeze pentru stările $s_{1/2}$, $p_{1/2}$ şi $p_{3/2}$.

Soluţie

Pentru protoni în cazul $j = l + 1/2$, $l = j - 1/2$, avem:

$$g_p = \frac{1}{2}\left[g_l + g_s + (g_l - g_s)\,\frac{(j - 1/2)\,(j + 1/2) - 3/4}{j\,(j+1)}\right]$$

$$\mu_p = j\left[g_l - \frac{1}{2}\frac{(g_l - g_s)}{j}\right] = j\left[1 + \frac{2,29}{j}\right]$$

Pentru protoni în cazul $j = l - 1/2$, $l = j + 1/2$, avem:

$$g_p = \frac{1}{2}\left[g_l + g_s + (g_l - g_s)\,\frac{(j + 3/4)\,(j + 1/2) - 3/4}{j\,(j+1)}\right]$$

$$\mu_p = j\left[g_l + \frac{1}{2}\frac{(g_l - g_s)}{j+1}\right] = j\left[1 - \frac{2,29}{j+1}\right]$$

Pentru neutroni vom folosi tot relaţiile de mai sus. Astfel pentru $j = l - 1/2$

$$\mu_n = jg_n = j\frac{1,91}{j+1}$$

Pentru $j = l + 1/2$

$$\mu_n = -1,91$$

Starea $s_{1/2}$ este caracterizată de $l = 0$ şi $j = 1/2$

$$\mu_p = \frac{1}{2}\left[1 + 2 \times 2,29\right] = 2,79$$

$$\mu_n = -1,91$$

Starea $p_{1/2}$ este caracterizată de $l = 1$ şi $s = 1/2$; $j = 1 - 1/2$

$$\mu_p = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{2,29 \times 2}{3}\right] = -0,26$$

$$\mu_n = \frac{1,91}{1+1/2} = 0,64$$

Statea $p_{3/2}$ este caracterizată de $l = 1$ şi $s = 1/2$; $j = 1 + 1/2$

$$\mu_p = \frac{3}{2}\left[1 + \frac{2,29 \times 2}{3}\right] = 3,79$$

$$\mu_n = -1,91$$

4.1.17 Să se determine valoarea inducţiei magnetice la care apare absorbţia de rezonanţă a fotonilor de frecvenţă ν în cazul unui sistem de nuclee al căror moment cinetic total (spin) este j când se află într-un câmp magnetic local.

Soluţie

Energia de interacţie dintre momentul magnetic $\vec{\mu}$ al nucleului şi câmpul magnetic este:

$$W = -\vec{\mu}\vec{B} = -\mu_z B$$

Dar:

$$\mu_z = m\mu_N g_j$$

unde μ_N este magnetonul nuclear. Astfel

$$W_m = -m\mu_N B g_j$$

$$W_{m+1} = -\left(m+1\right)\mu_N B g_j$$

Absorbţia de rezonanţă apare atunci când:

$$W_m - W_{m+1} = h\nu$$

Deoarece regula de selecţie este $\Delta m = \pm 1$, rezultă

$$\mu_N B g_j = h\nu$$

şi

$$\nu = \frac{\mu_N B g_J}{h}$$

4.1.18 Folosind principiul lui Pauli să se determine momentele magnetice ale nucleelor ^{3}H şi ^{3}He ai căror nucleoni se află în starea $s\,(l=0)$. Se consideră cunoscute momentele magnetice ale protonului şi neutronului.

Soluţie

În starea s a nucleului de ^{3}H spinii neutronilor sunt opuşi (conform principiului lui Pauli); astfel momentul magnetic este determinat numai de momentul magnetic al protonului
($\mu_p = 2,79\mu_N$). Experimental s-a găsit $\mu_p = 2,98\mu_N$.

În starea s a nucleului de ^{3}He rămâne necompensat numai momentul magnetic al neutronului ($\mu_n = -1,91\mu_N$). Experimental s-a găsit ($\mu_n = -2,12\mu_N$).

4.2 Reacţii nucleare

4.2.1 Să se calculeze energia care se degajă per nucleon în reacţia termonucleară:

$$^6_3\mathrm{Li} +^2_1 \mathrm{D} \rightarrow 2^4_2\mathrm{He}$$

Se dau: $M_{Li} = 6,01513$u, $M_D = 2,0141$u şi $M_{He} = 4,0026$u.

Soluţie

Energia de reacţie degajată este:

$$Q = (M_{Li} + M_D - 2M_{He})c^2 = 22,38 \text{ MeV}$$

iar energia degajată per nucleon va fi:

$$W_1 = \frac{Q}{8} = 2,79 \text{ MeV/nucleon}$$

4.2.2 Reacţiile nucleare din Soare pot fi studiate cu ajutorul fluxului de neutrini prin intermediul reacţiei:

$$\nu \; + \; ^{37}_{17}\mathrm{Cl} \; \rightarrow \; \mathrm{e}^- \; + \; ^{37}_{18}\mathrm{Ar}$$

Secţiunea eficace de reacţie este $\sigma = 1,3 \times 10^{-42}$ cm^2. Presupunând că Soarele emite pe Pământ $N = 3 \times 10^{33}$ neutrini/ secundă, să se determine cantitatea de CCl_4 necesară pentru a produce n=100 de atomi de $^{37}_{18}$Ar pe an. Izotopul $^{37}_{17}$Cl reprezintă $f = 25\%$ din amestecul natural de izotopi de Cl. Raza orbitei Pământului este $R = 1,5 \times 10^8$km

Soluţie

Fluxul de neutrini ce cade pe Pământ este:

$$\Phi = \frac{N}{4\pi R^2}$$

Atunci numărul de atomi de $^{37}_{18}$Ar produşi în timpul $t = 1$ an = 3,2×10^7 s este:

$$n = \Phi \sigma t N_{Cl}$$

Rezultă:

$$N_{Cl} = \frac{4\pi R^2 n}{N\sigma t}$$

Numărul total de atomi de clor necesari este:

$$N_1 = \frac{N_{Cl}}{f} = \frac{4\pi R^2 n}{fN\sigma t}$$

Numărul de molecule de CCl_4 este

$$N_2 = \frac{N}{4}$$

Atunci masa de tetraclorură ce carbon este:

$$M = \frac{N_2}{N_A}\mu = \frac{\pi R^2 n}{fN\sigma t}\frac{\mu}{N_A} = 610 \text{ tone}$$

4.2.3 Ce cantitate de căldură se degajă la formarea unui gram de ${}^4_2$He din ${}^2_1$D? Se cunosc: $M_{He} = 4,0026$ u, $M_D = 2,0141$ u.

Soluţie

Căldura de reacţie este:

$$Q = (2M_D - M_{He})c^2 = 23,8 \text{ MeV}$$

Numărul de nuclee dintr-un gram de He şi numărul de reacţii nucleare este:

$$N = \frac{M_{He}}{\mu_{He}}N_A$$

Atunci, energia degajată de reacţie va fi:

$$W = \frac{M_{He}}{\mu_{He}}N_A Q = 57,3 \times 10^{10} \text{ J}$$

4.2.4 Să se calculeze energia cinetică de prag a unei particule α pentru reacţia nucleară ${}^{7}_{3}\mathrm{Li}(\alpha, n){}^{10}_{5}\mathrm{B}$. Se dau: $M_{Li} = 7,01601$ u, $M_\alpha = 4,0026$u, $M_B = 10,01294$u, $m_n = 1,00867$u, unde u este unitatea atomică de masă.

Soluţie

Energia de reacţie este:

$$Q = (M_\alpha + M_{Li} - M_B - m_n)c^2 = -2,7945 \text{ MeV}$$

iar energia cinetică de prag pentru ca particula α să determine reacţia nucleară este:

$$E = |Q|\frac{M_\alpha + M_{Li}}{M_{Li}} = 4,39 \text{ MeV}$$

4.2.5 În reacţia

$${}^{2}_{1}\mathrm{D} + {}^{6}_{3}\mathrm{Li} \rightarrow 2\alpha$$

se eliberează energia $Q = 22,37$ MeV. Cunoscând masele $M_\alpha = 4,0026$u, $M_D = 2,0141$u să se calculeze masa nucleului de Li.

Soluţie

Energia de reacţie este:

$$Q = [M_{Li} + M_D - 2M_\alpha]c^2 \rightarrow M_{Li} = \frac{Q}{c^2} + 2M_\alpha - M_D$$

Pentru exprimarea raportului Q/c^2 în unităţi de masă u se ţine cont că, dacă Q este exprimat în MeV, atunci:

$$\frac{Q}{c^2} = \frac{Q}{931,5}\text{ u} = 0,0240\text{u}$$

Rezultă masa litilui:

$$M_{Li} = 6,0151 \text{ u}$$

4.2.6 Să se calculeze energia necesară descompunerii izotopului de ${}^{12}_{6}\text{C}$ în trei particule α. Se cunosc: $M_{He} = 4,0026\text{u}$, $M_C = 12\text{u}$.

Soluţie

Energia va avea expresia:

$$W = [3M_\alpha - M_C]c^2 = 7,265 \text{ MeV}$$

4.2.7 Să se determine energia de prag pentru reacţia:

$$A + a = B + b$$

dacă se cunosc energia de reacţie Q şi că iniţial nucleul A era în repaus.

Soluţie

Energia de reacţie este diferenţa dintre energia de repaus a particulelor iniţiale şi energia de repaus în starea finală:

$$Q = [(m_a + M_A) - (m_b + M_B)]c^2$$

Considerând E_a energia cinetică a particulei a, E_b şi E_B energiile cinetice ale particulelor b şi B ce rezultă din reacţie, conservarea energiei se va scrie:

$$m_a c^2 + M_A c^2 + E_a = M_B c^2 + E_B + m_b c^2 + E_b$$

Atunci, din cele două ecuaţii rezultă:

$$Q = E_B + E_b - E_a$$

Dacă $Q < 0$, legea conservării energiei cere ca, în sistemul laboratorului, energia cinetică a particulei a să fie mai mare decât $|Q|$ deoarece conservarea impulsului interzice ca produşii de reacţie în starea finală să fie în repaus.
Vom studia această reacţie în sistemul centrului de masă. Conform legii de conservare a impulsului:

$$m_a v_a + M_A v_A = 0 \rightarrow v_A = -\frac{m_a}{M_A} v_a$$

În sistemul centrului de masă energia cinetică a celor două particule este:

$$E = \frac{1}{2} m_a v_a^2 + \frac{1}{2} M_A v_A^2 = \frac{1}{2} m_a v_a^2 \left(1 + \frac{m_a}{M_A}\right)$$

În sistemul laboratorului, nucleul ţintă A este în repaus şi doar particula a se mişcă. Energia cinetică E_a este:

$$E_a = \frac{1}{2} m_a v_a'^2$$

unde v_a' este viteza relativă a particulei a faţă de nucleul A:

$$v_a' = v_a - v_A = v_a \left(1 + \frac{m_a}{M_A}\right)$$

ceea ce conduce la expresia energiei cinetice E_a:

$$E_a = E\left(1 + \frac{m_a}{M_A}\right)$$

Pentru ca reacţia să se producă, în sistemul centrului de masă trebuie ca $E > |Q|$. În acest sistem particulele care se obţin pot fi în repaus dacă impulsul iniţial este nul. Rezultă:

$$E_a > |Q|\left(1 + \frac{m_a}{M_A}\right)$$

Cantitatea $|Q|\left(1 + m_a/M_A\right)$ reprezintă energia de prag pentru care are loc reacţia nucleară considerată.

4.2.8 Nucleul ${}^{32}_{15}\mathrm{P}$ suferă o dezintegrare β^- care conduce la nucleul de sulf în stare fundamentală.

$${}^{32}_{15}\mathrm{P} \to e^- + \tilde{\nu} + {}^{32}_{16}\mathrm{S}$$

Să se determine energia maximă a atomilor de sulf. Se cunosc: $M_P = 31,973908\mathrm{u}$, $M_S = 31,972074\mathrm{u}$, $m_e = 0,00054\mathrm{u}$.

Soluţie

Energia de reacţie este:

$$Q = [M_P - M_S - m_e]c^2 = 1,20 \text{ MeV}$$

În cazul în care electronul are energia maximă, energia neutrinului se neglijează. Conservarea impulsului în această reacţie se scrie:

$$p_e = p_S$$

Energia de reacţie se distribuie electronului şi atomului de sulf:

$$\begin{aligned} Q &= E_e + E_S = \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_S^2}{2M_S} \\ &= p_S^2 \frac{(m_e + M_S)}{2m_e M_S} \end{aligned}$$

Atunci:

$$p_S^2 = \frac{2m_e M_S Q}{(m_e + M_S)}$$

Astfel energia cinetică maximă a atomilor de sulf va fi:

$$E_e = \frac{p_S^2}{2m_e} = \frac{Qm_e}{M_S + m_e} = 20 \text{ eV}$$

4.2.9 Să se determine energia cinetică a particulelor α emise în procesul:

$${}^{232}_{92}\mathrm{U} \rightarrow {}^{228}_{90}\mathrm{Th} + \alpha$$

Se cunosc: $M_U = 232,1095$u, $M_{Th} = 228,0998$u, $M_\alpha = 4,0039$u.

Soluţie

Energia de reacţie este:

$$Q = [M_U - M_{Th} - M_\alpha]c^2$$

Suma energiilor cinetice ale particulelor α şi Th este egală cu energia de reacţie:

$$E_\alpha + E_{Th} = Q \quad \text{sau} \quad \frac{p_\alpha^2}{2M_\alpha} + \frac{p_{Th}^2}{2M_{Th}} = Q$$

Ţinând cont de legea de conservare a impulsului:

$$p_{Th} = p_\alpha$$

rezultă:

$$\frac{p_\alpha^2}{2M_\alpha}\left(1 + \frac{M_\alpha}{M_{Th}}\right) = Q$$

Atunci:

$$E_\alpha\left(1 + \frac{M_\alpha}{M_{Th}}\right) = Q$$

Rezultă:

$$E_\alpha = \frac{QM_{Th}}{M_\alpha + M_{Th}} = 5,30 \text{ MeV}$$

4.2.10 Să se calculeze energia totală eliberată la emisia unei particule α din nucleul de ^{213}Po ştiind că energia acesteia este $E_\alpha = 8,3$ MeV.

Soluţie

Notând cu $M_r = 209$u masa nucleului de recul şi cu v_r viteza acestuia, legea de conservare a impulsului se va scrie sub forma:

$$M_\alpha v_\alpha = M_r v_r$$

Deoarece:

$$v_\alpha = \sqrt{2E_\alpha/M_\alpha}$$

atunci viteza de recul a nucleului va fi:

$$v_r = \frac{M_\alpha v_\alpha}{M_r} = \frac{\sqrt{2M_\alpha E_\alpha}}{M_r}$$

Energia cinetică de recul a nucleului va avea expresia:

$$E_r = \frac{M_r v_r^2}{2} = \frac{M_\alpha}{M_r} E_\alpha$$

Energia eliberată este suma dintre energia cinetică a particulei α şi a nucleului de recul:

$$E = E_\alpha + E_r = \left(1 + \frac{M_\alpha}{M_r}\right) E_\alpha = 8,46 \text{ MeV}$$

4.2.11 O particulă aflată în repaus în sistemul laboratorului se dezintegrează în două fragmente de mase M_1 şi M_2. Să se calculeze energia cinetică a fragmentelor în funcţie de energia Q degajată în reacţie. Tratarea problemei se face nerelativist.

Soluţie

Deoarece iniţial particula se află în repaus impulsul total al sistemului este nul adică:

$$0 = p_1 - p_2$$

Energia de reacţie este:

$$Q = E_{c1} + E_{c2} = \frac{p_1^2}{2M_1} + \frac{p_2^2}{2M_2} = \frac{p_1^2}{2}\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)$$

Rezultă:

$$p_1 = \sqrt{\frac{2QM_1M_2}{M_1 + M_2}}$$

$$E_{c1} = \frac{p_1^2}{2M_1} = \frac{QM_2}{M_1 + M_2}$$

$$E_{c2} = \frac{p_2^2}{2M_2} = \frac{QM_1}{M_1 + M_2}$$

4.2.12 Să se determine energia de reacţie Q în procesul $a + A \rightarrow B + b$ în funcţie de masele nucleelor, energia cinetică E_a a particulei a, E_b a particulei b şi unghiul θ făcut de direcţia particulei incidente a cu cea a particulei emergente b. Relaţia dintre impuls şi energie este ceea din cazul nerelativist (vezi Fig. 4.2).

Soluţie

Utilizând legea de conservare a impulsului:

$$\vec{p}_a = \vec{p}_b + \vec{p}_B$$

rezultă:

$$p_B^2 = p_b^2 + p_a^2 - 2p_ap_b\cos\theta$$

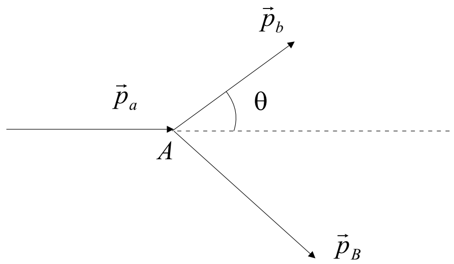

Fig. 4.2

Deoarece $p^2 = 2mE$, atunci:

$$M_B E_B = m_b E_b + m_a E_a - 2\sqrt{m_a m_b E_a E_b}\cos\theta$$

Conform legii de conservare a energiei:

$$E_a + Q = E_b + E_B \quad \text{şi} \quad Q = E_b + E_B - E_a$$

Atunci:

$$E_B = \frac{m_b}{M_B}E_b + \frac{m_a}{M_B}E_a - \frac{2\sqrt{m_a m_b E_a E_b}}{M_B}\cos\theta$$

Energia de reacţie va fi:

$$Q = \left(1 + \frac{m_b}{M_B}\right)E_b - \left(1 - \frac{m_a}{M_B}\right)E_a - \frac{2\sqrt{m_a m_b E_a E_b}}{M_B}\cos\theta$$

4.2.13 Să se calculeze masa unui atom al cărui nucleu emite o particulă α cu energia $E_\alpha = 5,3$ MeV şi care se transformă în nucleul $^{206}_{82}$Pb. Se cunosc: $M_{He} = 4.00387$u şi $M_{Pb} = 206,03859$u.

Soluţie

Energia cinetică de recul a nucleului este:

$$E_r = \frac{M_\alpha}{M_{Pb}} E_\alpha$$

Energia cinetică eliberată este:

$$E = E_r + E_\alpha = \left(1 + \frac{M_\alpha}{M_{Pb}}\right) E_\alpha$$

Astfel, masa nucleului iniţial este:

$$M = M_{He} + M_{Pb} + \frac{E}{c^2} = 210,048 \text{ u}$$

Pentru determinarea efectivă a masei datorită energiei cinetice se ţine cont că energia corespunzătoare unei unităţi atomice de masă este:

$$\begin{aligned} uc^2 &= 931,5 \text{ MeV} \\ \frac{E}{c^2} &= \frac{E}{931,5} \text{ u} = 0,00569 \text{ u} \end{aligned}$$

4.2.14 Să se estimeze energia cinetică a neutronului E_n şi a nucleului ^{6}Li, E_L produse prin fotodezintegrarea ^{7}Li. Fotonul incident are energia $E_\gamma = 15$ MeV. Neutronul este emis înainte, adică pe direcţia cuantei γ. Se cunosc $M_{^6Li} = 6,01703u$, $M_{^7Li} = 7,01823u$ şi $m_n = 1,00867u$

Soluţie

Aplicăm legile de conservare ale energiei şi impulsului

$$E_\gamma = E_L + E_n - Q$$

unde

$$Q = M_{^7Li}c^2 - \left[M_{^6Li}c^2 + m_n c^2\right]$$

$$\frac{E_\gamma}{c} = p_n + p_L$$

Considerând

$$E_L = \frac{p_L^2}{2M_{^6Li}} \quad \text{şi} \quad E_n = \frac{p_n^2}{2m_n}$$

rezultă:

$$E_\gamma + Q = \frac{p_L^2}{2M_{^6Li}} + \frac{p_n^2}{2m_n}$$

şi

$$\left(\frac{E_\gamma}{c^2} - p_n\right)^2 = p_L^2$$

Astfel:

$$E_\gamma + Q - \frac{p_n^2}{2m_n} = \frac{1}{2M_{^6Li}}\left(\frac{E_\gamma}{c^2} - p_n\right)^2$$

Din această relaţie se determină impusul p_n şi apoi energia neutronului.

$$E_n = 6 \text{ MeV}$$

În mod analog se determină energia atomului de litiu $E_L \simeq 1$ MeV

4.2.15 În reacţia nucleară:

$${}_1^2\mathrm{D} +_1^2 \mathrm{D} \rightarrow_1^3 \mathrm{H} +_1^1 \mathrm{p}$$

energia cinetică a deuteronului incident este de $1,2$ MeV. Protonul rezultat din reacţie are energia cinetică $3,3$ MeV şi este deviat la 90^o faţă de direcţia deuteronului incident. Să se determine energia de reacţie.

Soluţie

Energia de reacţie este (vezi problema 4.2.12):

$$Q = \left(1 + \frac{m_p}{m_H}\right) E_p - \left(1 - \frac{m_D}{m_H}\right) E_D = 4 \text{ MeV}$$

deoarece $\cos 90^o = 0$.

4.2.16 În reacţia nucleară

$${}_7^{14}\mathrm{N} +_2^4 \alpha \rightarrow_8^{17} \mathrm{O} +_1^1 \mathrm{p}$$

energia cinetică a particulelor α este $E_\alpha = 4$ MeV şi energia cinetică a protonilor emişi sub unghiul $\theta = 60^o$ faţă de direcţia particulelor incidente este $E_p = 2,09$ MeV. Masele atomilor neutri sunt: $M_{He} = 4,0026$u, $M_H = 1,00783$u, $M_O = 16,99913$u. Să se calculeze energia de reacţie Q.

Soluţie

Pentru calculul masei nucleelor se scade masa electronilor ($m_e = 0,00055$u) şi se neglijează energia de legătură a electronilor. Energia de reacţie este (vezi problema 4.2.12):

$$Q = \left(1 + \frac{M'_p}{M'_O}\right) E_p - \left(1 - \frac{M'_\alpha}{M'_o}\right) E_\alpha - \frac{2\sqrt{M'_\alpha M'_p E_\alpha E_p}}{M'_o} \cos\theta$$

unde:

$$\begin{aligned} M'_p &= M_H - m_e \\ M'_O &= M_O - 8m_e \\ M'_\alpha &= M_\alpha - 2m_e \end{aligned}$$

Rezultă:

$$Q = -1,2 \text{ MeV}$$

4.2.17 Un nucleu de ${}^{11}_{6}\text{C}$ în repaus emite un pozitron cu energia maximă. Să se calculeze energia cinetică a nucleului de recul. Se cunosc: $M_C = 11,011433$u, $m_\beta = 0,000548$u, $M_B = 11,009305$u.

Soluţie

Reacţia nucleară este:

$${}^{11}_{6}\text{C} \rightarrow {}^{11}_{5}\text{B} + \beta^+$$

Legile de conservare ale impulsului şi energiei sunt:

$$\begin{aligned} p_\beta &= p_B \\ Q &= E_\beta + E_B \end{aligned}$$

unde E_β şi E_B sunt energiile cinetice ale pozitronului şi borului. Energia E totală a particulei β este:

$$E^2 = p_\beta^2 c^2 + m_\beta^2 c^4$$

De aici

$$p_\beta^2 c^2 = (E - m_\beta c^2)(E + m_\beta c^2)$$

cu $E = E_\beta + m_\beta c^2$. Astfel:

$$p_\beta^2 c^2 = E_\beta (E_\beta + 2m_\beta c^2)$$

Deoarece $M_C \gg m_e$ atunci energia de reacţie este aproximativ egală cu energia cinetică a pozitronului. Deoarece energia cinetică a borului este mică, atunci:

$$E_B = \frac{p_B^2}{2M_B} = \frac{p_\beta^2}{2M_B}$$

Deoarece:

$$p_\beta^2 = \frac{E_\beta (E_\beta + 2m_\beta c^2)}{c^2} \simeq \frac{Q(Q + 3m_\beta c^2)}{c^2}$$

atunci:

$$E_B = \frac{1}{2M_B c^2} Q(Q + 2m_\beta c^2)$$

Cum energia de reacţie este:

$$Q = [M_C - M_B - m_\beta] c^2 = 1.4718 \text{ MeV}$$

rezultă:

$$E_B = 180 \text{ eV}$$

4.3 Radioactivitate

4.3.1 Timpul de înjumătăţire al uraniului ^{235}U este $8,5 \times 10^8$ ani. Care este activitatea unui gram de substanţă exprimată în μCi. (1Ci= $3,7 \times 10^{10}$ Bq).

Soluţie

Numărul de atomi de uraniu este:

$$N = \frac{m}{\mu} N_A$$

unde $\mu = 235$ g/mol şi $N_A = 6,023 \times 10^{23}$ atomi/mol (1μCi= $3,7 \times 10^4$ Bq).

Activitatea este:

$$\Lambda = \lambda N = \frac{m \ln 2}{T_{1/2} \mu} N_A \times \frac{1}{3,7 \times 10^4} = 1,79\ \mu\text{Ci}$$

4.3.2 Un preparat de uraniu $^{238}_{92}$U, având masa de 1 g, emite $1,24 \times 10^4$ particule/secundă. Să se determine timpul de înjumătăţire al izotopului.

Soluţie

Activitatea este:

$$\Lambda = \lambda N$$

unde $N = \frac{m}{\mu} N_A$, $\mu = 238$ g/mol şi $N_A = 6,023 \times 10^{23}$ atomi/mol. Atunci:

$$\lambda = \frac{\Lambda}{N} = \frac{\Lambda \mu}{m N_A}$$

Timpul de înjumătăţire va fi:

$$T_{1/2} = \frac{0,693}{\lambda} \simeq 4,5 \times 10^9 \text{ ani}$$

4.3.3 Câte particule α emite un gram de $^{232}_{90}$ Th într-o secundă, dacă timpul de înjumătăţire este de $1,34 \times 10^{10}$ ani.

Soluţie

Constanta de dezintegrare este:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$$

Legea dezintegrării este:

$$N = N_o e^{-\lambda t} = N_o(1 - \lambda t) \quad \text{deoarece} \quad \lambda t \ll 1$$

Numărul de particule emise va fi atunci:

$$\Delta N = N_o - N = N_o \lambda t = \frac{m}{\mu} N_A \lambda t = 4,25 \times 10^3$$

4.3.4 Un minereu de uraniu ^{208} U are ca impuritate ^{206} Pb. Acesta provine din dezintegrarea uraniului $\left(T_{1/2} = 4,5 \times 10^9 \text{ ani}\right)$. Cunoscând că în minereul de uraniu se găseşte 20% plumb să se determine vârsta minereului.

Soluţie

După timpul t numărul de nuclee de uraniu nedezintegrate este:

$$N_U = N_0 \exp(-\lambda t)$$

unde N_0 este numărul iniţial de nuclee de uraniu. Numărul de nuclee de plumb formate:

$$N_{Pb} = N_0 - N_U = N_0 \left[1 - \exp(-\lambda t)\right]$$

Masa de uraniu din minereu este:

$$M_U = \frac{N_U}{N_A}\mu_U$$

Masa de plumb din minereu este:

$$M_{Pb} = \frac{N_{Pb}}{N_A}\mu_{Pb}$$

Deoarece

$$\frac{M_{Pb}}{M_U + M_{Pb}} = 0,2$$

rezultă:

$$\frac{M_U}{M_{Pb}} = 4$$

Astfel

$$\frac{N_U}{N_{Pb}}\frac{\mu_U}{\mu_{Pb}} = 4$$

şi

$$\frac{\exp\left(-\lambda t\right)}{1-\exp\left(-\lambda t\right)}\frac{\mu_U}{\mu_{Pb}} = 4$$

Atunci:

$$t = \frac{1}{\lambda}\ln\left(1+\frac{\mu_U}{4\mu_{Pb}}\right) = \frac{T_{1/2}}{\ln 2}\ln\left(1+\frac{\mu_U}{4\mu_{Pb}}\right) = 1,6\times 10^9 \text{ ani}$$

4.3.5 Izotopul de uraniu $^{238}_{92}$ U are un timp de înjumătăţire de $4,51\times 10^9$ ani şi se dezintegrează prin emisia de particule α. Să se determine activitatea radioactivă a $3,7$ g de uraniu.

Soluţie

Activitatea exprimată în Bq este:

$$\begin{aligned}\Lambda &= \lambda N_o\\ \Lambda &= \frac{\ln 2}{T_{1/2}}\frac{m}{\mu}N_A\end{aligned}$$

şi exprimată în Ci va fi:

$$\Lambda(\text{Ci}) = \frac{\Lambda(Bq)}{3,7\times 10^{10}} = 1,23\ \mu\text{Ci}$$

4.3.6 Izotopul de poloniu ${}^{210}_{84}\mathrm{Po}$ are timpul de înjumătăţire de 140 zile. Câte nuclee vor rămâne nedezintegrate din 20 g de poloniu după 10 zile?

Soluţie

Conform legii dezintegrării radioactive:

$$N = N_o e^{-t\frac{\ln 2}{T_{1/2}}} = \frac{m}{\mu} N_A e^{-t\frac{\ln 2}{T_{1/2}}} = 5,46 \times 10^{22} \text{ nuclee}$$

4.3.7 Izotopul de uraniu ${}^{238}_{92}\mathrm{U}$ are un timp de înjumătăţire de $4,5 \times 10^9$ ani şi se dezintegrează prin emisia de particule α. Care este timpul mediu de viaţă.

Soluţie

Constanta de dezintegrare este:

$$\lambda = \frac{0,693}{T_{1/2}}$$

iar timpul mediu:

$$\tau = \frac{1}{\lambda} = \frac{T_{1/2}}{0,693} = 6,5 \times 10^9 \text{ ani}$$

4.3.8 Care este numărul de particule α emise în 131,6 ore de 0,222 g de radon. Se dă $T_{1/2} = 3,8$ zile ($\mu = 222$ kg/kmol).

Soluţie

Constanta de dezintegrare este:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$$

Numărul de nuclee rămase nedezintegrate după timpul t este:

$$N = N_o e^{-\lambda t}$$

În acest timp se dezintegrează un număr de nuclee:

$$\Delta N = N_o - N = N_o(1 - e^{-\lambda t}) = \frac{m}{\mu} N_A (1 - e^{-\lambda t})$$

Numărul de particule emise este egal cu numărul de dezintegrări. Rezultă:

$$\Delta N = 3,8 \times 10^{20} \text{ particule}$$

4.3.9 Să se calculeze masa următoarelor surse care au activitatea egală cu 1 Ci $= 3,7 \times 10^{10}$ Bq.

a) $^{238}_{92}$U, care are timpul de înjumătăţire $T_{1/2} = 4,5 \times 10^{10}$ ani.

b) $^{32}_{15}$P, care are timpul de înjumătăţire $T_{1/2} = 14,5$ zile

Soluţie

$$\Lambda = \lambda N = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} \frac{M}{\mu} N_A$$

unde N_A este numărul lui Avogadro. Rezultă:

$$M = \frac{T_{1/2}}{\ln 2}\frac{\mu}{N_A}\Lambda$$

Astfel:

$$M_U = 29,9 \times 10^3 \text{ kg}$$

$$M_P = 3,55 \times 10^{-3} \text{ mg}$$

4.3.10 Definim activitatea specifică Λ_s ca fiind activitatea unităţii de masă a unei probe. Să se determine $T_{1/2}$ al izotopului ^{87}Rb dacă prin măsurarea activităţii unei probe de RbCl se găseşte $\Lambda_s = 1000$ dez/s gram. Abundenţa izotopică a ^{87}Rb este 27,85%. Masa molară a RbCl este $\mu = 120,92$ g/mol.

Soluţie

Un gram de RbCl conţine:

$$N = \frac{N_A}{\mu}$$

nuclee de Rb. Dacă notăm cu $p = 27,85\%$ abundenţa izotopică a ^{87}Rb un gram de RbCl conţine:

$$N_1 = \frac{N_A}{\mu}p$$

nuclee de Rb. Deoarece activitatea acestei cantităţi de Rb este 1000 dez/sec atunci:

$$\lambda N_1 = \Lambda_s$$

Atunci:

$$\lambda = \frac{\Lambda_s}{N_1} = \frac{\Lambda_s \mu}{N_A p} = 7,19 \times 10^{-19}\ \mathrm{s}^{-1}$$

Timpul de înjumătăţire al ^{87}Rb este

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = 6,38 \times 3,05 \times 10^{10}\ \text{ani}$$

4.3.11 O mostră de cărbune găsită într-o grotă conţine 1/16 din cantitatea de $^{14}_{6}$C pe care o conţine o cantitate egală de carbon din materia vie. Să se găsească vârsta aproximativă a mostrei, dacă timpul de înjumătăţire al $^{14}_{6}$C este de 5568 ani.

Soluţie

Considerând că la momentul iniţial numărul de nuclee este N_o, la momentul t acesta devine:

$$N = N_o e^{-\frac{t ln2}{T_{1/2}}}$$

Dar $N = N_o/16$, atunci:

$$\frac{N_o}{16} = N_o e^{-\frac{t ln2}{T_{1/2}}}$$

Rezultă:

$$t = 4T_{1/2} = 22272 \text{ ani}$$

4.3.12 Numărul de impulsuri Δn înregistrate de un contor de tip Geiger-Müler într-un interval de timp este proporţional cu numărul de atomi dezintegraţi. Se înregistrează Δn_1 şi Δn_2 impulsuri în două intervale de timp egale $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \Delta t$. Intervalul de timp Δt_3, mult mai mare decât celelalte este cronometrat de la începutul primei înregistrări până la începutul celei de-a doua înregistrări. Să se determine constanta de dezintegrare λ ($\lambda \Delta t_3 \ll 1$).

Soluţie

Fie Λ_o activitatea sursei la începutul primei perioade de înregistrare. Atunci:

$$\Delta n_1 = k\Lambda_o \Delta t$$

unde k este o constantă. Pentru determinarea activităţii la începutul celei de-a doua perioade:

$$\Lambda = \Lambda_o e^{-\lambda \Delta t_3} \simeq \Lambda_o(1 - \lambda \Delta t_3)$$

Numărul de impulsuri Δn_2 va fi:

$$\Delta n_2 = k\Lambda \Delta t = k\Lambda_o(1 - \lambda \Delta t_3)\Delta t$$

Rezultă:

$$\frac{\Delta n_1}{\Delta n_2} = \frac{1}{1 - \lambda \Delta t_3}$$

$$\lambda = \frac{(\Delta n_1 - \Delta n_2)}{\Delta n_1 \Delta t_3}$$

4.3.13 Din nucleul unui element A, prin dezintegrare, se formează nucleul unui alt element B radioactiv. Constanta radioactivă a elementului A este λ_A iar a elementului B, λ_B. Care este legea de variaţie în timp a numărului de nuclee din elementul B, dacă se ştie că iniţial preparatul conţine numai nuclee A, numărul acestora fiind N_o.

Soluţie

Conform legii de dezintegrare:

$$N_A = N_o e^{-\lambda_A t}$$

Variaţia numărului de nuclee B se datorează apariţiei lor prin dezintegrarea nucleelor A, $\lambda_A N_A$ şi din dezintegrarea nucleelor B, $\lambda_B N_B$. Atunci:

$$\begin{aligned} \frac{dN_B}{dt} &= -\lambda_B N_B + \lambda_A N_o e^{-\lambda_A t} \\ \frac{dN_B}{dt} + \lambda_B N_B &= \lambda_A N_o e^{-\lambda_A t} \end{aligned}$$

Ecuaţia omogenă:

$$\frac{dN_B}{dt} + \lambda_B N_B = 0$$

are soluţia:

$$N_B = C e^{-\lambda_B t}$$

Pentru determinarea soluţiei ecuaţiei neomogene vom folosi metoda variaţiei constantei. Considerăm că C este o funcţie de timp, atunci:

$$\frac{dC}{dt}e^{-\lambda_B t} - \lambda_B C e^{-\lambda_B t} = -\lambda_B C e^{-\lambda_B t} + \lambda_A N_o e^{-\lambda_A t}$$

Rezultă:

$$\frac{dC}{dt} = \lambda_A N_o e^{(\lambda_B - \lambda_A)t}$$

Ultima ecuaţie va admite soluţia:

$$C(t) = C_1 + \frac{\lambda_A N_o e^{(\lambda_B - \lambda_A)t}}{\lambda_B - \lambda_A}$$

unde C_1 este o constantă. Rezultă:

$$N_B = \left[C_1 + \frac{\lambda_A N_o e^{(\lambda_B - \lambda_A)t}}{\lambda_B - \lambda_A}\right] e^{-\lambda_B t}$$

Punând condiţia ca la momentul iniţial să nu existe nuclee B, $N_B(0) = 0$ rezultă:

$$C_1 = -\frac{\lambda_A N_o}{\lambda_B - \lambda_A}$$

Astfel:

$$N_B = \frac{\lambda_A N_o}{\lambda_B - \lambda_A}\left[e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}\right]$$

4.3.14 Dacă se consideră o succesiune de două dezintegrări $A \rightarrow B \rightarrow C$ şi $\lambda_A < \lambda_B$, să se arate că după un interval de timp mult mai mare decât timpul de înjumătăţire al celor mai stabile nuclee, raportul dintre cantităţile elementelor A şi B rămâne constant în timp.

Soluţie

Ţinem cont de rezultatul problemei precedente:

$$\frac{N_B}{N_A} = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A}\left[1 - e^{(\lambda_A - \lambda_B)t}\right]$$

Deoarece $\lambda_A < \lambda_B$, atunci, după un timp suficient de lung $e^{(\lambda_A - \lambda_B)t} \simeq 0$. Astfel:

$$\frac{N_B}{N_A} = \frac{\lambda_A}{\lambda_B - \lambda_A}$$

O astfel de stare se numeşte echilibru secular.

4.3.15 Prin iradiere se formează nuclee radioactive cu viteza constantă q. Cunoscând constanta de dezintegrare λ a nucleelor radioactive, să se determine numărul acestora în funcţie de timp.

Soluţie

Variaţia numărului de nuclee radioactive se datorează producerii cu viteza q şi a dezintegrării acestora (λN în unitatea de timp). Atunci:

$$\frac{dN}{dt} = q - \lambda N \quad \text{sau} \quad \frac{dN}{dt} + \lambda N = q$$

Pentru rezolvarea acestei ecuaţii se utilizează metoda variaţiei constantei. Soluţia ecuaţiei omogene este:

$$N = Ce^{-\lambda t}$$

Considerăm C - funcţie de timp şi prin introducerea ei în ecuaţia neomogenă rezultă:

$$C(t) = C_1 + \frac{q}{\lambda} e^{\lambda t}$$

Atunci:

$$N = C_1 e^{-\lambda t} + \frac{q}{\lambda}$$

unde C_1 este o constantă care se determină din condiţia ca la $t = 0$, $N(0) = 0$. Atunci $C_1 = -q/\lambda$ şi rezultă:

$$N = \frac{q}{\lambda} \left[1 - e^{-\lambda t}\right]$$

Când $t \to \infty$ atunci $N_\infty = q/\lambda$.

4.3.16 Viteza de formare a izotopului ^{45}Ca este $q = 10^{10}$ nuclee/s. Ce masă de ^{45}Ca se acumulează în timpul $t = 48$ zile. Se cunoaşte numărul lui Avogadro $N_A = 6,023 \times 10^{23}$ mol^{-1} şi timpul de înjumătăţire a izotopului $T_{1/2} = 152$ zile.

Soluţie

Numărul de nuclee formate în timpul t este:

$$N(t) = \frac{q}{\lambda} [1 - \exp(-\lambda t)]$$

Masa de ^{45}Ca este:

$$M = \frac{N}{N_A}\mu = \frac{qT_{1/2}}{N_A \ln 2}\left[1 - \exp\left(-\frac{t \ln 2}{T_{1/2}}\right)\right]\mu = 2,597 \times 10^{-9} \text{ kg}$$

4.3.17 Să se deducă formulele care exprimă numerele de atomi N_1, N_2, N_3 la momentul t pentru lanţul de reacţii

$$\mathrm{X}_1 \longrightarrow \mathrm{X}_2 \rightarrow \mathrm{X}_3$$

Constantele de dezintegrare sunt λ_1 pentru prima dezintegrare şi λ_2 pentru cea de-a doua dezintegrare. Se consideră că la $t = 0$ $N_1 = N_{10}$, $N_2 = N_{20}$ şi $N_3 = N_{30}$. Izotopul X_3 este stabil.

Soluţie

Ecuaţia de bilanţ pentru nucleele X_1 este:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1$$

Rezultă:

$$N_1 = N_{10} \exp(-\lambda_1 t)$$

care este chiar legea dezintegrării radiactive.

La viteza de variaţie a numărului de nuclee X_2 contribuie viteza de dezintegrare a nucleelor N_1 şi viteza de dispariţie a nucleelor X_2 prin dezintegrarea lor în nuclee de tip X_3.

$$\frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2$$

sau ţinând cont de modul în care variază N_1 se obţine:

$$\frac{dN_2}{dt} + \lambda_2 N_2 = \lambda_1 N_{10} \exp\left(-\lambda_1 t\right)$$

Ecuaţia este o ecuaţie neomogenă şi are soluţia (vezi problema 4.3.14):

$$N_2 = \left[C_1 + \frac{\lambda_1 N_{10} \exp\left[\left(\lambda_2 - \lambda_1\right) t\right]}{\lambda_2 - \lambda_1}\right] \exp\left(-\lambda_2 t\right)$$

Dacă punem condiţia ca la $t = 0$, $N_2 = N_{20}$ se obţine:

$$N_{20} = C_1 + \frac{\lambda_1 N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

şi

$$N_2 = \frac{\lambda_1 N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1}\left[\exp\left(-\lambda_1 t\right) - \exp\left(-\lambda_2 t\right)\right] + N_{20} \exp\left(-\lambda_2 t\right)$$

Deoarece izotopul X_3 este stabil, la variaţia numărului de nuclee X_3 contribuie doar transformarea nucleelor X_2 în nuclee X_3 prin dezintegrare

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_2 N_2$$

Astfel

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_2\left(N_{20} - \frac{\lambda_1 N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1}\right) \exp\left(-\lambda_2 t\right) + \frac{\lambda_1 \lambda_2 N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1} \exp\left(-\lambda_1 t\right)$$

Prin integrare rezultă:

$$N_3 = -\left(N_{20} - \frac{\lambda_1 N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1}\right) \exp\left(-\lambda_2 t\right) - \frac{\lambda_2 N_{10}}{\lambda_2 - \lambda_1} \exp\left(-\lambda_1 t\right) + C$$

Punem condiţia ca la $t = 0$, $N_3 = N_{30}$ rezultă că:

$$C = N_{10} + N_{20} + N_{30}$$

iar

$$\begin{aligned} N_3 &= N_{10}\left[\frac{\lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1}\exp\left(-\lambda_1 t\right) + \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}\exp\left(-\lambda_2 t\right) + 1\right] + \\ &+ N_{20}\left[1 - \exp\left(-\lambda_2 t\right)\right] + N_{30} \end{aligned}$$

Bibliografie

[1] Cornelia Motoc – *Fizică* , Editura All. Bucureşti 1994

[2] I. Irodov, I. Savéliev, O. Zamcha –*Recueil de problemes de physique générale*, Edition Mir, Moscou, 1976

[3] L. Grechko, V. I. Sugakov, O. F. Tomasecich, A. M. Fedorchenko – *Problems in theoretical physics*, Mir Publishers, Moscow, 1977

[4] Cornelia Motoc, Mihai Badea, Luminiţa Daniello, Alexandru Lupaşcu– *Culegere de probleme de Fizica Solidului*, Bucureşti 1974

[5] Mihai Răzvan Mitroi, Constantin Roşu –*Culegere de probleme de fizica materiei condensate*, Editura Bren, Bucureşti, 2002

[6] I. Irodov – *Culegere de probleme de fizică atomică*, Editura Tehnică, Bucureţi, 1961

[7] S. Kozel, E. Rashda, S. Slavatinskii – *Collected problems in Physics*, Edition Mir, Moscou, 1986