

Fizica 2

Emil Petrescu

18 martie 2005

Cuprins

1	Optică	9
1.1	Unde electromagnetice	9
1.1.1	Ecuția undelor electromagnetice	9
1.1.2	Polarizarea undelor electromagnetice	20
1.2	Reflexia și refracția	26
1.2.1	Unde electromagnetice la incidență normală pe suprafața de separație a două medii	26
1.2.2	Legile reflexiei și refracției în cazul undelor electromagnetice	30
1.2.3	Relațiile lui Fresnel	33
1.2.4	Interpretarea relațiilor lui Fresnel	38
1.2.5	Reflexia totală	46
1.2.6	Reflexia pe metale a undelor electromagnetice	54
1.3	Interferența luminii	59
1.3.1	Oscilații coerente	59
1.3.2	Interferența a două unde monocromatice	62
1.3.3	Coerența temporală și spațială	65
1.3.4	Dispozitive interferențiale	70
1.3.5	Franje localizate de egală înclinare	76
1.3.6	Pana optică	89
1.4	Difracția undelor	91
1.4.1	Principiul Huygens - Fresnel	91
1.4.2	Clasificarea fenomenelor de difracție	93
1.4.3	Difracția Fresnel. Teoria zonelor Fresnel	93
1.4.4	Difracția Fraunhofer	99
1.4.5	Rețeaua de difracție	104
1.5	Dispersia luminii	111

1.5.1	Ecuatia de dispersie	112
1.5.2	Dispersia anormală	116
1.6	Optica mediilor anizotrope	118
1.6.1	Introducere	118
1.6.2	Teoria electromagnetica a mediilor anizotrope . .	119
1.6.3	Suprafata vectorului de unda si ecuatiile lui Fresnel	122
1.6.4	Suprafata de unda	125
1.6.5	Elipsoidul indicilor de refractie	128
1.6.6	Structura undei	131
1.6.7	Medii uniaxe	131
1.6.8	Birefringenta	136
1.6.9	Lame cristaline	139
1.6.10	Birefringenta provocata	141
1.6.11	Polarizarea rotatorie	144
2	Teoria Relativitatii	151
2.1	Introducere	151
2.2	Bazele experimentale ale teoriei relativitatii	152
2.2.1	Experienta Michelson si Morley	153
2.2.2	Experienta lui Bertozzi	156
2.3	Postulatele teoriei relativitatii	157
2.3.1	Intervalul spatiu-temporal	159
2.4	Transformarile Lorentz	162
2.4.1	Transformarile Lorentz speciale	162
2.4.2	Consecinte ale transformarilor Lorentz	165
2.5	Universul cuadrimensional	168
2.5.1	Cuadrivectorul spatiu-timp	168
2.5.2	Cuadrivectorii viteza si acceleratie	171
2.5.3	Intervale spatiale si temporale	173
2.6	Elemente de dinamica relativista	178
2.6.1	Functia lui Lagrange	178
2.6.2	Energia si impulsul	180
2.6.3	Particula aflată sub actiunea unei forte	182
2.6.4	Echivalenta dintre masa si energie	183
3	Fundamentele mecanicii cuantice	185
3.1	Radiatia termica	185
3.1.1	Mărimi fundamentale	185

3.1.2	Corpul negru	188
3.1.3	Legile clasice ale radiației termice	189
3.1.4	Teoria lui Planck	196
3.2	Efectul fotoelectric	199
3.3	Efectul Compton	203
3.4	Modele atomice	208
3.4.1	Serii spectrale	208
3.4.2	Modelul Rutherford	211
3.4.3	Modelul Bohr	212
3.4.4	Experimentul Frank și Hertz	215
3.5	Ipoteza de Broglie	217
3.5.1	Experimentul Davisson și Germer	220
3.5.2	Experimentul Thomson	223
4	Mecanică cuantică	225
4.1	Unde și particule. Ideile fundamentale ale mecanicii cuantice	225
4.1.1	Dualitatea undă-corpusul	225
4.1.2	Funcția de undă. Conceptul de stare	229
4.1.3	Principiul descompunerii spectrale	233
4.2	Aparatul matematic al mecanicii cuantice	236
4.2.1	Spațiul funcțiilor de undă	236
4.2.2	Operatori	245
4.2.3	Ecuția cu valori și vectori proprii pentru un operator	248
4.3	Principiile mecanicii cuantice	252
4.3.1	Principiul descrierii stării unui sistem cuantic	252
4.3.2	Principiul descrierii mărimilor fizice	252
4.3.3	Principiul interpretării statistice	260
4.3.4	Principiul evoluției temporale	263
4.3.5	Principiul preparării stării	274
4.4	Ecuția Schrödinger unidimensională	274
4.4.1	Particulă liberă	277
4.4.2	Groapa de potențial cu pereți infiniți	279
4.4.3	Treapta de potențial	282
4.4.4	Bariera de potențial	287
4.5	Oscilatorul armonic liniar	293
4.6	Momentul cinetic	304
4.6.1	Momentul cinetic orbital	304
4.6.2	Teoria generală a momentului cinetic	310

4.7	Mișcarea în câmp central de forțe	315
4.7.1	Stări staționare pentru particula în câmp coulombian	319
4.7.2	Funcțiile proprii pentru atomul de hidrogen . . .	325
4.8	Spinul electronului	331
4.8.1	Momentul magnetic orbital al electronului	331
4.8.2	Experimente care au ilustrat spinul electronului .	333
4.8.3	Ipoteza spinului	337
4.8.4	Teoria lui Pauli a spinului	338
4.8.5	Spinori	341
4.9	Sisteme de particule identice	342
4.9.1	Postulatul de simetrizare	344
4.9.2	Construirea funcțiilor de undă total simetrice sau antisimetrice	344
4.9.3	Principiul de excluziune al lui Pauli	346
4.10	Teoria perturbațiilor	346
4.10.1	Teoria perturbațiilor independente de timp	347
4.10.2	Metoda perturbațiilor dependente de timp	352
5	Fizică atomică	359
5.1	Introducere	359
5.1.1	Spinul fotonului	359
5.1.2	Compunerea momentelor cinetice	364
5.2	Nivele energetice în atomi	367
5.3	Absorbția și emisia luminii de către atomi	373
5.3.1	Reguli de selecție	373
5.3.2	Structura fină a liniilor emise de hidrogen și metale alcaline	376
5.4	Atomul în câmp magnetic	379
5.4.1	Momentul magnetic orbital. Teorema Larmor . .	379
5.4.2	Efectul Zeeman	381
5.4.3	Rezonanța magnetică	389
5.5	Atomul în câmp electric. Efectul Stark	394
5.5.1	Efectul Stark liniar	394
5.6	Deplasarea Lamb	399
5.7	Tabelul periodic al elementelor	402
5.8	Atomul de Helium	404
5.9	Raze X	410

6	Fizică nucleară	417
6.1	Noțiuni fundamentale	417
6.1.1	Nomenclatura și constituenții nucleului	417
6.1.2	Raza nucleului	418
6.1.3	Masa nucleară și energia de legătură	420
6.1.4	Momentul cinetic	422
6.1.5	Paritatea	422
6.1.6	Momente magnetice nucleare	423
6.1.7	Momentul electric de cuadripol	425
6.2	Forțe nucleare și energia de interacțiune nucleară	428
6.2.1	Deuteronul	429
6.2.2	Starea fundamentală a deuteronului	431
6.2.3	Energia stării fundamentale a deuteronului	432
6.2.4	Forma detaliată a energiei potențiale internucleonice	434
6.3	Modele nucleare	436
6.3.1	Modelul picăturii de lichid	436
6.3.2	Modelul păturilor nucleare	439
6.4	Reacții nucleare	447
6.4.1	Energetica reacțiilor nucleare	447
6.4.2	Sistemul centrului de masă	449
6.4.3	Reacțiile nucleare și secțiunile eficace	450
6.4.4	Tipuri de reacții nucleare	452
6.4.5	Împrăștiere și absorbție	455
6.4.6	Reacții directe	459
6.4.7	Reacții cu formare de nucleu compus	460
6.4.8	Fisiunea	462
6.4.9	Fuziunea	467
6.5	Radioactivitatea	468
6.5.1	Măsurarea timpilor de viața	471
6.6	Dezintegrarea alfa	471
6.7	Dezintegrarea beta	478
6.7.1	Moduri de dezintegrare beta	478
6.7.2	Spectrul de energie al particulei β emise	480
6.7.3	Neutrino	481
6.7.4	Metodele de punere în evidență a neutrinilor	483
6.7.5	Teoria dezintegrării β	484
6.7.6	Constanta de dezintegrare β	490
6.7.7	Violarea conservării parității	491

6.8	Dezintegrarea gama	494
6.8.1	Tranziții de dipol și tranziții multipolare	494
6.8.2	Reguli de selecție	498
6.8.3	Conversia internă	499

Capitolul 1

Optică

1.1 Unde electromagnetice

1.1.1 Ecuația undelor electromagnetice

Existența undelor electromagnetice rezultă din ecuațiile Maxwell. Pentru început vom considera un mediu omogen, liniar, izotrop și nedisipativ. Considerăm că în acest mediu nu există distribuții de sarcină sau curenți liberi. În acest caz ecuațiile lui Maxwell devin:

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.4)$$

Deoarece mediul de mai sus este liniar, omogen și izotrop:

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \quad (1.5)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (1.6)$$

Atunci ecuațiile de mai sus devin:

$$\nabla \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.7)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1.8)$$

$$\nabla \vec{E} = 0 \quad (1.9)$$

$$\nabla \vec{H} = 0 \quad (1.10)$$

Din aceste ecuații rezultă că un câmp electric variabil în timp generează un câmp magnetic, care la rândul lui generează un câmp electric. Vom arăta că perturbația produsă se propagă în spațiu din aproape în aproape, cu o viteză finită, sub formă de unde electromagnetice.

Pentru a deduce ecuația undelor vom aplica operatorul rotor ecuației (1.7):

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{H}) = \varepsilon \nabla \times \left(\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{E}) \quad (1.11)$$

Utilizând relația (1.8), relația (1.11) devine:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{H}) = -\mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} \quad (1.12)$$

sau:

$$\nabla (\nabla \vec{H}) - \Delta \vec{H} = -\mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} \quad (1.13)$$

Cum $\nabla \vec{H} = 0$ relația (1.13) devine:

$$\Delta \vec{H} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.14)$$

În același mod se obține pentru intensitatea câmpului electric \vec{E} ecuația:

$$\Delta \vec{E} - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.15)$$

Ecuațiile (1.14) și (1.15) sunt analoge cu ecuația generală a undelor. De aici rezultă că viteza de propagare a undelor electromagnetice este:

$$v = (\mu \varepsilon)^{-1} \quad (1.16)$$

În cazul când unda se propagă în vid:

$$v = c = (\mu_0 \varepsilon_0)^{-1} = 3 \times 10^8 \text{ m/s} \quad (1.17)$$

Această valoare este egală cu viteza luminii în vid, fapt ce duce la presupunerea că lumina este o undă de natură electromagnetică. Într-un mediu transparent în care $\varepsilon = \varepsilon_0\varepsilon_r$ și $\mu = \mu_0\mu_r$ se obține:

$$v = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r\mu_r}} = \frac{c}{n} \quad (1.18)$$

unde:

$$n = \frac{c}{v} = \sqrt{\varepsilon_r\mu_r} \quad (1.19)$$

este indicele de refracție al mediului. Pentru materiale nemagnetice $\mu_r = 1$ și $n = \sqrt{\varepsilon_r}$. Forma soluțiilor pentru undele electromagnetice armonice plane este:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k}\vec{r} \right) \right] \quad (1.20)$$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}_0 \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k}\vec{r} \right) \right] \quad (1.21)$$

unde:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u} \quad (1.22)$$

este vectorul de undă, iar \vec{u} este vectorul unitar orientat în sensul direcției de propagare. Dacă sursa undelor este punctiformă se produc unde sferice și soluțiile ecuațiilor (1.14) și (1.15) au forma:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{E}_0}{r} \exp [i(\omega t - kr)] \quad (1.23)$$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{H}_0}{r} \exp [i(\omega t - kr)] \quad (1.24)$$

Spectrul undelor electromagnetice

În 1867 când Maxwell a publicat pentru prima dată teoria sa despre electromagnetism, banda frecvențelor cunoscute ale undelor electromagnetice se întindea din infraroșu până în ultraviolet. Deși aceasta este regiunea undelor electromagnetice studiate în principal de optică, ea reprezintă un mic segment din spectrul acestora.

Spectrul undelor electromagnetice acoperă un domeniu foarte larg. Astfel, în funcție de frecvență sau lungimea de undă, undele electromagnetice pot fi calificate în radiații gama, raze X, radiații ultraviolete, radiații vizibile, radiații infraroșii, unde radio.

1. Undele radio În 1887, la opt ani după moartea lui Maxwell, Heinrich Hertz, profesor de fizică la Technische Hochschule în Karlsruhe din Germania a generat și a detectat primele unde electromagnetice. Undele obținute de Hertz sunt astăzi clasificate ca fiind în domeniul de radiofrecvență care se întinde de la câțiva herți la 109 Hz (lungimea de undă variază de la câțiva km la 0,3 m). Aceste unde sunt emise de circuitele electro-oscilante. De exemplu un curent alternativ de 50 Hz ce trece prin liniile de transmisie a energiei generează o undă electromagnetică cu $\lambda = \frac{c}{v} = 6 \times 10^6 \text{ m} = 6 \times 10^3 \text{ km}$.

Nu există limită superioară teoretică pentru astfel de unde. Frecvențele cele mai mici ale acestei benzi sunt utilizate în emisiile de radio și televiziune.

2. Microundele Regiunea microundelor are frecvențele cuprinse între 10^9 Hz până la 3×10^{11} Hz. Lungimile de undă corespunzătoare sunt cuprinse între 30 cm și 1 mm. Radiațiile capabile să penetreze atmosfera Pământului au lungimile de undă cuprinse între 1 cm și 30 cm. Microundele sunt importante pentru comunicațiile cu vehiculele din spațiul cosmic și deasemenea în radioastronomie. Microundele sunt utilizate în telefonie, pentru ghidarea avioanelor, în cuptoarele cu microunde, pentru determinarea vitezelor (radar). Ca exemplu atomii neutri de hidrogen, distribuiți în vaste regiuni din spațiul cosmic emit microunde cu lungimea de undă de 21 cm ($v = 1420$ MHz).

3. Radiațiile infraroșii Regiunea infraroșie se extinde de la 3×10^{11} Hz până la 4×10^{14} Hz. Regiunea infraroșie este împărțită în 4 regiuni:

- a) infraroșul apropiat (780-3000 nm)
- b) infraroșul intermediar (3000-6000 nm)
- c) infraroșul îndepărtat (6000-15000 nm)
- d) infraroșul extrem (15000 nm - 1,0 mm)

Aceasta este o împărțire arbitrară. Trebuie remarcat că orice material radiază și absoarbe unde infraroșii datorită agitației termice a moleculelor sale.

Moleculele unui obiect cu temperatura deasupra lui 0 K emit radiații infraroșii chiar dacă acestea au o intensitate mică. Pe de altă parte radiații infraroșii sunt emise într-un spectru continuu de corpurile calde. Trebuie remarcat că jumătate din energia emisă de Soare corespunde

domeniului infraroșu, iar becurile emit mai multă radiație infraroșie decât lumină.

Ca orice creatură cu sânge cald și corpul omenesc emite radiații infraroșii de la 3000 nm având un maxim al emisiei în jur de 10000 nm.

Această emisie este datorată tranzițiilor ce au loc între nivelele de vibrație ale moleculelor.

Energia radiațiilor infraroșii este măsurată cu dispozitive care răspund la absorbția de radiații infraroșii. Unele detectoare pot fi cuplate prin intermediul unui sistem de scanare la un tub catodic fapt care duce la producerea unei imagini în infraroșu. Un astfel de aparat este cunoscut sub numele de termograf.

Ca exemplu de emițător poate fi dat laserul cu CO₂. Folosit ca sursă de putere continuă cu nivelul de 100W este utilizat mult în industrie, în special în tăieri de precizie și tratamente termice. Emisia sa din infraroșu (18,3 – 23) μm este ușor absorbită de corpul uman fapt ce îl face util în medicină pentru diverse operații.

4. Lumina Lumina corespunde radiațiilor electromagnetice din banda de frecvențe $3,84 \times 10^{14}$ Hz – $7,69 \times 10^{14}$ Hz sau lungimilor de undă cuprinse în intervalul (390 nm - 780 nm). Ea este produsă prin rearanjarea electronilor în atomi și molecule adică prin tranzițiile electronilor în interiorul acestora.

În materialele incandescente, în filamentele metalice încălzite puternic, gradul de agitație termică este mare astfel că electronii care sunt accelerați suferă frecvente ciocniri. Rezultă o emisie numită radiație termică și aceasta este sursa principală de lumină.

Din contră în cazul în care se umple un tub cu un gaz și se realizează o descărcare electrică, atomii se excită și emit o radiație caracteristică diverselor nivele energetice, determinând o serie de linii sau benzi de frecvențe bine determinate.

Un astfel de dispozitiv este cunoscut sub numele de tub de descărcare. Astfel Kryptonul 86 are liniile foarte înguste. Linia cu lungimea de undă $\lambda = 605,780210$ nm și lărgimea la semiînălțime egală cu 0,000470 nm (ceea ce corespunde la o lărgime de 400 MHz), din 1983 este utilizată la definirea unității de lungime (1m = 1650763,73 lungimi de undă ale Kr 86).

Newton a fost primul care a observat că lumina albă este un amestec

de culori din spectrul vizibil.

Culoarea reprezintă răspunsul fenomenologic și psihologic al omului la diferitele frecvențe ale spectrului care se extinde de $3,84 \times 10^{14}$ Hz pentru roșu și care trece prin galben, verde, albastru și violet la aproximativ $7,69 \times 10^{14}$ Hz. Culoarea nu este o proprietate a luminii însăși ci o manifestare a sistemului nervos uman.

5. Radiațiile ultraviolete Lângă spectrul radiațiilor luminoase se găsește spectrul radiațiilor ultraviolete (între 8×10^{14} Hz și $3,4 \times 10^{16}$ Hz) descoperit de Johann Willhelm Ritter (1776-1810).

Ochiul uman nu poate percepe undele ultraviolete deoarece corneea absoarbe în particular radiațiile cu lungimile de undă cele mai mici iar cristalinul absoarbe puternic radiațiile cu lungimea de undă din jurul a 300 nm. Insectele, de exemplu albinele, pot percepe radiațiile ultraviolete.

Atomii emit radiații ultraviolete când au loc dezexcitări ale electronilor de pe nivelele energetice cele mai înalte pe nivele energetice mai joase ale atomilor.

O altă situație este atunci când doi atomi cărora le lipsește câte un electron de valență se combină în molecule biatomice astfel că aceștia se cuplează în perechi în procesul de creare a legăturii chimice. Ei sunt puternic legați de ansamblul astfel creat și în consecință stările excitate ale acestor molecule sunt în ultraviolet. Moleculele din atmosferă N_2 , O_2 , CO_2 și H_2O au astfel de rezonanțe în ultraviolet.

6. Razele X Au fost descoperite în 1895 de Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923). Ele au domeniul cuprins, în mare, între frecvențele $2,4 \times 10^{16}$ Hz până la 5×10^{19} Hz, având lungimile de undă foarte mici (6×10^{-3} nm - 1,25 nm).

O metodă practică de obținere a acestor radiații este aceea de a accelera electroni și a-i orienta către ținte realizate din diverse materiale. Aceasta determină o decelerare rapidă a electronilor care vor emite o radiație de frânare. În plus atomii țintei pot deveni ionizați în cursul acestui bombardament. Pot fi eliminați electronii din păturile interioare foarte apropiate de nucleu. Atunci când o astfel de stare este ocupată de un electron din păturile superioare se pot emite radiații X. Rezultatul obținut este o radiație specifică materialului țintei și ea poartă numele

de radiație caracteristică.

Radiografiile cu raze X produc mai degrabă umbre decât o imagine fotografică. Au fost realizate telescoape cu raze X care sunt plasate pe orbite cosmice, microscopice cu raze X, rețele de difracție pentru raze X. În 1984 un grup de la Lawrence Livermore National Laboratory a reușit să realizeze un laser cu lungimea de undă de 20,6 nm.

7. Razele gama Sunt radiațiile electromagnetice cu frecvențe mai mari de 5×10^{19} Hz și sunt radiațiile electromagnetice cu lungimile de undă cele mai mici. Ele sunt emise în tranzițiile între nivelele energetice ale particulelor ce alcătuiesc nucleul atomic. Datorită lungimilor de undă mici este practic imposibil să se observe comportarea ondulatorie a acestora.

Transversalitatea undelor electromagnetice plane

Vom arăta că pentru o undă electromagnetică plană vectorii \vec{E} și \vec{H} oscilează perpendicular pe direcția de propagare a undei. Aplicând operatorul divergență relației (1.20):

$$\nabla \vec{E}(\vec{r}, t) = \nabla \vec{E}_0 \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k} \vec{r} \right) \right]$$

$$\nabla \vec{E}(\vec{r}, t) = -i [E_{ox}k_x + E_{oy}k_y + E_{oz}k_z] \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k} \vec{r} \right) \right]$$

Se obține:

$$\nabla \vec{E}(\vec{r}, t) + i\vec{k}\vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.25)$$

Ținând cont de relația (1.9) care spune că divergența câmpului electric este nulă, din relația (1.25) rezultă că:

$$\vec{E}\vec{k} = 0$$

adică:

$$\vec{E} \perp \vec{k}$$

ceea ce înseamnă că vectorul câmp electric din unda electromagnetică este perpendicular pe direcția de propagare.

În mod analog se demonstrează că și:

$$\vec{H} \perp \vec{k} \quad (1.26)$$

Vom arăta în continuare ca vectorii \vec{E} și \vec{H} sunt perpendiculari între ei.

Pentru aceasta aplicăm rotorul relației (1.21). Calculăm componenta după Ox:

$$\left(\nabla \times \vec{H}\right)_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = -ik_y H_z + ik_z H_y = -i \left(\vec{k} \times \vec{H}\right)_x$$

Relații analoge se obțin și pentru celelalte componente. Astfel rezultă că:

$$\nabla \times \vec{H} = -i \left(\vec{k} \times \vec{H}\right) \quad (1.27)$$

Ținând cont de relația (1.7) se obține:

$$-i \left(\vec{k} \times \vec{H}\right) = -\varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.28)$$

Considerând intensitatea câmpului electric dată de relația (1.20) atunci relația (1.28) devine:

$$\vec{k} \times \vec{H} = -\omega \varepsilon \vec{E} \quad (1.29)$$

Cum:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}$$

și lungimea de undă este:

$$\lambda = v \frac{2\pi}{\omega} = \frac{1}{\sqrt{\mu\varepsilon}} \frac{2\pi}{\omega}$$

atunci:

$$\vec{u} \times \vec{H} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \vec{E} \quad (1.30)$$

sau:

$$\vec{E} = -\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \left(\vec{u} \times \vec{H}\right) \quad (1.31)$$

În mod analog:

$$\vec{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \left(\vec{u} \times \vec{E}\right) \quad (1.32)$$

Pentru unda directă vectorii \vec{u} , \vec{E} , \vec{H} formează un triedru drept (Fig. 1.1)

Figura 1.1: Structura unei unde electromagnetice plane

Din relația (1.31) rezultă:

$$|\vec{E}| = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} |\vec{u} \times \vec{H}| \quad (1.33)$$

adică:

$$|\vec{E}| = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} |\vec{H}| \quad (1.34)$$

de unde:

$$\sqrt{\varepsilon} |\vec{E}| = \sqrt{\mu} |\vec{H}| \quad (1.35)$$

Intensitatea undelor electromagnetice

Densitatea de energie datorată câmpului electric este:

$$w_E = \varepsilon \frac{E^2}{2} \quad (1.36)$$

iar densitatea de energie a câmpului magnetic este:

$$w_B = \mu \frac{H^2}{2} \quad (1.37)$$

Deoarece în cazul unei unde plane $H = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E$ relația (1.37) devine:

$$w_B = \mu \frac{\varepsilon E^2}{2} = \varepsilon \frac{E^2}{2} = w_E \quad (1.38)$$

Figura 1.2: Transportul energiei electromagnetice

Densitatea totală de energie în cazul unei unde plane este:

$$w = w_E + w_B = \varepsilon E^2 \quad (1.39)$$

Pentru a caracteriza propagarea energiei se va utiliza vectorul Poynting definit ca:

$$\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} \quad (1.40)$$

În cazul unei unde plane:

$$S = EH = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E^2 = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} H^2 \quad (1.41)$$

Vom arăta că vectorul Poynting este legat de transportul de energie prin unitatea de suprafață în unitatea de timp.

Fig. 1.2 arată o undă electromagnetică care se propagă cu viteza c prin aria A . Într-un mic interval de timp Δt numai energia conținută în volumul cilindric de bază A și înălțime $c\Delta t$, $w(c\Delta t)A$ va trece prin aria A . Atunci energia care trece prin unitatea de arie în unitatea de timp este:

$$\frac{wc\Delta tA}{A\Delta t} = wc$$

Tinând cont de 1.39, expresia de mai sus devine:

$$wc = \varepsilon E^2 c = \varepsilon \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E^2 = S$$

În discuția precedentă nu am ținut cont că intensitatea câmpului electric și inducția câmpului magnetic depind de timp și am considerat că peste tot densitatea de energie este aceeași.

Din acest motiv se va considera că intensitatea undelor electromagnetice este dată de valoarea medie a modulului vectorului Poynting. El reprezintă fluxul de energie ce trece prin unitatea de suprafață:

$$I = \langle |\vec{S}| \rangle = \langle |\vec{E} \times \vec{H}| \rangle \quad (1.42)$$

Cum:

$$\vec{E} \times \vec{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \vec{E} \times (\vec{u} \times \vec{E}) = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} [E^2 \vec{u} - \vec{E} (\vec{E} \vec{u})] \quad (1.43)$$

rezultă:

$$\vec{E} \times \vec{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E^2 \vec{u} \quad (1.44)$$

Atunci:

$$I = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \langle E^2 \rangle \quad (1.45)$$

Considerând pentru vectorul intensitate a câmpului electric a unei plane o reprezentare reală $E = E_0 \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ intensitatea unei electromagnetice plane este:

$$I = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E_0^2 \langle \cos^2(\omega t - \vec{k}\vec{r}) \rangle$$

Cum media temporală a cosinusului este 1/2 rezultă:

$$I = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E_0^2 \quad (1.46)$$

Vectorul Poynting poate fi utilizat pentru a caracteriza transportul de energie printr-o suprafață numai în cazul unui câmp electromagnetic variabil în timp. Să considerăm un condensator plan încărcat și plasat într-un câmp magnetic constant în timp astfel ca $\vec{E} \perp \vec{B}$. Vectorul

Poynting este diferit de zero pe o suprafață perpendiculară pe armăturile condensatorului, indicând un transport de energie. Lucrul acesta nu este adevărat deoarece câmpul electromagnetic este unul static și nu avem nici un transport de energie prin suprafața considerată.

1.1.2 Polarizarea undelor electromagnetice

Unde polarizate liniar

Undele sunt polarizate liniar dacă vectorii \vec{E} și \vec{H} păstrează o direcție determinată în spațiu în decursul propagării. Planul definit de \vec{E} și \vec{k} poartă numele de plan de polarizare.

Unde polarizate eliptic și circular

Acestea sunt undele în care vectorii \vec{E} și \vec{H} pot fi considerați ca o sumă formată din două unde perpendiculare de frecvențe egale care se propagă de-a lungul aceleiași direcții (de exemplu Oz). Astfel:

$$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 = E_{10}\vec{e}_x \cos(\omega t - kz - \varphi_1) + E_{20}\vec{e}_y \cos(\omega t - kz - \varphi_2) \quad (1.47)$$

Se schimbă originea timpului astfel încât la momentul $t = 0$ să avem $kz - \varphi_1 = 0$ și se notează cu $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ diferența de fază dintre cele două unde. Atunci:

$$\vec{E} = E_{10}\vec{e}_x \cos(\omega t) + E_{20}\vec{e}_y \cos(\omega t + \varphi) \quad (1.48)$$

Vom demonstra în general că vârful vectorului \vec{E} descrie o elipsă într-un plan perpendicular pe direcția de propagare. Considerăm componentele după cele două direcții:

$$E_x = E_{10} \cos \omega t \quad (1.49)$$

$$E_y = E_{20} \cos(\omega t - \varphi) \quad (1.50)$$

Rezultă:

$$\frac{E_y}{E_{20}} = \cos(\omega t) \cos \varphi + \sin(\omega t) \sin \varphi \quad (1.51)$$

Atunci ținând cont de (1.49) relația (1.51) devine:

$$\frac{E_y}{E_{20}} = \frac{E_x}{E_{10}} \cos \varphi + \sqrt{1 - \frac{E_x^2}{E_{10}^2}} \sin \varphi \quad (1.52)$$

Din această relație rezultă:

$$\frac{E_x^2}{E_{10}^2} + \frac{E_y^2}{E_{20}^2} - \frac{2E_x E_y}{E_{10} E_{20}} \cos \varphi = \sin^2 \varphi \quad (1.53)$$

Aceasta este ecuația unei elipse ale cărei axe sunt inclinate față de sistemul de axe Oxy. Efectuând derivatele:

$$\frac{dE_x}{dt} = -E_{10}\omega \sin(\omega t) \quad (1.54)$$

$$\frac{dE_y}{dt} = -E_{20}\omega \sin(\omega t - \varphi) \quad (1.55)$$

Se observă că la $t = 0$, $dE_x/dt = 0$ și $dE_y/dt = E_{20}\omega \sin \varphi$. Dacă $\varphi > 0$ atunci $dE_y/dt > 0$ și elipsa este parcursă în sens invers acelor de ceasornic. Spunem că există o elicitate pozitivă iar polarizarea este o polarizare stânga. Dacă $\varphi < 0$, $dE_y/dt < 0$, elipsa este parcursă în sensul acelor de ceasornic și polarizarea este dreapta.

Particularizări

a) $\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$

Atunci:

$$\frac{E_y^2}{E_{02}^2} + \frac{E_x^2}{E_{01}^2} = 1 \quad (1.56)$$

Aceasta este o elipsă raportată la axele principale de coordonate (Fig. 1.3b).

b) $\varphi = \pm \pi/2$ și $E_{10} = E_{20}$

Atunci unda este polarizată circular. Dacă $\varphi = \pi/2$ unda este polarizată circular stânga. Dacă $\varphi = -\frac{\pi}{2}$ unda este polarizată circular dreapta.

c) $\varphi = 0$ sau $\varphi = \pi$ atunci:

$$\left(\frac{E_x}{E_{10}} \mp \frac{E_y}{E_{20}} \right)^2 = 0 \quad (1.57)$$

Figura 1.3: Lumină polarizată: a) liniar b) eliptic

de unde

$$\frac{E_x}{E_y} = \pm \frac{E_{10}}{E_{20}} \quad (1.58)$$

În acest caz unda este liniar polarizată (Fig. 1.3a).

Producerea luminii polarizate

Lumina naturală O sursă obișnuită de lumină constă dintr-o mulțime de emițători atomici. Fiecare atom emite un tren de unde polarizat în timp de 10^{-8} s. Astfel sunt emise diverse trenuri de undă a căror polarizare se modifică într-o manieră care nu poate fi precizată. Deoarece aceste schimbări sunt atât de rapide trebuie să ne referim la o singură stare a luminii astfel emisă. Lumina de acest tip poartă numele de lumină naturală.

Din punct de vedere matematic lumina naturală se poate reprezenta în termenii a două unde arbitrare, liniar polarizate perpendicular una pe alta cu amplitudini egale a căror fază relativă variază aleatoriu și extrem de rapid. Se spune că cele două unde sunt necoerente.

O undă monocromatică perfectă poate fi privită ca un tren de undă infinit. Această undă poate fi descompusă în două componente perpendiculare pe direcția de propagare, cu aceiași frecvență și cu faza relativă egală cu zero. Astfel, o undă monocromatică este totdeauna polarizată.

Figura 1.4: Obținerea luminii liniar polarizate cu ajutorul unui polarizor

Polarizori. Un dispozitiv optic pe care cade lumina naturală și din care lumina iese polarizată poartă numele de polarizor.

Dacă se ține cont că lumina naturală este reprezentată de două unde necoerente iar dispozitivul permite doar trecerea unei singure unde, aparatul poartă numele de polarizor liniar. Obținerea luminii polarizate se realizează în principal prin patru mecanisme fizice: dicroismul (sau absorbția selectivă), reflexia, împrăștierea și birefringența (dubla refracție).

Legea lui Mallus Prin definiție, dacă lumina naturală este incidentă pe un polarizor ideal ca în Fig. 1.4, numai lumina din starea \mathcal{P} va putea fi transmisă. În starea \mathcal{P} vectorul \vec{E} va fi orientat după o anumită direcție numită axa de transmisie a polarizorului. Numai componenta câmpului electric paralelă cu axa de transmisie va trece prin polarizor. Dacă polarizorul se rotește răspunsul detectorului nu se va modifica datorită simetriei luminii nepolarizate.

Să presupunem că introducem un polarizor identic cu primul a cărui axă de transmisie face cu direcția axei de transmisie a primului polarizor un unghi θ . Dacă amplitudinea câmpului electric transmis prin primul polarizor este E_0 numai componenta $E_0 \cos \theta$ paralelă cu axa celui de-al doilea polarizor va trece prin acesta (Fig. 1.5). Atunci:

$$I(\theta) = E_0 \cos^2 \theta \quad (1.59)$$

Intensitatea maximă a luminii ce ajunge în final pe detector se obține

Figura 1.5: Legea lui Mallus

când $\theta = 0$. Atunci $I(0) = E_0^2$, astfel că ecuația (1.59) se scrie ca:

$$I(\theta) = I(0) \cos^2 \theta \quad (1.60)$$

Această relație este cunoscută sub numele de legea lui Mallus.

Dicroism

În sens larg termenul de dicroism se referă la absorbția selectivă a uneia din componentele unui fascicol incident.

Să considerăm o undă electromagnetică incidentă pe o rețea realizată din fire metalice ca în Fig. 1.6. Câmpul electric poate fi descompus în acest caz în două componente ortogonale. Componenta după direcția axei Oz va genera un curent în rețeaua de fire. Astfel energia câmpului electromagnetic va fi transferată firelor care se vor încălzi. În plus electronii accelerați în direcția axei Oz vor determina apariția unei radiații electromagnetice în direcție opusă propagării undei inițiale. Cum este de așteptat unda incidentă tinde să fie anulată de unda care este datorată accelerării electronilor și care se propagă în sens invers. Această radiație apare ca o undă reflectată.

Din contră, pe direcția Oy electronii nu sunt liberi să se deplaseze și din acest motiv componenta corespunzătoare câmpului rămâne neschimbată.

Ipoteza poate fi confirmată utilizând microunde și o rețea formată

Figura 1.6: Rețea de sârme paralele care acționează ca un polarizor pentru undele electromagnetice

din fire conductoare. Chiar dacă pare extrem de dificil de a se realiza acest lucru, o astfel de rețea a fost construită de G. R. Bird și M. Parrish Jr. (2160 fire pe mm); “The wire grid as a near-infrared polarizer” în *J. Opt. Soc. Am.* 50, 886 (1960).

Anumite materiale prezintă proprietatea de dicroism din cauza unei anizotropii din structura lor cristalină. Un astfel de material este turmalina. Pentru o astfel de substanță există o anumită direcție cunoscută ca axă optică, care este determinată de structura atomică a substanței. Componenta câmpului electric al undei luminoase care este perpendiculară pe axa optică este puternic absorbită. Cu cât grosimea cristalului este mai mare cu atât absorbția este mai puternică. Astfel o lamă cu fețele paralele cu axa optică cu grosimea de câțiva milimetri constituie un polarizor liniar. Axa optică devine astfel axă de transmisie. Totuși cristalele de turmalină sunt mici și în plus procesul de absorbție este dependent de lungimea de undă.

În anul 1938 Lamb a inventat folia polarizatoare de tip H care este utilizată și astăzi ca polarizor. Ea nu mai conține cristale dicroice ci molecule alungite care joacă rolul rețelei de fire. Pentru obținerea acesteia o folie de alcool polivinilic se încălzește și este întinsă pe o anumită direcție. În acest caz moleculele se aliniază în direcția respectivă. Folia este apoi introdusă într-o soluție de iod. Iodul impregnează plasticul și se atașează la capetele acestor molecule unindu-le, formând lanțuri moleculare. Electronii de conducție ai iodului se pot deplasa de-a lun-

gul acestor lanțuri, ei jucând rolul electronilor de conducție din cazul rețelei de fire. Componenta câmpului electric care este paralelă cu aceste lanțuri acționează puternic asupra electronilor astfel că ea este puternic absorbită. În folia de tip H elementele care produc dicroismul sunt molecule astfel că nu există probleme cu împrăștierea luminii. Folia de tip H este un polarizor efectiv pentru întreg spectrul vizibil, cu o eficiență mai mică în regiunea albastră.

1.2 Reflexia și refracția

Fenomenele de reflexie și refracție se petrec la suprafața de separație dintre două medii. Fenomenele fizice sunt caracterizate din punct de vedere energetic introducând noțiunile de factor de reflexie și factor de transmisie pentru un flux de energie.

Din punct de vedere formal problema se reduce la a considera condițiile la limită pentru vectorii \vec{E} și \vec{H} , condiții care se reduc la egalitatea componentelor tangențiale de o parte și de alta a suprafeței de separație a celor două medii dielectrice.

1.2.1 Unde electromagnetice la incidență normală pe suprafața de separație a două medii

Considerăm că cele două medii neconductoare și nemagnetice sunt caracterizate de permitivitățile relative ε_1 , ε_2 . Astfel, în primul mediu viteza de propagare a undei este:

$$v_1 = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_1}} = \frac{c}{n_1} \quad (1.61)$$

iar în al doilea mediu:

$$v_2 = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_2}} = \frac{c}{n_2} \quad (1.62)$$

Presupunem că unda vine din mediul 1 și cade perpendicular pe suprafața mediului 2. Ecuațiile undelor plane cu polarizare liniară pentru unda incidentă, reflectată și refractată pentru situația arătată în Fig. 1.7 sunt următoarele:

Figura 1.7: Poziția relativă a vectorilor \vec{E} , \vec{H} și \vec{u} în unda incidentă, reflectată și refractată când $n_2 < n_1$ (toți vectorii trebuie considerați în planul de separație dintre cele două medii).

$$E = E_{00} \exp [i\omega (t - z/v_1)] \quad ; \quad H = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_0}{\mu_0}} E = n_1 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E \quad (1.63)$$

$$E_1 = E_{10} \exp [i\omega_1 (t + z/v_1)] \quad ; \quad H_1 = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_0}{\mu_0}} E_1 = n_1 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_1 \quad (1.64)$$

$$E_2 = E_{20} \exp [i\omega_2 (t - z/v_2)] \quad ; \quad H_2 = \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \varepsilon_0}{\mu_0}} E_2 = n_2 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_2 \quad (1.65)$$

Ținând cont de faptul că vectorii \vec{E} , \vec{H} și $\vec{u} = \vec{k}/k$ formează un triedru drept, pentru cele trei unde (incidentă, reflectată și refractată) condițiile la limită se scriu:

$$E + E_1 = E_2 \quad (1.66)$$

$$H - H_1 = H_2 \quad (1.67)$$

Condițiile sunt scrise sub formă scalară deoarece am presupus că vectorii \vec{E} , \vec{E}_1 și \vec{E}_2 au aceeași direcție, iar vectorii \vec{H} , \vec{H}_1 și \vec{H}_2 sunt situați de-a lungul unei alte direcții care este perpendiculară pe vectorul \vec{E} .

Trebuie remarcat că sensurile vectorilor \vec{E}_1 și \vec{H}_1 sunt determinate de raportul indicilor de refracție n_1 și n_2 la orice moment de timp t . Atunci pentru suprafața $z = 0$ (adică suprafața de separație dintre cele două medii):

$$E_{00} \exp(i\omega t) + E_{10} \exp(i\omega_1 t) = E_{20} \exp(i\omega_2 t) \quad (1.68)$$

Identitatea de mai sus nu poate fi verificată decât dacă $\omega = \omega_1 = \omega_2$. Ne așteptăm la un astfel de rezultat deoarece nu există nici un motiv fizic pentru care frecvența unei incidente și reflectate să se schimbe la suprafața de separație a celor două medii.

Atunci relațiile (1.66) și (1.67) se scriu:

$$E_{00} + E_{10} = E_{20} \quad (1.69)$$

$$H_{00} - H_{10} = H_{20} \quad (1.70)$$

Cum $H_{00} = n_1 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_{00}$, $H_{10} = n_1 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_{10}$, $H_{20} = n_2 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_{20}$ ecuațiile de mai sus devin:

$$E_{00} + E_{10} = E_{20}$$

$$n_1 E_{00} - n_1 E_{10} = n_2 E_{20} \quad (1.71)$$

Rezultă:

$$E_{10} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} E_{00} \quad (1.72)$$

$$E_{20} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} E_{00} \quad (1.73)$$

Definim coeficientul de reflexie:

$$r = \frac{E_{10}}{E_{00}} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \quad (1.74)$$

și coeficientul de transmisie:

$$t = \frac{E_{20}}{E_{00}} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (1.75)$$

În cazul în care $n_1 > n_2$ vectorii \vec{E}_{10} și \vec{E}_{00} au același sens. Aceasta înseamnă că vectorii \vec{E}_1 și \vec{E} , la suprafața de separație, oscilează în fază în timp ce vectorii \vec{H} și \vec{H}_1 oscilează în opoziție de fază (diferența de fază dintre ei fiind egală cu π).

În cazul în care $n_1 < n_2$ vectorii \vec{E}_{10} și \vec{E}_{00} au sensuri contrare, ceea ce înseamnă că ei oscilează în opoziție de fază iar vectorii \vec{H} și \vec{H}_1 oscilează în fază. S-a stabilit astfel regula care în optică se enunță astfel: Dacă lumina se reflectă pe suprafața unui mediu mai refringent ($n_2 > n_1$) apare o diferență de fază egală cu π între unda incidentă și cea reflectată.

Se observă că semnul lui E_{20} coincide totdeauna cu semnul lui E_{00} , aceasta semnificând că întotdeauna unda transmisă este în fază cu unda incidentă. Definim în continuare factorul de reflexie și cel de transmisie.

Factorul de reflexie reprezintă raportul dintre fluxul mediu de energie din unda reflectată și fluxul mediu de energie din unda incidentă. Astfel:

$$R = \frac{\langle S_1 \rangle}{\langle S \rangle} = \frac{E_{10}^2}{E_{00}^2} \quad (1.76)$$

Factorul de transmisie reprezintă raportul dintre fluxul mediu de energie din unda transmisă și fluxul mediu de energie din unda incidentă. Astfel:

$$T = \frac{\langle S_2 \rangle}{\langle S \rangle} = \frac{\langle E_2 H_2 \rangle}{\langle E H \rangle} = \frac{\sqrt{\varepsilon_2} \langle E_2^2 \rangle}{\sqrt{\varepsilon_1} \langle E^2 \rangle} = \frac{n_2 E_{20}^2}{n_1 E_{00}^2} \quad (1.77)$$

Utilizând relațiile (1.74) și (1.75) se obține pentru acești coeficienți:

$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 \quad (1.78)$$

$$T = \frac{4n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2} \quad (1.79)$$

Se observă că se verifică egalitatea:

$$R + T = 1 \quad (1.80)$$

Egalitatea 1.80 este o consecință a legii conservării energiei.

Să estimăm factorul de reflexie și cel de transmisie pentru lumina ce cade din aer pe sticlă. Cum $n_1 = 1$ și $n_2 = 1,5$ obținem $R = 4\%$ și $T = 96\%$. Astfel sticla obișnuită reflectă numai o mică parte din lumina care cade pe ea.

Figura 1.8: Undă tridimensională

1.2.2 Legile reflexiei și refracției în cazul undelor electromagnetice

Considerăm o undă electromagnetică ce cade sub un unghi pe suprafața de separație a două medii dielectrice transparente. Direcția de propagare a unei electromagnetice plane este dată de vectorul de propagare \vec{u} ai cărui cosinuși directori sunt $\cos \alpha$, $\cos \beta$ și $\cos \gamma$ (Fig. 1.8)

Atunci ecuația de propagare a undei se poate scrie:

$$E = E_{00} \exp \left[i\omega \left(t - \frac{\vec{r}\vec{u}}{v_1} \right) \right] \quad (1.81)$$

sau:

$$E = E_{00} \exp \left[i\omega \left(t - \frac{x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma}{v_1} \right) \right] \quad (1.82)$$

Alegem sistemul de referință astfel încât planul xOy să fie suprafața de separație dintre cele două medii dielectrice (Fig.1.9) . Considerând

Figura 1.9: Diagramă ce ilustrează legile reflexiei și refracției: \vec{u} este versorul direcției de propagare a unei incidente, \vec{u}_1 este versorul direcției de propagare a unei reflectate, \vec{u}_2 este versorul direcției de propagare a unei refractate

că \vec{u} se află în planul xOz , $\cos \beta = 0$, relația 1.82, care descrie unda incidentă devine:

$$E = E_{00} \exp \left[i\omega \left(t - \frac{x \cos \alpha + z \cos \gamma}{v_1} \right) \right] \quad (1.83)$$

Pentru discuția ulterioară vom considera că unda este polarizată liniar iar vectorul unei incidente \vec{E} oscilează după axa Oy . Atunci unda reflectată este:

$$E_1 = E_{10} \exp \left[i\omega_1 \left(t - \frac{x \cos \alpha_1 + y \cos \beta_1 + z \cos \gamma_1}{v_1} \right) \right] \quad (1.84)$$

iar cea refractată:

$$E_2 = E_{20} \exp \left[i\omega_2 \left(t - \frac{x \cos \alpha_2 + y \cos \beta_2 + z \cos \gamma_2}{v_2} \right) \right] \quad (1.85)$$

Condiția la limită implică egalitatea componentelor tangențiale ale intensității câmpului electric pentru $z = 0$.

$$E_t + E_{t1} = E_{t2} \quad (1.86)$$

Această condiție trebuie îndeplinită pentru $z = 0$ (adică pe suprafața de separație a celor două medii) în orice moment de timp. Componentele tangențiale ale undelor incidentă, reflectată și refractată au următoarele expresii:

$$E_t = E_{00t} \exp \left[i\omega \left(t - \frac{x \cos \alpha}{v_1} \right) \right] \quad (1.87)$$

$$E_{1t} = E_{10t} \exp \left[i\omega_1 \left(t - \frac{x \cos \alpha_1 + y \cos \beta_1}{v_1} \right) \right] \quad (1.88)$$

$$E_{2t} = E_{20t} \exp \left[i\omega_2 \left(t - \frac{x \cos \alpha_2 + y \cos \beta_2}{v_2} \right) \right] \quad (1.89)$$

Egalitatea 1.86 este îndeplinită dacă:

a) Pulsațiile celor trei unde sunt egale

$$\omega = \omega_1 = \omega_2 \quad (1.90)$$

b)

$$\frac{\cos \beta_1}{v_1} = \frac{\cos \beta_2}{v_2} = 0 \quad (1.91)$$

Presupunând ca vectorul \vec{u} se află în planul Oxz rezultă că și vectorii \vec{u}_1 și \vec{u}_2 ai undei reflectate și ai celei refractate se află în planul acesta. Aceasta este prima lege a reflexiei, respectiv refracției: undele incidentă, reflectată și refractată sunt în același plan.

c) $\cos \alpha = \cos \alpha_1$ de unde rezultă $\alpha = \pm \alpha_2$

Din cele două situații posibile, cea cu semnificație corespunde cazului $\alpha = \alpha_1$. Am obținut astfel legea reflexiei undelor electromagnetice. Trecând la unghiurile complementare $\varphi = \pi/2 - \alpha$, $\varphi_1 = \pi/2 - \alpha_1$ se obține formularea uzuală a acestei legii și anume că unghiul de reflexie este egal cu unghiul de incidență: $\varphi = \varphi_1$.

d)

$$\frac{\cos \alpha}{v_1} = \frac{\cos \alpha_2}{v_2}. \quad (1.92)$$

Din Fig. 1.9 se observă că $\alpha + \varphi = \pi/2$ și $\alpha_2 + \varphi_2 = \pi/2$ atunci relația 1.92 se scrie ca:

$$\frac{\sin \varphi}{\sin \varphi_2} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{n_2}{n_1} \quad (1.93)$$

Legea obținută poartă numele de legea lui Snellius. Observăm că această lege este o consecință a condițiilor la limită impuse de legile lui Maxwell. Rezultă ca direcțiile undelor reflectată și refractată sunt bine determinate.

1.2.3 Relațiile lui Fresnel

Relațiile lui Fresnel stabilesc relații între amplitudinile undelor incidentă, reflectată și refractată.

Pentru a le deduce nu trebuie ținut cont de dependența temporală a intensității câmpului electric și magnetic. Vom formula condițiile la limită pentru proiecțiile amplitudinilor vectorilor \vec{E} și \vec{H} . Pentru aceasta asimilăm lumina nepolarizată cu o sumă de două unde plane ce se propagă în aceeași direcție și care au aceeași viteză de fază v , fiind polarizate de-a lungul a două direcții perpendiculare și a căror faze sunt independente una față de cealaltă. Este ușor de calculat la un moment dat intensitatea rezultantă a câmpului $|\vec{E}|$ cu condiția să cunoaștem cele două proiecții pe suprafața de separare a celor două medii E_{\parallel} și E_{\perp} .

$$E = \sqrt{E_{\parallel}^2 + E_{\perp}^2} \quad (1.94)$$

Invers, cunoscând pe \vec{E} putem să-l descompunem în cele două componente E_{\parallel} și E_{\perp} . Alegem cele două direcții astfel:

a) prima componentă E_{\parallel} se consideră în planul unde incidente, plan ce este determinat de normala la suprafața de separație a celor două medii și direcția de propagare a unde incidente.

b) a doua componentă E_{\perp} se consideră pe o direcție perpendiculară pe planul de incidență.

În continuare vom analiza ce se petrece cu fiecare din cele două componente:

1) *componenta din planul de incidență*

Alegerea direcțiilor vectorilor \vec{E}_{\parallel} , $\vec{E}_{1\parallel}$ și $\vec{E}_{2\parallel}$ este prezentată în Fig. 1.10. Aceste direcții vor fi fixate atunci când se va face discuția finală.

Figura 1.10: Direcțiile vectorilor \vec{E} și \vec{H} la suprafața de separație a două medii când vectorul \vec{E} se află în planul de incidență

Fixarea orientării acestor vectori determină și fixarea orientării vectorilor \vec{H} , \vec{H}_1 și \vec{H}_2 . În cazul considerat vectorii sunt perpendiculari pe planul de incidență. Vom pune condițiile la limită pentru proiecțiile vectorilor \vec{E} și \vec{H} în planul Ozx . Pentru ușurarea scrierii vom renunța la indicele "paralel" (\parallel). Condițiile la limită sunt:

$$E_{00} \cos \varphi_1 - E_{10} \cos \varphi_1 = E_{20} \cos \varphi_2 \quad (1.95)$$

$$H_{00} + H_{10} = H_{20} \quad (1.96)$$

Considerăm că lumina se propagă în medii nemagnetice:

$$\begin{aligned} H_{00} &= n_1 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_{00} \\ H_{10} &= n_1 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_{10} \\ H_{20} &= n_2 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_{20} \end{aligned} \quad (1.97)$$

Astfel relația (1.96) devine:

$$E_{00} + E_{10} = \frac{n_2}{n_1} E_{20} \quad (1.98)$$

Ținând cont de legea refracției din acest caz:

$$\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} = \frac{n_2}{n_1} \quad (1.99)$$

relația (1.98) devine:

$$E_{00} + E_{10} = E_{20} \frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} \quad (1.100)$$

Deoarece relația (1.95) se mai scrie:

$$E_{00} - E_{10} = E_{20} \frac{\cos \varphi_2}{\cos \varphi_1} \quad (1.101)$$

din (1.100) și (1.101) se obține:

$$\frac{E_{00} - E_{10}}{E_{00} + E_{10}} = \frac{\sin \varphi_2 \cos \varphi_2}{\sin \varphi_1 \cos \varphi_1} = \frac{\sin 2\varphi_2}{\sin 2\varphi_1} \quad (1.102)$$

Astfel se obține:

$$E_{10} = E_{00} \frac{\sin 2\varphi_1 - \sin 2\varphi_2}{\sin 2\varphi_1 + \sin 2\varphi_2} = E_{00} \frac{\sin (\varphi_1 - \varphi_2) \cos (\varphi_1 + \varphi_2)}{\sin (\varphi_1 + \varphi_2) \cos (\varphi_1 - \varphi_2)} \quad (1.103)$$

Atunci:

$$E_{10} = E_{00} \frac{\operatorname{tg} (\varphi_1 - \varphi_2)}{\operatorname{tg} (\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.104)$$

Adunând relațiile (1.100) și (1.101) se obține:

$$2E_{00} = E_{20} \left(\frac{\cos \varphi_2}{\cos \varphi_1} + \frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} \right) \quad (1.105)$$

de unde:

$$E_{20} = E_{00} \frac{2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_2}{\sin (\varphi_1 + \varphi_2) \cos (\varphi_1 - \varphi_2)} \quad (1.106)$$

Ținem cont că avem de-a face cu componentele paralele cu planul de incidență. Atunci relațiile (1.104) și (1.106) se rescriu:

Figura 1.11: Direcțiile vectorilor \vec{E} și \vec{H} la suprafața de separație a două medii când vectorul \vec{E} este perpendicular pe planul de incidență

$$(E_{10})_{\parallel} = (E_{00})_{\parallel} \frac{\operatorname{tg}(\varphi_1 - \varphi_2)}{\operatorname{tg}(\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.107)$$

$$(E_{20})_{\parallel} = (E_{00})_{\parallel} \frac{2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_2}{\sin(\varphi_1 + \varphi_2) \cos(\varphi_1 - \varphi_2)} \quad (1.108)$$

Se pot exprima astfel coeficienții de reflexie și de transmisie:

$$r_{\parallel} = \frac{E_{10}}{E_{00}} = \frac{\operatorname{tg}(\varphi_1 - \varphi_2)}{\operatorname{tg}(\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.109)$$

$$t_{\parallel} = \frac{E_{20}}{E_{00}} = \frac{2 \cos \varphi_1 \sin \varphi_2}{\sin(\varphi_1 + \varphi_2) \cos(\varphi_1 - \varphi_2)} \quad (1.110)$$

2) *componenta perpendiculară pe planul de incidență*

În acest caz direcțiile vectorilor \vec{H} , \vec{H}_1 și \vec{H}_2 sunt reprezentate în Fig. 1.11 iar vectorii intensitate câmp electric sunt normali pe planul de incidență:

Condițiile la limită satisfăcute de aceștia la suprafața de separație a celor două medii dielectrice sunt:

$$E_{00} + E_{10} = E_{20} \quad (1.111)$$

$$H_{00} \cos \varphi_1 - H_{10} \cos \varphi_1 = H_{20} \cos \varphi_2 \quad (1.112)$$

Relațiile dintre intensitățile câmpurilor electrice și intensitățile câmpurilor magnetice sunt date de (1.97) astfel încât egalitatea (1.112) se poate scrie:

$$n_1 E_{00} \cos \varphi_1 - n_1 E_{10} \cos \varphi_1 = n_2 E_{20} \cos \varphi_2 \quad (1.113)$$

sau:

$$E_{00} - E_{10} = E_{20} \frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1} = E_{20} \frac{\cos \varphi_2 \sin \varphi_1}{\cos \varphi_1 \sin \varphi_2} \quad (1.114)$$

Adunând (1.111) cu (1.114) se obține:

$$2E_{00} = E_{20} \frac{\sin \varphi_2 \cos \varphi_1 + \cos \varphi_2 \sin \varphi_1}{\cos \varphi_1 \sin \varphi_2}$$

de unde:

$$E_{20} = E_{00} \frac{2 \sin \varphi_2 \cos \varphi_1}{\sin (\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.115)$$

Prin scăderea relațiilor (1.111) și (1.114) rezultă:

$$2E_{10} = E_{20} \left(1 - \frac{\cos \varphi_2 \sin \varphi_1}{\cos \varphi_1 \sin \varphi_2} \right) \quad (1.116)$$

de unde ținând cont de expresia lui E_{20} se obține:

$$E_{10} = -E_{00} \frac{\sin (\varphi_1 - \varphi_2)}{\sin (\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.117)$$

Deoarece am avut de-a face cu componentele perpendiculare pe planul de incidență atunci vom rescrie relațiile (1.115) și (1.117) astfel:

$$(E_{20})_{\perp} = (E_{00})_{\perp} \frac{2 \sin \varphi_2 \cos \varphi_1}{\sin (\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.118)$$

$$(E_{10})_{\perp} = -(E_{00})_{\perp} \frac{\sin (\varphi_1 - \varphi_2)}{\sin (\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.119)$$

Coefficienții de reflexie și transmisie sunt:

$$r_{\perp} = -\frac{\sin(\varphi_1 - \varphi_2)}{\sin(\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.120)$$

$$t_{\perp} = \frac{2 \sin \varphi_2 \cos \varphi_1}{\sin(\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (1.121)$$

1.2.4 Interpretarea relațiilor lui Fresnel

Coefficienții de reflexie și transmisie

Vom examina forma coeficienților de reflexie și transmisie pentru întreg domeniul de valori al unghiului de incidență $\varphi_1 \in [0, \pi/2]$. Considerăm cazurile:

a) Indicele de refracție al mediului pe care cade lumina este mai mare decât al mediului din care vine lumina ($n_2 > n_1$). Atunci din legea refracției se obține $\varphi_1 > \varphi_2$. Rezultă că pentru toate valorile lui φ , $r_{\perp} < 0$.

În cazul incidenței normale $\varphi_1 \rightarrow 0$, $\varphi_2 \rightarrow 0$, r_{\parallel} este dat de relația (1.74):

$$[r_{\parallel}]_{\varphi_1 \rightarrow 0} = \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \quad (1.122)$$

Astfel r_{\parallel} pornește de la o valoare pozitivă când $\varphi_1 = 0$ și descrește la zero când $\varphi_1 + \varphi_2 = \frac{\pi}{2}$ deoarece la $\frac{\pi}{2}$ tangenta este ∞ . Această valoare particulară a unghiului de incidență $\varphi_1 = \varphi_B$ poartă numele de unghi de incidență Brewster. Aceasta înseamnă că la acest unghi nu există componenta \vec{E}_{\parallel} a câmpului electric din unda reflectată. Pentru acest unghi de incidență lumina reflectată va conține numai vectorii \vec{E} care oscilează perpendicular pe planul de incidență. Când unghiul φ_1 crește peste valoarea φ_B , r_{\parallel} devine negativ atingând valoarea -1 când $\varphi_1 = \pi/2$.

Pentru a studia modul de variație al coeficienților de transmisie vom prelucra pe rând expresiile (1.121) și (1.110). Astfel pentru coeficientul de transmisie perpendicular se obține:

$$t_{\perp} = \frac{2 \sin \varphi_2 \cos \varphi_1}{\sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2} = \frac{2 \cos \varphi_1}{\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1} =$$

$$t_{\perp} = \frac{2n_1 \cos \varphi_1}{n_2 \cos \varphi_2 + n_1 \cos \varphi_1}$$

Când $\varphi_1 \rightarrow 0$, $\varphi_2 \rightarrow 0$ și $\cos \varphi_1 \simeq \cos \varphi_2 \simeq 1$

$$(t_{\perp})_{\varphi_1=0} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (1.123)$$

Când $\varphi_1 \rightarrow \pi/2$, $\cos \varphi_1 \rightarrow 0$ și $t_{\perp} \rightarrow 0$.

Pentru coeficientul de transmisie paralel se obține:

$$t_{\parallel} = \frac{2 \sin \varphi_2 \cos \varphi_1}{(\sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2) \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}$$

$$t_{\parallel} = \frac{2 \cos \varphi_1}{\left(\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1\right) \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}$$

$$t_{\parallel} = \frac{2n_1 \cos \varphi_1}{(n_2 \cos \varphi_2 + n_1 \cos \varphi_1) \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}$$

Când $\varphi_1 \rightarrow 0$, $\varphi_2 \simeq \varphi_1 \simeq \varphi_1 - \varphi_2 \simeq 0$

$$t_{\parallel} = \frac{2n_1}{n_2 + n_1} \quad (1.124)$$

Când $\varphi_1 \rightarrow \pi/2$, $\cos \varphi_1 \rightarrow 0$ și $t_{\parallel} \rightarrow 0$.

Când unghiul de incidență φ_1 crește coeficienții de transmisie scad. În Fig. 1.12 sunt reprezentați coeficienții de transmisie și reflexie în cazul $n_2 > n_1$.

b) Indicele de refracție al mediului pe care cade lumina este mai mic decât al mediului din care vine lumina ($n_2 < n_1$). Atunci $\varphi_2 > \varphi_1$ și r_{\perp} va fi pozitiv. El crește de la valoarea sa inițială și atinge valoarea sa maximă la un unghi numit unghi limită φ_l . Unghiul limită φ_l este unghiul pentru care unghiul de refracție $\varphi_2 = \pi/2$. Pentru $\varphi > \varphi_l$ nu mai există rază refractată, indiferent de modul în care oscilează vectorul

Figura 1.12: Coeficienții de reflexie și transmisie în funcție de unghiul de incidență la interfața aer ($n_1 = 1$)- sticlă ($n_2 = 1,5$)

\vec{E} . Spunem că are loc fenomenul de reflexie totală. Din acest motiv $r_{\parallel} = 1$ și $r_{\perp} = 1$.

Coeficientul de reflexie paralel este inițial negativ. El devine zero când $\varphi_1 = \varphi'_B$ pentru care $\text{tg}(\varphi'_B + \varphi_2) \rightarrow \infty$, deoarece $\varphi'_B + \varphi_2 = \pi/2$. El atinge valoarea 1 pentru $\varphi = \varphi_l$.

Variația acestor coeficienți pentru acest caz este reprezentată în Fig. 1.13.

Modificarea fazei

În cazul în care $n_2 > n_1$ din ecuația (1.120) rezultă $r_{\perp} < 0$. Altfel spus $\vec{E}_{1\perp}$ are sens opus față de $\vec{E}_{0\perp}$. Aceasta înseamnă că între unda incidentă $\vec{E}_{0\perp}$ și unda reflectată $\vec{E}_{1\perp}$ există o diferență de fază egală cu π .

Astfel componenta normală pe planul de incidență suferă un salt de fază egal cu π prin reflexie când indicele de refracție al mediului din care vine lumina este mai mic decât al mediului pe care aceasta cade.

Deoarece t_{\perp} și t_{\parallel} sunt întotdeauna pozitivi, diferența de fază dintre unda incidentă și cea transmisă este $\Delta\varphi = 0$.

Lucrurile sunt mai puțin evidente pentru cazul undelor ce oscilează în planul de incidență $\vec{E}_{0\parallel}$, $\vec{E}_{1\parallel}$, și $\vec{E}_{2\parallel}$. Este necesar să definim ce înseamnă

Figura 1.13: Coeficienții de reflexie funcție de unghiul de incidență la interfața sticlă ($n_1 = 1,5$)- aer ($n_2 = 1$)

că vectorii sunt în fază, deoarece vectorii sunt coplanari dar nu sunt colineari.

Pentru aceasta vom ține cont de faptul că pentru unda plană:

$$\vec{E} = -\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} (\vec{u} \times \vec{H})$$

Din această relație rezultă că $\vec{E} \perp \vec{H}$, iar \vec{E} este în opoziție de fază cu \vec{H} . Din Fig. 1.10 se observă că vectorii \vec{H} , \vec{H}_1 , \vec{H}_2 sunt în fază. Din acest motiv și vectorii \vec{E} , \vec{E}_1 și \vec{E}_2 sunt în fază. Dacă doi dintre vectorii intensitate câmp magnetic sunt în opoziție de fază, atunci și vectorii intensitate a câmpului electric corespunzători sunt în opoziție de fază. Având în vedere relațiile (1.97), (1.109) și (1.110):

$$H_{10} = r_{\parallel} H_{00}$$

$$H_{20} = \frac{n_2}{n_1} t_{\parallel} H_{00}$$

Astfel dacă $r_{\parallel} > 0$, H_{00} și H_{10} sunt în fază, și E_{00} și E_{10} sunt în fază. Dacă $r_{\parallel} < 0$, H_{00} și H_{10} sunt în opoziție de fază, și E_{00} și E_{10} sunt în

Figura 1.14: Defazaajul pentru componentele paralele și perpendiculare ale câmpului electric

opoziiție de fază.

Coeficientul de reflexie se poate exprima astfel:

$$\begin{aligned}
 r_{\parallel} &= \frac{\operatorname{tg}(\varphi_1 - \varphi_2)}{\operatorname{tg}(\varphi_1 + \varphi_2)} = \frac{\sin(\varphi_1 - \varphi_2) \cos(\varphi_1 + \varphi_2)}{\cos(\varphi_1 - \varphi_2) \sin(\varphi_1 + \varphi_2)} \\
 r_{\parallel} &= \frac{\sin 2\varphi_1 - \sin 2\varphi_2}{\sin 2\varphi_1 + \sin 2\varphi_2} = \frac{\sin \varphi_1 \cos \varphi_1 - \sin \varphi_2 \cos \varphi_2}{\sin \varphi_1 \cos \varphi_1 + \sin \varphi_2 \cos \varphi_2} \\
 r_{\parallel} &= \frac{\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} \cos \varphi_1 - \cos \varphi_2}{\frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} \cos \varphi_1 + \cos \varphi_2} = \frac{\frac{n_2}{n_1} \cos \varphi_1 - \cos \varphi_2}{\frac{n_2}{n_1} \cos \varphi_1 + \cos \varphi_2} \\
 r_{\parallel} &= \frac{n_2 \cos \varphi_1 - n_1 \cos \varphi_2}{n_2 \cos \varphi_1 + n_1 \cos \varphi_2} \tag{1.125}
 \end{aligned}$$

Pentru ca unda reflectată și cea incidentă să fie în fază ($\Delta\varphi_{\parallel} = 0$) este necesar ca $r_{\parallel} > 0$, adică:

$$n_2 \cos \varphi_1 - n_1 \cos \varphi_2 > 0$$

Dacă se ține cont de legea refracției se obține:

$$\sin \varphi_1 \cos \varphi_1 - \cos \varphi_2 \sin \varphi_2 > 0$$

sau;

$$\sin(\varphi_1 - \varphi_2) \cos(\varphi_1 + \varphi_2) > 0$$

Când $n_1 < n_2$ acest lucru se petrece dacă:

$$(\varphi_1 + \varphi_2) < \pi/2$$

Când $n_1 > n_2$ acest lucru se petrece când:

$$(\varphi_1 + \varphi_2) > \pi/2$$

Astfel dacă $n_1 < n_2$, \vec{E}_{\parallel} și $\vec{E}_{1\parallel}$ vor fi în fază ($\Delta\varphi_{\parallel} = 0$) când $\varphi_1 < \varphi_B$ și vor fi în opoziție de fază când $\varphi_1 > \varphi_B$.

În cazul că $n_1 > n_2$, r_{\parallel} este negativ când $\varphi_1 < \varphi'_B$ ceea ce înseamnă că \vec{E}_{\parallel} și $\vec{E}_{1\parallel}$ vor fi în opoziție de fază ($\Delta\varphi_{\parallel} = \pi$) și r_{\parallel} este pozitiv când $\varphi_1 > \varphi'_B$ și $\varphi_1 < \varphi_l$. Pentru unghiuri de incidență mai mari decât unghiul limită φ_l , r_{\parallel} devine complex și $\Delta\varphi_{\parallel}$ crește până la π .

În cazul $n_1 > n_2$ coeficientul r_{\perp} este pozitiv pentru unghiuri mai mici decât unghiul limită φ_l ceea ce înseamnă că $\Delta\varphi = 0$. Pentru unghiuri mai mari decât φ_l , r_{\perp} devine complex, iar defazajul crește de la 0 la $\pi/2$. În Fig. 1.14 sunt reprezentate defazaajele.

Factorii de reflexie și transmisie

Să considerăm un fascicol de lumină cilindric incident pe o suprafață cum este reprezentat în Fig. 1.15. Deoarece intensitatea a fost definită ca energia medie ce traversează în unitatea de timp unitatea de suprafață perpendiculară pe direcția de propagare, puterea undei incidente este:

$$P = IA \cos \varphi_1 \quad (1.126)$$

unde I este intensitatea undei.

În mod analog $I_1 A \cos \varphi_1$ este puterea undei reflectate, I_1 fiind intensitatea undei reflectate, iar $I_2 A \cos \varphi_2$ este puterea undei transmise, unde I_2 este intensitatea undei refractate.

Figura 1.15: Reflexia și transmisia unui fascicol incident

Definim factorul de reflecție R ca fiind raportul dintre puterea undei reflectate și puterea undei incidente:

$$R = \frac{I_1 A \cos \varphi_1}{I A \cos \varphi_1} = \frac{I_1}{I} \quad (1.127)$$

Factorul de transmisie este raportul dintre puterea undei refractate și puterea undei incidente:

$$T = \frac{I_2 A \cos \varphi_2}{I A \cos \varphi_1} = \frac{I_2 \cos \varphi_2}{I \cos \varphi_1} \quad (1.128)$$

În cazul mediilor nemagnetice $I \sim \sqrt{\varepsilon} E^2 \sim n E^2$

Atunci:

$$R = \left(\frac{E_{01}}{E_{00}} \right)^2 = r^2 \quad (1.129)$$

și:

$$T = \frac{n_2}{n_1} \left(\frac{E_{02}}{E_{00}} \right)^2 \frac{\cos \varphi_2}{\cos \varphi_1} = \frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1} \left(\frac{E_{02}}{E_{00}} \right)^2 = \frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1} t^2 \quad (1.130)$$

Legea conservării energiei se scrie considerând situația din Fig. 1.15:

$$I A \cos \varphi_1 = I_1 A \cos \varphi_1 + I_2 A \cos \varphi_2 \quad (1.131)$$

sau:

$$n_1 E_{00}^2 \cos \varphi_1 = n_1 E_{01}^2 \cos \varphi_1 + n_2 E_{02}^2 \cos \varphi_2$$

$$1 = \left(\frac{E_{01}}{E_{00}} \right)^2 + \frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1} \left(\frac{E_{02}}{E_{00}} \right)^2 = r^2 + \frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1} t^2 \quad (1.132)$$

$$1 = T + R \quad (1.133)$$

Relația 1.133 este valabilă în lipsa absorbției.

Este util să se utilizeze factorii de reflexie și transmisie pentru unde în care \vec{E} oscilează paralel sau perpendicular pe planul de incidență. Astfel:

$$R_{\parallel} = r_{\parallel}^2 \quad (1.134)$$

$$R_{\perp} = r_{\perp}^2 \quad (1.135)$$

$$T_{\perp} = \frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1} t_{\perp}^2 \quad (1.136)$$

$$T_{\parallel} = \frac{n_2 \cos \varphi_2}{n_1 \cos \varphi_1} t_{\parallel}^2 \quad (1.137)$$

Dacă $\varphi_1 + \varphi_2 = \pi/2$ se observă ca $R_{\parallel} = 0$ în timp ce R_{\perp} nu se anulează. Aceasta duce la concluzia că pentru un anumit unghi de incidență suprafața nu reflectă decât o undă electromagnetică polarizată și anume cu vectorul \vec{E} perpendicular pe planul de incidență. Unda incidentă paralelă cu planul de incidență nu va suferi nici o reflexie în acest caz. Vectorul \vec{E} al undei reflectate va vibra într-un plan perpendicular pe planul de incidență. De aici rezultă legea lui Brewster.

Cum $\varphi_1 + \varphi_2 = \pi/2$ atunci $\sin \varphi_2 = \cos \varphi_1$. Din legea reflexiei se obține:

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2} = \frac{\sin \varphi_1}{\cos \varphi_1} = \operatorname{tg} \varphi_1 \quad (1.138)$$

Rezultă că pentru un anumit unghi care satisface relația de mai sus unda reflectată este polarizată rectiliniu perpendicular pe planul de incidență. Acest unghi poartă numele de unghi Brewster. În Fig. 1.16 sunt reprezentați factorii de transmisie și reflexie în cazul $n_1 > n_2$.

Figura 1.16: Factorii de transmisie și reflexie.

1.2.5 Reflexia totală

În cazul în care lumina provine dintr-un mediu cu indicele de refracție mai mare decât al mediului pe care are loc reflexia ($n_1 > n_2$) există un unghi de incidență limită $\varphi = \varphi_l$ pentru care $\varphi_2 = \pi/2$ și direcția unei refractate este tangentă la suprafața de separație a celor două medii:

$$\sin \varphi_2 = \frac{n_1}{n_2} \sin \varphi \quad (1.139)$$

Cum $n_1/n_2 > 1$, iar valoarea maximă pe care o poate lua $\sin \varphi_2$ este 1, atunci valoarea maximă a unghiului de incidență corespunzătoare acestui caz este:

$$\sin \varphi = \sin \varphi_l = \frac{n_2}{n_1} \quad (1.140)$$

Când $\varphi > \varphi_l$ are loc reflexia totală. Tot fluxul incident este reflectat și nu există undă refractată. Astfel, energia unei incidente rămâne în totalitate în interiorul primului mediu.

Două exemple simple pun în evidență acest fenomen. În Fig. 1.17 sunt reprezentate prisme de sticlă în care lumina suferă o reflexie totală.

Când lumina vine din interiorul sticlei, unghiul limită este $\varphi_l = 42^\circ$. Rezultă că lumina ce cade sub unghiuri de 45° pe fețele interioare ale prismelor suferă reflexie totală.

O aplicație practică a fenomenului sunt fibrele optice (Fig. 1.18) în care lumina suferă reflexii totale ori de câte ori ea ajunge la suprafața

Figura 1.17: Prisme cu reflexie totală

Figura 1.18: Fibră optică

acestora. Fibrele optice sunt folosite în transmisia informației printr-un semnal modulat. Pentru aceasta este necesar ca ele să fie de o puritate extremă, pentru că eventualele neomogenități și incluziuni de aer duc la pierderi mari de energie.

Efectul reflexiei totale permite explicarea reflexiei suferite de undele radio în atmosferă. Se știe că la o altitudine cuprinsă între 100 și 300 km deasupra Pământului se găsește o pătură ionizată ce reflectă undele radio cu $\lambda > 10$ m. Undele foarte scurte ce sosesc din spațiu pot traversa ionosfera.

Studiul undei refractate

Este inexact să se considere că fluxul total de energie nu penetrează deloc în cel de-al doilea mediu și că el este în totalitate reflectat la suprafața de separație a celor două medii. Vom demonstra că în cazul reflexiei totale unda electromagnetică pătrunde puțin în cel de-al doilea mediu și se propagă de-a lungul suprafeței de separare a celor două medii.

Pentru aceasta vom scrie expresia caracteristică a undei refractate în mediul al doilea care se propagă în direcția Ox' (Fig.1.19):

Figura 1.19: Diagrama ce ilustrează refracția pe un mediu cu indice de refracție mai mare $n_2 > n_1$

$$E_2 = E_{20} \exp \left[i\omega \left(t - \frac{x'}{v_2} \right) \right]$$

$$E_2 = E_{20} \exp \left[i\omega \left(t - \frac{x \sin \varphi_2 + z \cos \varphi_2}{v_2} \right) \right]$$

$$E_2 = E_{20} \exp \left(-\frac{i\omega z \cos \varphi_2}{v_2} \right) \exp \left[i\omega \left(t - \frac{x}{v_2 / \sin \varphi_2} \right) \right] \quad (1.141)$$

În această expresie primii doi factori definesc amplitudinea unei unde care se propagă de-a lungul axei Ox cu viteza $v_2 / \sin \varphi_2$. Amplitudinea complexă depinde de coordonata z care caracterizează adâncimea de penetrație a undeii în mediul al doilea. Această undă poartă numele de undă **evanescentă**.

Deoarece în cazul reflexiei totale $\sin \varphi > \sin \varphi_l = n_2/n_1$, adică

$$(n_1 \sin \varphi) / n_2 > 1$$

atunci:

$$\cos \varphi_2 = \pm \sqrt{1 - \sin^2 \varphi_2} = \pm \sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2} \sin \varphi \right)^2} \quad (1.142)$$

$$\cos \varphi_2 = \pm i \sqrt{\left(\frac{n_1}{n_2} \sin \varphi \right)^2 - 1} \quad (1.143)$$

Pentru $\varphi > \varphi_l$ radicalul din (1.143) este o mărime pozitivă. Atunci amplitudinea unei considerate devine o amplitudine reală:

$$A = E_{20} \exp\left(-\frac{i\omega z \cos \varphi_2}{v_2}\right) = E_{20} \exp\left[\pm \frac{\omega z}{v_2} \sqrt{\left(\frac{n_1}{n_2} \sin \varphi\right)^2 - 1}\right] \quad (1.144)$$

$$A = E_{20} \exp\left[\pm \frac{2\pi z}{\lambda} \sqrt{\left(\frac{n_1}{n_2} \sin \varphi\right)^2 - 1}\right] \quad (1.145)$$

Semnul plus din exponentul funcției exponențiale de mai sus corespunde unei creșteri infinite a amplitudinii în mediul al doilea, fapt ce nu are semnificație fizică. Semnul minus corespunde unei funcții a cărei amplitudine scade rapid cu distanța în mediul al doilea pornind de la suprafața de separație a celor două medii.

Aceasta înseamnă că în mediul al doilea unda există doar într-un strat superficial a cărui grosime este de ordinul lungimii de undă a radiației.

Studiul undei reflectate

Vom porni de la formulele lui Fresnel:

$$\frac{(E_{10})_{\parallel}}{(E_{00})_{\parallel}} = \frac{\operatorname{tg}(\varphi_1 - \varphi_2)}{\operatorname{tg}(\varphi_1 + \varphi_2)} = \frac{\sin 2\varphi_1 - \sin 2\varphi_2}{\sin 2\varphi_1 + \sin 2\varphi_2} \quad (1.146)$$

$$\frac{(E_{10})_{\parallel}}{(E_{00})_{\parallel}} = \frac{\sin \varphi \cos \varphi - \sin \varphi_2 \cos \varphi_2}{\sin \varphi \cos \varphi + \sin \varphi_2 \cos \varphi_2} \quad (1.147)$$

Ținând cont că $\sin \varphi_2 = \frac{n_1}{n_2} \sin \varphi$ și de relația (1.143) obținem din (1.147):

$$\frac{(E_{10})_{\parallel}}{(E_{00})_{\parallel}} = \frac{n_{12}^2 \cos \varphi + i\sqrt{\sin^2 \varphi - n_{12}^2}}{n_{12}^2 \cos \varphi - i\sqrt{\sin^2 \varphi - n_{12}^2}} \quad (1.148)$$

unde $n_{12} = \frac{n_2}{n_1} < 1$.

Analog din:

$$\frac{(E_{10})_{\perp}}{(E_{00})_{\perp}} = -\frac{\sin(\varphi - \varphi_2)}{\sin(\varphi + \varphi_2)} = -\frac{\sin \varphi \cos \varphi_2 - \sin \varphi_2 \cos \varphi}{\sin \varphi \cos \varphi_2 + \sin \varphi_2 \cos \varphi} \quad (1.149)$$

obținem:

$$\frac{(E_{10})_{\perp}}{(E_{00})_{\perp}} = \frac{\cos \varphi + i\sqrt{\sin^2 \varphi - n_{12}^2}}{\cos \varphi - i\sqrt{\sin^2 \varphi - n_{12}^2}} \quad (1.150)$$

Atunci pentru unghiuri de incidență mai mari decât unghiul limită $\varphi > \varphi_l$ avem:

$$\left| \frac{(E_{10})_{\parallel}}{(E_{00})_{\parallel}} \right| = \left| \frac{(E_{10})_{\perp}}{(E_{00})_{\perp}} \right| = 1 \quad (1.151)$$

Aceasta înseamnă că în cazul unei reflexii totale fluxul de energie se întoarce în primul mediu. Când are loc un proces staționar nu este necesar să se țină cont de fracția de energie ce trece în al doilea mediu.

Pentru a studia dependența factorului de reflexie de unghiul de incidență φ considerăm un caz concret și anume trecerea luminii din sticlă în aer ($n_2 < n_1$). Unghiul Brewster se determină din relația $\operatorname{tg} \varphi_B = n_{12}$ și rezultă $\varphi_B = 33^\circ$. Unghiul limită pentru sticlă este $\varphi_l = 42^\circ$.

Dependența de unghiul φ al factorilor de reflexie:

$$R_{\parallel} = \left| \frac{(E_{10})_{\parallel}}{(E_{00})_{\parallel}} \right|^2 \quad (1.152)$$

$$R_{\perp} = \left| \frac{(E_{10})_{\perp}}{(E_{00})_{\perp}} \right|^2 \quad (1.153)$$

se obține utilizând formulele (1.148) și (1.149) și este prezentată în Fig.1.20:

Analizând aceste formule se ajunge la concluzia că pentru $\varphi = 0$ factorul de reflexie este de 4%. Pentru $\varphi = \varphi_B$, $R_{\parallel} = 0$, ceea ce înseamnă că nu se reflectă decât undele pentru care vectorul \vec{E} oscilează pe o direcție perpendiculară pe planul de incidență ($R_{\perp} \neq 0$).

Când $\varphi \rightarrow \varphi_l$ (și nu când $\varphi \rightarrow \pi/2$ ca în cazul $n_2 > n_1$) fluxul de energie este reflectat în totalitate, dând loc unui fenomen de reflexie totală.

Figura 1.20: Dependența factorilor de reflexie funcție de unghiul de incidență

Pentru a stabili relația dintre fazele undelor este comod să se lucreze cu numere complexe. Pentru aceasta vom ține cont că:

$$|z| = 1, \quad z = \frac{a + ib}{a - ib} = e^{i\delta}, \quad \operatorname{tg} \frac{\delta}{2} = \frac{a}{b}$$

Un efect al reflexiei totale este schimbarea stării de polarizare a radiației. Vom demonstra că o undă polarizată liniar se transformă într-o undă polarizată eliptic. Introducem notațiile:

$$\frac{(E_{10})_{\parallel}}{(E_{00})_{\parallel}} = \exp(i\delta_{\parallel}) \quad (1.154)$$

$$\frac{(E_{10})_{\perp}}{(E_{00})_{\perp}} = \exp(i\delta_{\perp}) \quad (1.155)$$

Dacă se consideră pentru unda incidentă faza inițială nulă, δ_{\parallel} și δ_{\perp} fazele undelor reflectate se obține:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{\delta_{\parallel}}{2} \right) = \frac{\sqrt{\sin^2 \varphi - n_{12}^2}}{n_{12}^2 \cos \varphi} \quad (1.156)$$

$$\operatorname{tg} \left(\frac{\delta_{\perp}}{2} \right) = \frac{\sqrt{\sin^2 \varphi - n_{12}^2}}{\cos \varphi} \quad (1.157)$$

De aici rezultă ca $\delta_{\parallel} \neq \delta_{\perp}$, adică fazele componentelor reflectate E_{\parallel} și E_{\perp} nu sunt egale, ceea ce implică faptul că unda reflectată este eliptic

polarizată. Notăm cu $\delta = \delta_{\parallel} - \delta_{\perp}$ diferența de fază între componenta paralelă și cea perpendiculară. Atunci:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{\delta}{2} \right) = \operatorname{tg} \left(\frac{\delta_{\parallel}}{2} - \frac{\delta_{\perp}}{2} \right) = \frac{\operatorname{tg} \left(\frac{\delta_{\parallel}}{2} \right) - \operatorname{tg} \left(\frac{\delta_{\perp}}{2} \right)}{1 + \operatorname{tg} \left(\frac{\delta_{\parallel}}{2} \right) \operatorname{tg} \left(\frac{\delta_{\perp}}{2} \right)} \quad (1.158)$$

$$\operatorname{tg} \left(\frac{\delta}{2} \right) = \frac{\cos \varphi \sqrt{\sin^2 \varphi - n_{12}^2}}{\sin^2 \varphi} \quad (1.159)$$

Se observă că $\operatorname{tg} \left(\frac{\delta}{2} \right)$ se anulează de două ori

- a) pentru $\varphi = \varphi_l$, deoarece $\sin \varphi_l = n_{12}$
- b) pentru $\varphi = \pi/2$, deoarece $\cos \frac{\pi}{2} = 0$ (aceasta este incidență razantă)

Pentru a obține valoarea lui φ pentru care δ este maxim egalăm cu zero derivata la φ a expresiei (1.159):

$$\frac{d}{d\varphi} \operatorname{tg} \left(\frac{\delta}{2} \right) = 0 \quad (1.160)$$

Se obține:

$$\sin^2 \varphi_m = \frac{2n_{12}^2}{1 + n_{12}^2} \quad (1.161)$$

$$\operatorname{tg} \frac{\delta_m}{2} = \frac{1 - n_{12}^2}{2n_{12}} \quad (1.162)$$

Atunci, rezultă că cu cât este mai mare diferența între indicii de refracție ai celor două medii, cu atât este mai mare defazajul între cele două vibrații:

Pentru a obține o polarizare circulară este necesar ca:

$$\delta_m = \frac{\pi}{2} \quad (1.163)$$

$$\operatorname{tg} \frac{\delta_m}{2} = 1 \quad (1.164)$$

Figura 1.21: $\delta = \delta_{\parallel} - \delta_{\perp}$ în funcție de unghiul de incidență φ

Rezultă că diferența dintre indicii de refracție ai celor două medii trebuie să fie foarte mare. Din (1.164) și (1.1620) rezultă:

$$\frac{1 - n_{12}^2}{2n_{12}} = 1 \quad (1.165)$$

Din această relație rezultă $n_{12} = 0,4$, valoare care în gama opticii geometrice este realizabilă în cazul trecerii luminii din diamant ($n_1 = 2,4$) în aer ($n_2 = 1$).

În Fig.1.21 este reprezentat $\delta = \delta_{\parallel} - \delta_{\perp}$ în funcție de unghiul de incidență. În cazul unei reflexii la suprafața sticlă-aer $\varphi_m = 51^0$; printr-o singură reflexie nu se poate obține o polarizare circulară deoarece $\text{tg} \left(\frac{\delta}{2} \right) = 0,42$.

Studiind reflexia totală, Fresnel a elaborat un procedeu de producere a luminii circular polarizate prin reflexie totală. Se demonstrează că utilizând o prismă de sticlă de formă corespunzătoare (Fig. 1.22) se poate obține prin două reflexii succesive pe fețele acesteia un defazaj $\delta = \pi/2$.

Aceasta se datorează faptului că pentru o singură reflexie pe suprafață $\text{tg} \delta/2 = 0,42$, de unde $\delta = 45^0$. Pentru a se asigura egalitatea amplitudinilor celor două unde polarizate, planul de polarizare al undei primare trebuie să facă un unghi de 45^0 cu planul figurii. Pentru a transforma lumina circular polarizată în lumină liniar polarizată trebuie introdus cu ajutorul unui dispozitiv un defazaj suplimentar egal cu $\pi/2$ între undele polarizate pe cele două direcții ortogonale. Pentru aceasta se utilizează o lamă sfert de undă.

Figura 1.22: Obținerea unei unde circular polarizată printr-o dublă reflexie

1.2.6 Reflexia pe metale a undelor electromagnetice

O caracteristică a mediilor conductoare este prezența unui mare număr de sarcini electrice libere (acestea pot circula în interiorul materialului). Pentru metale aceste sarcini sunt electronii. Curentul obținut prin aplicarea unui câmp electric este direct proporțional cu conductivitatea mediului. Pentru un dielectric care nu posedă electroni de conducție conductivitatea este nulă, în timp ce pentru metale este finită. În cazul unei conductor perfect, conductivitatea este infinită. Aceasta înseamnă că dacă se aplică un câmp electric alternativ electronii vor urma oscilațiile câmpului și electronii vor reemite energia electromagnetică. În metalele reale electronii de conducție suferă ciocniri cu ionii rețelei cristaline astfel că o parte din energia electromagnetică se transformă ireversibil în căldură. Absorbția energiei unei unde electromagnetice este funcție de conductivitatea metalului.

Astfel, pentru a elabora o teorie a reflexiei undelor electromagnetice pe suprafețele metalice trebuie ținut cont de undele secundare generate de oscilațiile forțate ale electronilor liberi a căror densitate este foarte mare în metale. O teorie riguroasă trebuie să fie cuantică deoarece mișcarea electronilor în metale necesită aplicarea mecanicii cuantice.

Totuși, proprietățile optice caracteristice metalelor pot fi interpretate și în cadrul unei teorii fenomenologice.

În primul rând cele mai multe metale prezintă un factor mare de reflexie iar o mare parte din radiație este absorbită într-un strat subțire. Experiența arată că unda electromagnetică reflectată este eliptic polarizată, cu excepția cazului în care incidența este normală.

Raportul dintre fluxul de energie reflectat și absorbit trebuie să depindă de conductivitatea metalului. Experiența arată că cu cât conductivitatea este mai mare cu atât mai bine sunt reflectate undele luminoase.

Penetrarea undei în interiorul metalului duce inevitabil la apariția unui curent de conducție $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ și a efectului Joule corespunzător. Din ecuațiile Maxwell ținând cont de termenul caracteristic care ia în considerație conductibilitatea mediului ($\vec{j} \neq 0$) se obține:

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.166)$$

În ipoteza unor medii liniare și omogene $\vec{j} = \sigma \vec{E}$, $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$ și $\nabla \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$ rezultă:

$$\Delta \vec{E} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \sigma \mu \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0 \quad (1.167)$$

Pentru această ecuație vom considera o soluție de forma:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp \left[i\omega \left(t - \frac{nz}{c} \right) \right] \quad (1.168)$$

Aceasta este o undă plană care se propagă de-a lungul axei Oz. Introducând (1.168) în (1.167) se obține:

$$-\frac{\omega^2}{c^2} n^2 = -\omega^2 \varepsilon \mu + i\sigma \mu \omega \quad (1.169)$$

adică:

$$n^2 = c^2 \varepsilon \mu - i\sigma \mu \frac{c^2}{\omega} \quad (1.170)$$

Considerând $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$ iar $\mu = \mu_0$ ($\mu_r = 1$) se obține:

$$n^2 = \varepsilon_r - i \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega} \quad (1.171)$$

În acest caz indicele de refracție rezultă a fi o mărime complexă:

$$n = n_r - i\chi \quad (1.172)$$

în care n_r este partea reală (indice de refracție propriu-zis) iar χ coeficientul de extincție.

Înlocuim (1.172) și (1.171); rezultă:

$$n^2 - \chi^2 = \varepsilon_r \quad (1.173)$$

$$2n_r\chi = \frac{\sigma}{\varepsilon_0\omega} \quad (1.174)$$

Relațiile (1.173) și (1.174) permit calcularea lui n_r și χ . Unda progresivă poate fi scrisă sub forma:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp\left(-\frac{\chi\omega}{c}z\right) \exp i\left(\omega t - \frac{n_r\omega z}{c}\right) \quad (1.175)$$

În această reprezentare intensitatea undei este $I \sim \langle \vec{E}\vec{E}^* \rangle$. Se obține:

$$I(z) = I_0 \exp[-2\mu z] \quad (1.176)$$

Relația 1.176 descrie cantitativ descreșterea intensității radiației pe măsură ce aceasta penetrează mediul respectiv. În ecuația de mai sus μ poartă numele de coeficient de absorbție și este dat de expresia:

$$\mu = \frac{\chi\omega}{c} \quad (1.177)$$

Relația (1.176) dedusă din ecuațiile câmpului electromagnetic a fost demonstrată prima dată pe cale experimentală de către Beer.

Ecuația (1.175) este din punct de vedere formal ecuația unei unde plane. Vom utiliza formulele pe care le-am discutat anterior înlocuind indicele de reflexie real n prin cantitatea complexă $n_r - i\chi$ a cărei parte reală caracterizează refracția undei electromagnetice iar partea imaginară caracterizează absorbția radiației.

Dacă n este un număr complex, putem spune că, formal unghiul φ_2 de refracție este complex pentru toate unghiurile de incidență cu excepția cazului când unghiul de incidență $\varphi = 0$. Relația care trebuie verificată este:

$$\frac{\sin \varphi}{\sin \varphi_2} = n' = n_r - i\chi \quad (1.178)$$

Situația este asemănătoare cu cea din cazul reflexiei totale când φ_2 este o cantitate complexă numai când $\varphi > \varphi_l$. Acest fapt determină polarizarea eliptică a radiației. Rezultă că dacă pe o suprafață metalică cade o undă cu polarizare rectilinie, unda reflectată este polarizată eliptic.

Studiul undei refractate prezintă o serie de dificultăți deoarece ea este absorbită în totalitate într-un strat subțire de la suprafața metalului. De aceea studiul experimental se concentrează asupra undei reflectate de suprafața metalului. Metoda a fost propusă de Drude.

Dacă o undă electromagnetică este reflectată de o suprafață metalică, obținem o undă polarizată eliptic și în consecința trebuie să apară o diferență de fază între $\vec{E}_{1\parallel}$ și $\vec{E}_{1\perp}$. Măsurând defazaajul δ și folosind factorul de reflexie pentru un unghi de incidență dat se determină n_r și χ , constante care sunt legate de constantele mediului σ și ε .

Introducerea indicelui de refracție complex n permite utilizarea formulelor lui Fresnel stabilite pentru undele care se propagă în medii dielectrice:

$$\frac{(E_{10})_{\parallel}}{(E_{00})_{\parallel}} = \frac{\operatorname{tg}(\varphi_1 - \varphi_2)}{\operatorname{tg}(\varphi_1 + \varphi_2)} = \rho_1 \exp(i\delta_{\parallel}) \quad (1.179)$$

$$\frac{(E_{10})_{\perp}}{(E_{00})_{\perp}} = -\frac{\sin(\varphi - \varphi_2)}{\sin(\varphi + \varphi_2)} = \rho_2 \exp(i\delta_{\perp}) \quad (1.180)$$

Cum $\delta_{\parallel} \neq \delta_{\perp}$, atunci există un defazaaj între cele două componente ortogonale ale vectorului \vec{E} fapt ce implică polarizarea eliptică a undei reflectate de metal. Astfel se determină diferența $\delta = \delta_{\parallel} - \delta_{\perp}$.

Vom considera un caz simplu și anume cel al incidenței normale pe suprafața metalului. În cazul general:

$$\frac{E_{10}}{E_{00}} = \frac{n - 1}{n + 1} \quad (1.181)$$

Introducând $n = n_r - i\chi$:

$$\frac{E_{10}}{E_{00}} = \frac{(n_r - 1) - i\chi}{(n_r + 1) + i\chi} \quad (1.182)$$

coeficientul de reflexie este:

$$R = \frac{E_{10} E_{10}^*}{E_{00} E_{00}^*} = \frac{(n_r - 1)^2 + \chi^2}{(n_r + 1)^2 + \chi^2} \quad (1.183)$$

adică:

$$R = 1 - \frac{4n_r}{(n_r + 1)^2 + \chi^2} \quad (1.184)$$

Figura 1.23: Coeficientul de reflexie al argintului funcție de lungimea de undă

Se pot determina astfel n_r și χ , R și δ fiind mărimi accesibile experimental.

Împărțind relațiile (1.173) și (1.174) rezultă:

$$\frac{n_r^2 - \chi^2}{2n_r\chi} = \frac{\varepsilon_r\varepsilon_0\omega}{\sigma} \quad (1.185)$$

sau:

$$\frac{1 - \left(\frac{\chi}{n_r}\right)^2}{2\left(\frac{\chi}{n_r}\right)} = \frac{\varepsilon\omega}{\sigma} \quad (1.186)$$

Dacă $\left(\frac{\chi}{n_r}\right) \rightarrow 1$ atunci rezultă $\sigma \rightarrow \infty$. Dar cum $\sigma = 2n_r\chi\varepsilon_0\omega$ rezultă că $\chi \rightarrow \infty$ și $n_r \rightarrow \infty$. Din (1.184) rezultă $R \rightarrow 1$, adică un conductor perfect reflectă în totalitate unda electromagnetică ce cade pe el. Măsurătorile asupra lui R arată că acesta nu este egal cu unitatea. Factorul de reflexie este dependent de lungimea de undă și tinde spre 1 în regiunea infraroșie a spectrului. În Fig. 1.23 este arătată variația factorul de reflexie al argintului cu lungimea de undă a radiației incidente.

Curba arată că pentru lumina vizibilă și pentru radiațiile ultraviolete argintul nu este un conductor perfect. O bună concordanță cu teoria o găsim în domeniul luminii roșii și a regiunii infraroșii a spectrului.

1.3 Interferența luminii

Afirmăm că două unde luminoase interferă dacă intensitatea rezultantă prin suprapunerea lor nu este egală cu suma intensităților fiecărei unde în parte.

O contribuție importantă în interpretarea fenomenelor de interferență a fost furnizată de Fresnel, Young și alți fizicieni de la începutul secolului al XIX -lea. Ei au dezvoltat o teorie ondulatorie bazată pe ideea că lumina este o perturbație care se propagă într-un mediu numit eter. Teoria a cunoscut un succes deosebit deoarece a explicat o serie de probleme (interferența, difracția), însă ea a impus ipoteze suplimentare privitoare la eter.

Teoria electromagnetică care a urmat a permis simplificarea problemelor și a rezolvat o serie de probleme complicate de interferență. Dificultățile nu apar în cazul undelor monocromatice ci în cazul undelor luminoase reale care sunt pulsuri luminoase sau pachete de unde. Totuși trebuie remarcat că studiul interferenței undelor armonice este foarte important deoarece un puls luminos se poate reprezenta printr-o sumă finită sau infinită de unde monocromatice.

1.3.1 Oscilații coerente

Presupunem că într-un punct din spațiu coexistă două unde electromagnetice oarecare \vec{E}_1 și \vec{E}_2 (în cazul general nemonocromatice) determinate de sursele S_1 și S_2 . În virtutea principiului superpoziției:

$$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 \quad (1.187)$$

Atunci:

$$\vec{E}^2 = \vec{E}_1^2 + \vec{E}_2^2 + 2\vec{E}_1\vec{E}_2 \quad (1.188)$$

În cazul măsurării unui flux de energie electromagnetică (în cazul undelor luminoase se determină fluxul de energie luminoasă ce iluminează o suprafață), trebuie ținut cont de inerția inerentă a aparatelor de măsură care în general este foarte mare. Este practic imposibil de a fi realizat fără un efect de inerție un studiu experimental al proceselor a căror durată este de ordinul duratei de excitație a atomului, cu toate că există

dispozitive de măsură al căror timp de răspuns este de 10^6 mai mic decât cel al ochiului (0, 1 s).

Trebuie considerată media temporală a relației (1.188) pe un interval de timp t' suficient de mare. Acest interval de timp trebuie adaptat inerției receptorului optic. Atunci înlocuim expresia (1.188) cu media ei temporală:

$$\langle \vec{E}^2 \rangle = \langle (\vec{E}_1 + \vec{E}_2)^2 \rangle = \langle \vec{E}_1^2 \rangle + \langle \vec{E}_2^2 \rangle + 2 \langle \vec{E}_1 \vec{E}_2 \rangle \quad (1.189)$$

Atunci când se măsoară energia totală care este proporțională cu $\langle \vec{E}^2 \rangle$ pot apare două situații:

a) când $\langle \vec{E}_1 \vec{E}_2 \rangle = 0$

$$\langle \vec{E}^2 \rangle = \langle \vec{E}_1^2 \rangle + \langle \vec{E}_2^2 \rangle \quad (1.190)$$

iar

$$I = I_1 + I_2 \quad (1.191)$$

b) când $\langle \vec{E}_1 \vec{E}_2 \rangle \neq 0$

$$\langle \vec{E}^2 \rangle \neq \langle \vec{E}_1^2 \rangle + \langle \vec{E}_2^2 \rangle \quad (1.192)$$

iar

$$I \neq I_1 + I_2 \quad (1.193)$$

În primul caz intensitatea totală este egală cu suma intensităților (nu avem interferență). În al doilea caz intensitatea totală nu este egală cu suma intensităților și există interferență.

Se observă că inegalitatea $\langle \vec{E}_1 \vec{E}_2 \rangle \neq 0$ exprimă condiția necesară pentru apariția fenomenului de interferență.

Dacă cele două unde considerate \vec{E}_1 și \vec{E}_2 sunt polarizate liniar pe direcții perpendiculare $\vec{E}_1 \vec{E}_2 = 0$ și termenul de interferență devine nul. Dacă undele considerate au frecvențe diferite valoarea mediei temporale a produsului $\vec{E}_1 \vec{E}_2$ este nulă. Astfel rezultă două condiții necesare dar nu suficiente pentru ca două unde să interfere: ele trebuie să aibă aceeași frecvență și să nu fie polarizate liniar pe direcții perpendiculare.

Considerăm un caz mai general și anume acela în care într-un punct se suprapun două unde a căror fază depind de timp dar de frecvențe egale. Pentru simplificare vom presupune că amplitudinile celor două unde variază lent în raport cu timpul.

$$E = E_0 \cos(\omega t - \varphi) \quad (1.194)$$

unde E_0 și φ sunt mărimii ce depind de timp. Considerăm că într-un punct se suprapun două unde de acest tip:

$$E_1(t) = E_{10}(t) \cos[\omega t - \varphi_1(t)] \quad (1.195)$$

$$E_2(t) = E_{20}(t) \cos[\omega t - \varphi_2(t)] \quad (1.196)$$

Unda rezultantă se obține prin însumarea celor două unde plane:

$$E(t) = E_1(t) + E_2(t) \quad (1.197)$$

Compunerea celor două oscilații o vom face fazorial. Se obține:

$$E_0^2(t) = E_{10}^2(t) + E_{20}^2(t) + 2E_{10}E_{20} \cos[\varphi_1(t) - \varphi_2(t)] \quad (1.198)$$

$$\operatorname{tg} \varphi_0 = \frac{E_{10}(t) \sin \varphi_1(t) + E_{20}(t) \sin \varphi_2(t)}{E_{10}(t) \cos \varphi_1(t) + E_{20}(t) \cos \varphi_2(t)} \quad (1.199)$$

Considerând că amplitudinile $E_{10}(t)$ și $E_{20}(t)$ sunt constante în timp atunci media temporală a lui $E_0^2(t)$ este:

$$\langle E_0^2(t) \rangle = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2E_{10}E_{20} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} \cos[\varphi_1(t) - \varphi_2(t)] dt \quad (1.200)$$

Dacă în intervalul de timp t' diferența de fază variază de un mare număr de ori, $\cos[\varphi_1(t) - \varphi_2(t)]$ ia când valori pozitive când valori negative, integrala este nulă:

$$\int_0^{t'} \cos[\varphi_1(t) - \varphi_2(t)] dt = 0 \quad (1.201)$$

și nu avem interferență.

Figura 1.24: Obținerea interferenței: a) divizarea frontului de undă b) divizarea amplitudinii

Condiția necesară și suficientă pentru obținerea interferenței este ca diferența de fază $\varphi_1(t) - \varphi_2(t)$ să rămână constantă în timp. Spunem că două unde sunt coerente dacă diferența de fază dintre ele rămâne constantă în cursul observațiilor. Trebuie observat că două unde armonice monocromatice de aceeași frecvență sunt coerente, diferența de fază dintre ele fiind constantă în timp.

Pentru a obține două unde luminoase coerente a căror suprapunere să determine apariția interferenței, există două posibilități reprezentate formal în Fig. 1.21.

a) prin divizarea frontului de undă

b) prin divizarea amplitudinii

În aceste cazuri diferența de fază este:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda_0} [SS_2P - SS_1P] \quad (1.202)$$

1.3.2 Interferența a două unde monocromatice

Fie două surse S_1 , S_2 care emit undele monocromatice E_1 și E_2 de aceeași pulsație ω ale căror vibrații au aceeași direcție (Fig.1.25). Din acest motiv problema poate fi tratată scalar. În plus vom considera că distanțele de la cele două surse la punctul de interferență r_1 și r_2 sunt mult mai mari decât distanța dintre surse.

$$E_1 = E_{10} \cos(\omega t - kr_1) \quad (1.203)$$

$$E_2 = E_{20} \cos(\omega t - kr_2) \quad (1.204)$$

Figura 1.25: Suprapunerea a două unde luminoase

Unda rezultantă este:

$$E = E_1 + E_2 \quad (1.205)$$

Exprimând fazele celor două unde în punctul în care are loc interferența:

$$\varphi_1 = \omega t - kr_1$$

$$\varphi_2 = \omega t - kr_2$$

compunerea celor două unde se face fazorial (Fig.1.25):

$$E^2 = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2E_{10}E_{20} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (1.206)$$

unde $\Delta\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = k(r_2 - r_1)$ reprezintă defazajul dintre cele două unde. Se observă că pentru unde monocromatice acesta este constant în timp iar condiția pentru obținerea interferenței este îndeplinită.

Deoarece $I \sim E^2$, $I_1 \sim E_{10}^2$, $I_2 \sim E_{20}^2$ atunci intensitatea unde rezultante se exprimă:

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \Delta\varphi \quad (1.207)$$

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos [k(r_2 - r_1)] \quad (1.208)$$

Dacă se ține cont de expresia lui $k = 2\pi/\lambda = 2\pi/vT = 2\pi n/cT$, expresia diferenței de fază dintre cele două unde se poate scrie:

$$\Delta\varphi = k(r_2 - r_1) = \frac{2\pi n(r_2 - r_1)}{cT} = \frac{2\pi\delta}{\lambda_0} \quad (1.209)$$

În expresia de mai sus $\delta = n(r_2 - r_1)$ poartă numele de diferență de drum optic în timp ce $\delta_g = r_2 - r_1$ poartă numele de diferență de drum geometric.

Considerând cazul a două unde de amplitudini egale $E_{10} = E_{20} = E_0$, $I_1 = I_2 = I_0$ intensitatea unei rezultante devine:

$$I = 2I_0(1 + \cos \Delta\varphi) = 2I_0 \left(1 + \cos \frac{2\pi\delta}{\lambda_0} \right) \quad (1.210)$$

Intensitatea rezultantă este maximă atunci când:

$$\cos \frac{2\pi\delta}{\lambda_0} = 1 \quad (1.211)$$

adică în cazul că $2\pi\delta/\lambda_0 = 2m\pi$, unde m este un număr întreg. Rezultă condiția pentru drumul optic:

$$\delta = m\lambda_0 \quad (1.212)$$

În acest caz intensitatea rezultantă este:

$$I_M = 4I_0 \quad (1.213)$$

Intensitatea minimă se obține atunci când:

$$\cos \frac{2\pi\delta}{\lambda_0} = -1 \quad (1.214)$$

adică în cazul că $2\pi\delta/\lambda_0 = (2m + 1)\pi$. Rezultă:

$$\delta = (2m + 1) \frac{\lambda_0}{2} \quad (1.215)$$

În acest caz intensitatea rezultantă este nulă:

$$I_m = 0 \quad (1.216)$$

1.3.3 Coerența temporală și spațială

Când se studiază fenomenul de interferență a două unde care provin de la sursele S_1 și S_2 obținute pornindu-se de la o singură sursă primară S , există două cauze care influențează fenomenul de interferență:

- 1) distribuția spectrală a undelor emise de sursa S (sursa nu emite o undă strict monocromatică).
- 2) extinderea spațială a sursei S (sursa S nu este punctuală).

Coerența temporală

Considerăm că unda emisă de sursa primară este cvasimonocromatică: ea este caracterizată de intensitatea spectrală I_ν care este proporțională cu energia asociată benzii de frecvență cuprinsă între ν și $\nu + d\nu$. În general $I_\nu(\nu)$ este o curbă centrată în jurul unei frecvențe ν_0 .

Există două tipuri principale ale distribuției spectrale a undelor emise de o sursă de lumină:

- 1) Distribuția spectrală Lorentz:

$$I_n(\nu) = \frac{I_0}{1 + 4\pi^2\tau_c^2(\nu - \nu_0)^2} \quad (1.217)$$

care are lărgimea la semiînălțime egală cu:

$$\Delta\nu_{1/2} = \frac{1}{2\pi\tau_c} \quad (1.218)$$

Lărgimea la semiînălțime depinde de parametrul τ_c care reprezintă așa numita viața medie a stării excitate în care se află emițătorul. El reprezintă practic durată trenului de unde emis de sursă.

- 2) Distribuția gaussiană:

$$I_n(\nu) = I_0 \exp\left[-\frac{(\nu - \nu_0)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (1.219)$$

care are lărgimea la semiînălțime egală cu:

$$\Delta\nu_{1/2} = 2\sigma(2\ln 2)^{1/2} = 2,35\sigma \quad (1.220)$$

Această distribuție este atribuită efectului Doppler, adică variației frecvenței unei emise de atomi datorită mișcării lor.

Pentru simplificare vom asimila astfel de distribuții cu distribuții dreptunghiulare cu lățimea $\Delta\nu_{1/2}$ centrate pe frecvența ν_0 . Pentru un sistem interferențial dat, diferența de fază în punctul de observație P depinde de frecvența unei monocromatice considerate:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi\delta}{\lambda_0} = \frac{2\pi\delta\nu}{c} = 2\pi\nu\tau \quad (1.221)$$

unde $\tau = \delta/c$.

Sursa S nefiind monocromatică, fiecare din componentele monocromatice dau propriul sistem de franje de interferență. Intensitatea luminii în punctul P este sumă a intensităților asociate fiecărei componente în parte:

$$I = \sum_i 2I_0(\nu) (1 + \cos 2\pi\nu_i\tau) \quad (1.222)$$

Sistemele de franje asociate fiecărei frecvențe ν_i se suprapun și de aceea imaginea este neclară. Dacă însă spectrul de frecvențe este suficient de îngust suprapunerea nu este perceptibilă. Ținând cont de relația (1.221) diferența maximă dintre defajazele undelor ce ajung în punctul P este $\Delta(\Delta\varphi) = 2\pi\Delta\nu_{1/2}\tau$. Sistemul de franje asociat undelor cuasi-monocromatice care interferă este clar dacă:

$$\Delta(\Delta\varphi) = 2\pi\Delta\nu_{1/2}\tau \ll 2\pi \quad (1.223)$$

sau:

$$\Delta\nu_{1/2}\tau \ll 1 \quad (1.224)$$

De aici rezultă:

$$\tau \ll \frac{1}{\Delta\nu_{1/2}} = \tau_c \quad (1.225)$$

unde τ_c poartă numele de durată de coerență.

În termeni de drum optic această condiție se scrie:

$$\delta = c\tau \ll c\tau_c = L_c \quad (1.226)$$

unde mărimea L_c poartă denumirea de lungime de coerență și reprezintă practic lungimea trenului de undă emis de sursă:

Deoarece $\nu = c/\lambda$:

$$\Delta\nu = \frac{c\Delta\lambda}{\lambda^2}$$

lungimea de coerență poate fi exprimată astfel:

$$L_c = c\tau_c = c(\Delta\nu_{1/2})^{-1} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda_{1/2}} \quad (1.227)$$

Vom estima aceste mărimi pentru o lampă cu mercur și pentru o radiație laser.

Pentru o lampă cu vapori de mercur pe care este plasat un filtru interferențial de lărgime $\Delta\lambda = 10 \text{ nm}$ pentru radiația $\lambda_0 = 550 \text{ nm}$ se obține:

$$L_c = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} \simeq 30 \text{ } \mu\text{m} \quad (1.228)$$

$$\tau_c = \frac{L_c}{c} \simeq 10^{-13} \text{ s} \quad (1.229)$$

Pentru un laser He-Ne cu $\lambda_0 = 632,8 \text{ nm}$ și banda de frecvențe $\Delta\nu_{1/2} = 1,4 \times 10^6 \text{ Hz}$ se obține:

$$\tau_c = \frac{1}{\Delta\nu_{1/2}} = 0,7 \times 10^{-9} \text{ s} \quad (1.230)$$

$$L_c = c\tau_c = 20 \text{ cm}$$

În Fig. 1.26 este prezentat schematic cazul precedent. Dacă $\tau \ll \tau_c$, ($\delta \ll L_c$) undele care se întâlnesc în P provin din același tren de unde (Fig.1.26a), diferența de fază este constantă și undele vor interfera.

Dacă însă $\tau > \tau_c$, ($\delta > L_c$) undele provin de la trenuri de undă succesive (Fig. 1.26b) iar diferența de fază este aleatorie astfel că fenomenul de interferență nu se produce.

Coerența spațială

Problema coerenței spațiale intervine atunci când unda primară este emisă de o sursă extinsă. Atunci unda nu este caracterizată de un singur vector de undă ci de un ansamblu de vectori de undă de același modul dar

Figura 1.26: Coerența temporală

Figura 1.27: Coerența spațială

cu direcții diferite. Ne propunem să evaluăm influența acestei extinderi a sursei primare asupra fenomenului de interferență. Pentru aceasta vom încerca să evaluăm influența deplasării unei surse primare punctiforme.

Considerăm un dispozitiv de tip Young, sursele secundare S_1 , S_2 și punctul de interferență P fiind considerate fixe (Fig. 1.27). Când sursa S se deplasează cu $\Delta \vec{S}$ variația diferenței de fază a undelor ce ajung în P este:

$$\Delta(\Delta\varphi) = 2\pi\nu\frac{\Delta\delta}{c} \quad (1.231)$$

unde:

$$\Delta\delta = \Delta[(SS_2P) - (SS_1P)] = \Delta[(SS_2) - (SS_1)] \quad (1.232)$$

Dar $\Delta(SS_2) = -\vec{u}_2\Delta\vec{S}$ și $\Delta(SS_1) = -\vec{u}_1\Delta\vec{S}$ rezultă:

$$\Delta\delta = -\vec{u}_2\Delta\vec{S} + \vec{u}_1\Delta\vec{S} \quad (1.233)$$

astfel că diferența dintre diferențele de fază este:

$$\Delta(\Delta\varphi) = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta\vec{S}(\vec{u}_1 - \vec{u}_2) \quad (1.234)$$

Trebuie remarcat că în urma deplasării sursei într-o direcție perpendiculară pe vectorul $(\vec{u}_1 - \vec{u}_2)$ nu apare nici o modificare a diferenței de fază.

Dacă $\Delta\vec{S}$ - deplasarea sursei este paralelă cu $(\vec{u}_1 - \vec{u}_2)$ atunci:

$$\Delta\vec{S}(\vec{u}_1 - \vec{u}_2) = \Delta S \times 2 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \simeq \Delta S\alpha \quad (1.235)$$

Rezultă:

$$\Delta(\Delta\varphi) = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta S\alpha \quad (1.236)$$

Să considerăm în continuare că sursa primară este extinsă. În acest caz fiecare punct S_i furnizează propriul său sistem de franje independente, astfel că în punctul P intensitatea rezultantă este:

$$I = \sum_i 2I_i(1 + \cos \Delta\varphi_i) \quad (1.237)$$

unde:

$$\Delta\varphi_i = 2\pi\nu_i\tau_i = \frac{1}{c}[(S_iS_2P) - (S_iS_1P)] \quad (1.238)$$

Asimilăm sursa extinsă S cu o fantă de lărgime ΔS . Pentru ca franjele să se observe punem condiția ca pentru punctele cele mai depărtate între ele:

$$\Delta(\Delta\varphi) \ll 2\pi \quad (1.239)$$

Dacă se notează cu D_s distanța de la sursa S la sursele S_1 și S_2 atunci $\Delta S = D_s\theta$ iar $\alpha = \frac{S_1S_2}{D_s} = \frac{a}{D_s}$ (Fig. 1.27b). Relația (1.236) se scrie:

$$\Delta(\Delta\varphi) = \frac{2\pi a\theta}{\lambda} \quad (1.240)$$

În relațiile de mai sus θ este unghiul sub care se vede sursa primară din planul surselor S_1 și S_2 . Atunci relația (1.239) devine:

$$\frac{a\theta}{\lambda} \ll 1 \quad (1.241)$$

Mărimea:

$$l_s = \frac{\lambda}{\theta} \quad (1.242)$$

poartă denumirea de lungime de coerență. Condiția precedentă se scrie ca:

$$a \ll l_s \quad (1.243)$$

Ca ordin de mărime vom considera două exemple din astronomie:

a) în cazul Soarelui $\theta \simeq 32''$ de unde $l_s \simeq 60 \mu\text{m}$ considerând pentru lungimea de undă valoarea medie de 550 nm (lumina verde).

b) în cazul planetei Venus $\theta \simeq 1''$ și $l_s \simeq 2 \text{ mm}$.

1.3.4 Dispozitive interferențiale

Dispozitivul Young

Dispozitivul Young constă dintr-o sursă S care iluminează două fante F_1 și F_2 (Fig. 1.28). Cele două fante practicate într-un paravan E devin conform principiului lui Huygens două surse secundare de oscilații care determină interferența pe ecranul E' aflat la distanța D de planul surselor.

Intensitatea luminoasă într-un punct de pe ecran este dată de formula generală:

$$I = 2I_0 \left(1 + \cos \frac{2\pi\delta}{\lambda_0} \right) \quad (1.244)$$

unde I_0 este intensitatea luminoasă corespunzătoare fiecărei fante în parte. Considerând dispozitivul în aer diferența de drum optic dintre cele două unde este:

$$\delta = F_2P - F_1P = r_2 - r_1 \quad (1.245)$$

Figura 1.28: Dispozitivul Young

Pentru a calcula această diferență de drum vom considera că $D \gg 2l$ și $D \gg x$ (D este de ordinul decimetrilor sau metrilor, iar $2l$ și x sunt de ordinul zecimilor de milimetri).

Considerăm triunghiurile $\Delta F_1PF'_1$ și $\Delta F_2PF'_2$ în care aplicăm teorema lui Pitagora:

$$r_1^2 = D^2 + (x - l)^2 \quad (1.246)$$

$$r_2^2 = D^2 + (x + l)^2 \quad (1.247)$$

Prin scăderea celor două relații se obține:

$$(r_2 - r_1)(r_2 + r_1) = 4xl \quad (1.248)$$

În această relație $\delta = r_2 - r_1$ iar $r_2 + r_1 \simeq 2D$ deoarece înclinarea celor două direcții față de orizontală este foarte mică.

Atunci:

$$\delta = \frac{2xl}{D} \quad (1.249)$$

Din cele discutate mai sus știm că se obține intensitate maximă pe ecran atunci când diferența de drum este un număr întreg de lungimi de undă:

$$\frac{2xl}{D} = m\lambda_0 \quad (1.250)$$

Din această relație se obțin pozițiile maximelor de interferență pe ecran:

$$x_m = m \frac{\lambda_0 D}{2l} \quad (1.251)$$

Intensitatea luminii este minimă atunci când diferența de drum optic este egală cu un număr impar de semilungimi de undă:

$$\frac{2xl}{D} = (2m + 1) \frac{\lambda_0}{2} \quad (1.252)$$

Atunci pozițiile minimelor (sau a franjelor întunecoase) pe ecran sunt:

$$x'_m = (2m + 1) \frac{\lambda_0 D}{4l} \quad (1.253)$$

Distanța dintre două maxime sau minime consecutive poartă numele de interfranjă și se notează cu i :

$$i = (x_{m+1} - x_m) = \frac{\lambda_0 D}{2l} \quad (1.254)$$

Trebuie remarcat că pentru a se obține franjele de interferență este necesar ca diferența de drum dintre undele care interferă să fie mai mică decât lungimea de coerență $\delta \ll L_c$, deoarece amplitudinile și fazele sunt constante doar în intervalul de timp τ_c . De exemplu dacă se consideră $2l = 0,05$ mm, $D = 50$ cm iar lungimea de coerență $L_c = 30$ μ m ($\lambda = 546$ nm, cu $\Delta\lambda = 10$ nm) distanța la care undele care interferă mai pot fi coerente este:

$$x_{\max} = \frac{D\delta}{2l} \ll \frac{DL_c}{2l} = 30 \text{ cm} \quad (1.255)$$

Oglinzile Fresnel

Dispozitivul permite să se folosească drept surse coerente cele două imagini ale aceleiași surse reale de lumină obținute în două oglinzi plane. Schema dispozitivului este prezentată în Fig.1.29.

O_1O și O_2O sunt două oglinzi plane dispuse sub un unghi α foarte mic. Sursa S (sub formă de fantă perpendiculară pe planul figurii) este așezată pe bisectoarea unghiului O_1OO_2 la distanța r de locul de contact

Figura 1.29: Oglinzile Fresnel

al oglinzilor. S_1 și S_2 , imaginile virtuale ale lui S în cele două oglinzi sunt cele două surse coerente.

Fenomenul de interferență se observă pe un ecran E paralel cu muchia comună și perpendicular (în acest caz) pe bisectoarea unghiului $\widehat{O_1OO_2}$.

Se observă că undele provenite de la S_1 (undele provenite de la S și reflectate pe oglinda O_1) le găsim în interiorul unghiului $\widehat{E_1OO_1}$ iar undele provenite de la S_2 , în interiorul unghiului $\widehat{E_2OO_2}$. Interferența apare în regiunea din spațiu în care undele provenite de la cele două surse se suprapun, adică în interiorul unghiului $\widehat{E_1OE_2}$. Pe ecran, franjele de interferență vor fi obținute între punctele E_1 și E_2 .

Deoarece S_1 este simetricul lui S față de OO_1 , iar S_2 este simetricul lui S față de OO_2 atunci triunghiurile $\triangle S_1OS$ și $\triangle S_2OS$ sunt isoscele și $SO = S_1O = S_2O$, adică punctele S_1, S_2 și S se află pe un cerc de rază r .

În plus $\widehat{S_2OS_1} = 2\widehat{S_2SS_1} = 2\alpha$; $\widehat{S_2SS_1} = \alpha$ deoarece $SS_1 \perp OO_1$ și $SS_2 \perp OO_2$.

În $\triangle S_2OS_1$ isoscel

$$S_2S_1 = 2S_2O'' = 2r \sin \alpha$$

S_2S_1 joacă rolul lui "2l" din cazul dispozitivul lui Young. Presupunem

Figura 1.30: Oglinda Lloyd

distanța de la dreapta de intersecție a oglinzilor până la ecran ca fiind cunoscută și anume $OO' = d$. Atunci distanța D de la planul surselor S_1 și S_2 la ecran este:

$$D = O''O + OO' = r \cos \alpha + d \quad (1.256)$$

Rezultă că interfranja are valoarea:

$$i = \frac{(d + r \cos \alpha)\lambda}{2r \sin \alpha} \quad (1.257)$$

Deoarece α este foarte mic putem aproxima $\cos \alpha \approx 1$ și $\sin \alpha \approx \alpha$ astfel că interfranja este dată cu o foarte bună aproximație de relația:

$$i = \frac{(d + r)\lambda}{2r\alpha} \quad (1.258)$$

Oglinda Lloyd

Aceasta este o oglindă plană deasupra căreia este plasată la o înălțime foarte mică sursa S de lumină monocromatică (Fig.1.30). Ecranul pe care se "prind" franjele de interferență este plasat perpendicular pe planul oglinzii.

Într-un punct P de pe ecran ajunge direct o parte a frontului de undă datorat sursei S iar o altă parte ajunge prin reflexia pe oglinda O . Astfel în punctul P interferă două unde: una provenită direct din S iar alta care

Figura 1.31: Biprisma Fresnel

pare a proveni din S' (imaginea lui S în oglindă). Această a doua undă este o undă ce s-a reflectat pe oglindă. Atunci S și S' sunt cele două surse de lumină coerentă. Se observă că sursa S' nu poate acoperi pe ecran decât porțiunea dintre E_1 și E_2 (care sunt punctele unde ajung razele reflectate pe marginile oglinzii). Franjele de interferență vor fi obținute pe ecran între E_1 și E_2 .

Dacă vom considera D distanța de la planul surselor la ecran și $2h$ distanța dintre cele două surse, valoarea interfranței este:

$$i = \frac{\lambda D}{2h} \quad (1.259)$$

Diferența de drum dintre razele ce interferă în punctul P este:

$$\delta = (S'P - \frac{\lambda}{2}) - SP \quad (1.260)$$

când reflexia are loc pe un mediu cu indice de refracție mai mare decât acela din care provine lumina.

Biprisma Fresnel

Biprisma are un unghi la vârf foarte apropiat de 180° , astfel că unghiurile de la capete sunt foarte mici (Fig. 1.31). Sursa primară este constituită dintr-o fantă dreptunghiulară uniform iluminată cu lumină paralelă. Fiecare din prismele respective formează câte o imagine a sursei S într-un plan perpendicular pe axa optică ce conține pe S . Se demonstrează că distanța dintre surse este:

$$S_1 S_2 = 2l(n-1)\alpha \quad (1.261)$$

unde cu n am notat indicele de refracție al materialului prisme, iar l este distanța dintre sursa S și prismă. Câmpul interferențial este dat de

regiunea în care undele, ce par a proveni de la sursele secundare S_1 și S_2 se suprapun. Ca o observație, dacă se mărește lărgimea fantei primare crește iluminarea ecranului dar scade contrastul franjelor. Pentru a ameliora contrastul franjelor trebuie ameliorată monocromaticitatea luminii.

1.3.5 Franje localizate de egală înclinare

Trebuie remarcat că sistemele interferențiale ca Oglinzile Fresnel și Biprisma Fresnel sunt sensibile la dimensiunile sursei primare. Pentru ca franjele să fie contrastante este necesar ca sursa primară să fie cât mai fină (îngustă) - de dimensiuni cât mai mici, fapt ce face ca luminozitatea franjelor obținute să fie foarte mică. Problema care se pune este aceea de a realiza un sistem interferențial capabil să dea fenomene de interferență cu contrast mare dar cu o sursă largă, adică cu o sursă a cărei luminozitate să fie mare. Dacă revenim la schema din Fig. 1.27 se observă:

$$\Delta(\Delta\varphi) = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta\vec{S}(\vec{u}_1 - \vec{u}_2) \quad (1.262)$$

Interferența e cu atât mai bună cu cât $\Delta(\Delta\varphi)$ este mai mică și ea devine maximă dacă $\vec{u}_1 = \vec{u}_2$. Acest fapt se petrece pentru toate sistemele care sunt capabile de a produce două unde pornind de la o singură undă incidentă, adică de a obține două unde coerente prin divizarea amplitudinii. Lamele cu fețe plan paralele constituite din doi dioptri plani realizează o astfel de dedublare a unei incidente.

Atunci când sursa este extinsă, undele care interferă sunt cele care provin din aceeași rază primară. Deoarece grosimea este constantă, direcțiile de propagare a acestor unde sunt paralele iar interferența se obține la infinit.

Presupunem că o undă incidentă cade pe o lamă cu fețe plan paralele. O parte din această undă este reflectată iar o altă parte este transmisă. Ambele raze au amplitudini mai mici decât ale razei incidente. Spunem că amplitudinea a fost divizată. Dacă cele două unde pot fi aduse într-un punct ele pot interfera dacă diferența de drum dintre ele este mai mică decât lungimea de coerență. Dacă această diferență este mai mare decât lungimea de coerență, în punctul respectiv ajung grupuri de undă diferite și fenomenul nu apare. Din acest motiv lama trebuie să fie subțire. O lamă este subțire dacă grosimea ei este mai mică decât lungimea de coerență a radiației respective.

Figura 1.32: Interferența realizată prin divizarea amplitudinii

În Fig. 1.32 este prezentat un mod practic de a se realiza interferența. Din unda incidentă SI_1 în punctul I_1 apare o undă reflectată și una refractată. Unda refractată se reflectă în I_2 pe a doua față a lamei și se refractă în punctul I_3 pe prima față a lamei. Direcțiile de propagare a celor două unde astfel obținute sunt paralele. Pentru ca ele să interfere, în calea lor trebuie pusă o lentilă astfel ca ele să ajungă în același punct P din planul focal al acesteia, unde interfere.

Divizarea amplitudinii unei unde incidente

Fie o undă luminoasă cu amplitudinea egală cu unitatea care cade pe o lamă cu fețe plan paralele sub un unghi de incidență foarte mic în raport cu normala (Fig. 1.33). Indicele de refracție al mediului din care vine lumina este n_0 iar indicele de refracție al mediului pe care cade lumina este n . Coeficienții de reflexie și transmisie pentru primul dioptru sunt, indiferent de polarizarea undei incidente:

$$r_1 = \frac{n_0 - n}{n_0 + n} \quad (1.263)$$

$$t_1 = \frac{2n_0}{n_0 + n} \quad (1.264)$$

Pentru al doilea dioptru acești coeficienți sunt:

$$r_2 = \frac{n - n_0}{n_0 + n} \quad (1.265)$$

Figura 1.33: Amplitudinea undelor transmisă și reflectată

$$t_2 = \frac{2n}{n_0 + n} \quad (1.266)$$

Constatăm că dacă $n > n_0$, $r_2 = -r_1 = r > 0$. Deoarece $r_1 < 0$ înseamnă că la reflexia pe primul dioptru are loc o modificare a fazei undei reflectate față de cea incidentă cu π . Amplitudinile undelor care apar din unda primă datorită reflexiilor și refracțiilor succesive sunt prezentate direct în Fig. 1.33.

Pentru sticlă aflată în aer $n = 1,5$, $n_0 = 1$. Se obține astfel pentru undele ce revin în mediul inițial (reflectate):

$$r = 0,2 \quad t_1 t_2 r = 0,192 \quad t_1 t_2 r^3 = 0,0076 \quad t_1 t_2 r^5 = 0,0003$$

Pentru undele transmise:

$$t_1 t_2 = 0,96 \quad t_1 t_2 r^2 = 0,038 \quad t_1 t_2 r^4 = 0,0015 \quad t_1 t_2 r^6 = 0,00006$$

Din valorile de mai sus rezultă că ne putem limita la studiul interferenței primelor două unde reflectate sau transmise deoarece amplitudinile restului razelor sunt foarte mici. Pe de altă parte deoarece amplitudinile primelor două unde reflectate au aproape aceiași valoare, franjele obținute prin reflexie sunt mai contrastante decât cele obținute prin transmisie.

Figura 1.34: Diferența de drum optic în cazul lamei cu fețe plan paralele

Pentru sticlă argintată $r = 0,95$, $t_1 t_2 = 0,01$. Rezultă:

$$r = 0,95 \quad t_1 t_2 r = 0,0095 \quad t_1 t_2 r^3 = 0,0086 \quad t_1 t_2 r^5 = 0,0077$$

$$t_1 t_2 = 0,01 \quad t_1 t_2 r^2 = 0,0095 \quad t_1 t_2 r^4 = 0,0081 \quad t_1 t_2 r^6 = 0,0073$$

În acest caz nu ne putem limita la studiul a două unde. Prin reflexie toate undele cu excepția primeia au aproape aceeași amplitudine. Prin transmisie toate undele au amplitudini apropiate.

Diferența de drum în cazul unei lame cu fețe plan paralele

Să considerăm cazul unei lame (Fig.1.34) pentru care, prin reflexie, se poate considera că la interferență contribuie doar primele două unde. Aceasta este cazul unui coeficient de reflexie mic și a unui coeficient de refracție mare.

Pentru razele (1) și (2) diferența de drum optic este:

$$\delta = n(AB + BC) - \left(DC - \frac{\lambda}{2} \right) \quad (1.267)$$

În relația de mai sus:

$$AB = BC = \frac{e}{\cos r}$$

$$DC = 2eAC \sin i = 2e \frac{e}{\cos r} \sin i$$

Atunci:

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{2ne}{\cos r} - 2e \frac{\sin r}{\cos r} \sin i + \frac{\lambda}{2} = \frac{2ne}{\cos r} - 2en \frac{\sin^2 r}{\cos r} + \frac{\lambda}{2} \\ \delta &= 2ne \cos r + \frac{\lambda}{2} \end{aligned} \quad (1.268)$$

Pentru unghiuri de incidență mici, r este mic și:

$$\delta = 2ne + \frac{\lambda}{2} \quad (1.269)$$

Pentru unda transmisă:

$$\delta = 2n(BA + AE) - BF \quad (1.270)$$

$$\delta = 2ne \cos r \quad (1.271)$$

Se observă că în acest caz nu avem pierdere de $\lambda/2$.

Inelele lui Haidinger Acestea sunt figurile de interferență care se obțin când o lamă cu fețe plan paralele este iluminată de o sursă extinsă (Fig. 1.35). Intensitatea obținută este egală cu:

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \frac{2\pi\delta}{\lambda} \quad (1.272)$$

unde diferența de drum optic δ este dată de relația (1.268).

Deoarece grosimea lamei este constantă ansamblul punctelor pentru care diferența de fază este aceeași este definită de un unghi de refracție $r = ct$ adică de un unghi de incidență constant $i = ct$. De aici provine și numele de franje de egală înclinare (în raport cu normala la lamă). Inelele sunt localizate la infinit, însă cu ajutorul unei lentile convergente ele pot fi observate în planul focal al acesteia.

Figura 1.35: Inelel Haidinger

Strat antireflex

Pentru a micșora pierderile de energie din fluxul incident suprafețele sunt supuse unor tratamente specifice. Astfel pe sticla lentilelor unui obiectiv fotografic cu indicele de refracție n_s , se depune un strat transparent cu indicele de refracție n (Fig. 1.36).

Vom considera că pe sistem cade o undă cu amplitudinea E_0 sub incidență aproape normală. Pentru ca interferența să fie distructivă este necesar ca amplitudinile celor două unde să fie egale iar diferența de drum să fie egală cu un număr impar de semilungimi de undă. Vom analiza pe rând cele două condiții.

a) Pentru ca amplitudinile primelor două unde să fie egale este necesar ca:

$$r_1 = r_2 t_1 t_2 \quad (1.273)$$

unde:

Figura 1.36: Strat antireflex (n) pe sticlă (n_s)

$$t_1 = \frac{2n_0}{n_0 + n} \quad t_2 = \frac{2n}{n + n_s} \quad (1.274)$$

$$r_1 = \frac{n_0 - n}{n_0 + n} \quad r_2 = \frac{n - n_s}{n + n_s} \quad (1.275)$$

Deoarece factorii de transmisie sunt apropiați ca valoare de unitate este suficient ca $r_1 = r_2$, adică:

$$\frac{n_0 - n}{n_0 + n} = \frac{n - n_s}{n + n_s} \quad (1.276)$$

Se obține:

$$n = \sqrt{n_0 n_s} \quad (1.277)$$

Dacă lumina vine din aer pe sticlă $n_0 = 1$, iar $n_s = 1,5$ și $n = 1,22$. Nu există materiale cu un indice de refracție așa mic. Materialele al căror indice de refracție se apropie de astfel de valoare sunt: florura de magneziu MgF_2 ($n = 1,35$) sau $\text{AlF}_3\text{3NaF}$ ($n = 1,36$) care se depune pe sticlă prin evaporare în vid.

b) Diferența de drum trebuie să fie egală cu un număr impar de semilungimi de undă pe ambele fețe ale stratului antireflex. De aici rezultă:

$$\delta = 2ne = (2m + 1) \frac{\lambda}{2} \quad (1.278)$$

deoarece în această caz pierderea de o semilungime de undă are loc pe ambele fețe ale stratului antireflex. Rezultă:

$$e = \frac{\lambda}{4n} (2m + 1) \quad (1.279)$$

Pentru ca gradul de coerență temporală să fie cât mai mare este nevoie ca grosimea stratului antireflex să fie cât mai mică. Ea se obține pentru $m = 0$ și atunci:

$$e = \frac{\lambda}{4n} \quad (1.280)$$

Deoarece, în general, lumina incidentă este lumină albă alegem condiția de minim pentru lungimea de undă pentru care sensibilitatea spectrală este maximă. Aceasta este radiația verde pentru care $\lambda = 550 \text{ nm}$. Obținem pentru grosimea stratului antireflex grosimea $e = 0,12 \mu\text{m}$. Deoarece pentru celelalte radiații interferența nu este total distructivă apar reflexe bleu sau violet. Prin această tehnică reflexia se poate reduce sub 1%.

Mărirea coeficientului de reflexie

Pentru mărirea coeficientului de reflexie este necesar ca interferența dintre razele reflectate să fie constructivă. Din acest motiv este nevoie ca diferența de drum optic să fie egală cu un număr întreg de lungimi de undă, iar grosimea lamei să fie cât mai mică. Pentru aceasta indicele de refracție al stratului antireflex trebuie să fie mai mare decât indicele de refracție al sticlei pentru a se evita pierderea unei semilungimi de undă. Atunci grosimea stratului este dată tot de relația (1.280). O astfel de substanță este sulfura de zinc al cărui indice de refracție este $n = 2,35$. Deoarece amplitudinea unei incidente este egală cu unitatea, amplitudinile celor două unde sunt:

$$A_1 = -r_1 = \frac{n - 1}{n + 1} = 0,4$$

$$A_2 = t_1 t_2 r_2 = \frac{2}{1 + n} \frac{2n}{1 + n} \frac{n - n_0}{n + n_0} = 0,189$$

Astfel coeficientul de reflexie în intensitate este egal cu amplitudinea unei obținută prin interferența celor două unde:

$$R = I = (A_1 + A_2)^2 = 0,347 \quad (1.281)$$

Se observă că acesta este practic de 9 ori mai mare decât coeficientul de reflexie pentru sticla pură.

Interferometrul Fabri -Pérot

Vom studia mai întâi interferența unui mare număr de fascicule luminoase care apar prin transmisie atunci când o undă de lumină cade pe o lamă transparentă dielectrică cu fețe plan paralele de grosime e și indice de refracție n . Pentru a calcula amplitudinea rezultantă vom ține cont de valoarea amplitudinilor și a diferenței de fază dintre undele care interferă.

După cum rezultă din Fig. 1.33, amplitudinile undelor care interferă sunt:

$$\begin{aligned} E_1 &= t_1 t_2 E_0 \\ E_2 &= t_1 t_2 r^2 E_0 e^{i\varphi} \\ E_3 &= t_1 t_2 r^4 E_0 e^{i2\varphi} \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (1.282)$$

unde:

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \delta \quad (1.283)$$

unde δ este diferența de fază dintre două unde succesive. În plus:

$$r_1^2 + t_1 t_2 = 1 \quad (1.284)$$

Această relație se poate scrie și altfel:

$$R + T = 1 \quad (1.285)$$

unde $R = r_1^2$ și $T = t_1 t_2$ sunt factorii de reflexie, respectiv de transmisie în intensitate. Atunci amplitudinile complexe ale undelor transmise sunt:

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0 T \\ E_2 &= E_0 R T e^{i\varphi} \\ E_3 &= E_0 R^2 T e^{i2\varphi} \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (1.286)$$

Amplitudinea complexă rezultantă în punctul P este suma amplitudinilor complexe ale undelor transmise:

$$E = \sum E_i = E_0 T [1 + R e^{i\varphi} + R^2 e^{i2\varphi} + \dots + R^k e^{ik\varphi} \dots] \quad (1.287)$$

Această sumă este o progresie geometrică cu rația $R e^{i\varphi}$. Cum $R < 1$:

$$E = E_0 T \frac{1}{1 - R e^{i\varphi}} \quad (1.288)$$

Intensitatea luminii transmise este:

$$I \sim |E|^2 \sim |E_0|^2 T^2 \frac{1}{|1 - R e^{i\varphi}|^2} \quad (1.289)$$

După câteva operații elementare se obține:

$$I = I_0 \frac{T^2}{1 + R^2 - 2R \cos \varphi} \quad (1.290)$$

$$I = I_0 \frac{T^2}{(1 - R)^2} \frac{1}{1 + \frac{4R}{(1 - R)^2} \sin^2 \frac{\varphi}{2}} \quad (1.291)$$

Pentru $\varphi = 2m\pi$ unde m este un număr întreg, intensitatea undei în punctul P este maximă:

$$I = I_0 \left(\frac{T}{1 - R} \right)^2 = I_{\max} \quad (1.292)$$

În absența absorbției $T = 1 - R$, $I_{\max} = I_0$. Dacă $A \neq 0$, adică dacă există absorbție $I_{\max} < I_0$. Atunci:

$$I = \frac{I_{\max}}{1 + M \sin^2 \frac{\varphi}{2}} \quad (1.293)$$

unde:

$$M = \frac{4R}{(1 - R)^2} \quad (1.294)$$

Funcția:

Figura 1.37: Funcția lui Airy pentru diverși factori de reflexie

$$A(\varphi) = \frac{1}{1 + M \sin^2 \frac{\varphi}{2}} \quad (1.295)$$

poartă numele de funcția lui Airy și este reprezentată în Fig.1.37. Ea constă dintr-o succesiune de maxime cu profil lorentzian, lărgimea la semiînălțime determinându-se din condiția $A(\varphi) = 0,5$:

$$\frac{1}{1 + M \sin^2 \frac{\varphi}{2}} = \frac{1}{2} \quad (1.296)$$

Rezultă:

$$\Delta\varphi = \frac{4}{\sqrt{M}} = \frac{2(1-R)}{\sqrt{R}} \quad (1.297)$$

Cu cât R este mai mare ca atât maximele sunt mai ascuțite.

Interferometrul Fabry-Pérot (Fig.1.38) este utilizat ca un spectrometru cu înaltă rezoluție precum și ca o cavitate rezonantă în laser. În principiu interferometrul Fabry-Pérot constă din două suprafețe puternic reflectante paralele aflate la distanța e una de alta. În practică se utilizează două lame de sticlă plane paralele cu câte o suprafață argintată. Lățimea stratului de aer cuprins între cele două lame este de câțiva milimetri până la câțiva centimetri atunci când aparatul este utilizat ca interferometru. Distanța dintre cele două lame este mult mai mare atunci când este utilizat ca o cavitate rezonantă (de ordinul dm).

Figura 1.38: Interferometrul Fabry-Pérot

Interferometrul Fabry-Pérot utilizat ca spectrometru

Datorită fineței inelelor obținute, interferometrul Fabry-Pérot este utilizat ca spectrometru, în vederea analizei cu precizie a distribuției spectrale a surselor luminoase. Vom estima diferitele mărimi caracteristice:

a) Dispersia:

$$D = \left| \frac{d\varphi}{d\lambda} \right| \quad (1.298)$$

cu $\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} 2e \cos r$. Rezultă:

$$D = \left| -\frac{2\pi}{\lambda^2} 2e \cos r \right| = \frac{4\pi e}{\lambda^2} \cos r \quad (1.299)$$

b) Factorul de finețe:

$$F = \frac{2\pi}{\Delta\varphi} = \frac{\pi\sqrt{M}}{2} \quad (1.300)$$

În spectrul vizibil pentru cele mai multe interferometre Fabry-Pérot $F = 30$.

c) Puterea de rezoluție:

$$P_R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} \quad (1.301)$$

unde $\Delta\lambda$ corespunde lărgimii la semiînălțime a maximelor funcției lui Airy.

$$\Delta\lambda = \frac{\Delta\varphi_{1/2}}{D} \quad (1.302)$$

Atunci:

$$P_R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{\pi\sqrt{M}e \cos r}{\lambda} = pF \quad (1.303)$$

unde p este ordinul de interferență:

$$p = \frac{2e \cos r}{\lambda} \quad (1.304)$$

În tabelul alăturat se observă că puterea de rezoluție variază mult dacă factorul de reflexie R crește de la 0,8 la 0,99. Am considerat $\lambda = 0,5 \mu\text{m}$, $e = 1 \text{ cm}$ și $i = 0$.

R	0,80	0,9	0,95	0,99
F	14	30	61	313
P_R	$0,56 \times 10^6$	$1,2 \times 10^6$	$2,45 \times 10^6$	125×10^6
$\Delta\lambda$	0,89	0,42	0,21	0,004

Interferometrul Fabry-Pérot utilizat ca o cavitate rezonantă

Interferometrul Fabry-Pérot este utilizat în laserii cu gaz drept cavitate rezonantă capabilă să transmită numai anumite radiații luminoase din cele ce sunt prezente în fascicolul inițial. Astfel, radiațiile pentru care $\Delta\varphi = 2m\pi$ unde m este întreg sunt singurele transmise, iar dacă ținem cont de alura curbei ce dă intensitatea transmisă I_t , toate celelalte radiații sunt practic anulate prin interferență distructivă. La incidență normală:

$$\varphi = \frac{4\pi ne}{\lambda} = 2m\pi \quad (1.305)$$

de unde:

$$\lambda = \frac{2ne}{m} \quad (1.306)$$

Figura 1.39: Pana optică

Afirmăm că cele două lame formează o cavitate rezonantă. Ansamblul interferometric este un mediu optic activ ce amplifică unda care-l traversează; se obține astfel un amplificator de unde luminoase de frecvențe bine determinate.

1.3.6 Pana optică

Pana optică este formată din două suprafețe plane ce fac între ele un unghi mic și care delimitează un mediu optic cu indicele de refracție n (Fig.1.39).

Fie n indicele de refracție al penei aflată în aer, SA raza incidentă și razele coerente (1) și (2). Acestea par a proveni dintr-un plan ce trece prin O . Acesta este planul de localizare a franjelor provenite de la razele paralele cu SA .

În cazul incidenței normale pe fața superioară planul de localizare al franjelor devine foarte apropiat de această suprafață. Spunem că franjele sunt localizate pe lamă.

La incidență normală B este foarte apropiat de A iar diferența de

Figura 1.40: Pana optică; punctele I_1 și I_2 în care se formează două maxime succesive

drum dintre cele două raze este:

$$\delta = 2nd + \frac{\lambda}{2} \quad (1.307)$$

unde d este grosimea penei în acel loc.

Condiția de maxim este:

$$\delta = 2nd + \frac{\lambda}{2} = m\lambda \quad (1.308)$$

Fie d_m grosimea lamei la care se obține maximum de ordin m și d_{m+1} grosimea lamei la care se obține maximum de ordinul $m + 1$. Atunci:

$$2nd_m + \frac{\lambda}{2} = m\lambda \quad (1.309)$$

$$2nd_{m+1} + \frac{\lambda}{2} = (m + 1)\lambda \quad (1.310)$$

Prin scăderea din relația (1.310) a relației (1.309) se obține:

$$2n(d_{m+1} - d_m) = \lambda$$

Din Fig. 1.40 rezultă că interfranța se poate scrie astfel:

$$i = I_1 I_2 = \frac{(d_{m+1} - d_m)}{\sin \alpha} = \frac{1}{2n} \frac{\lambda}{\sin \alpha} \quad (1.311)$$

Cum α este foarte mic:

$$i = \frac{\lambda}{2n\alpha} \quad (1.312)$$

Franjele de interferență care se obțin sunt drepte paralele cu muchia penei.

Figura 1.41: Unda difractată: a) pe o apertură mare b) pe o apertură mică

1.4 Difrakția undelor

1.4.1 Principiul Huygens - Fresnel

Se pune problema de a studia ce se petrece atunci când unda luminoasă cade pe anumite obstacole.

Un studiu atent al repartiției iluminării la frontiera dintre regiunea luminoasă și regiunea de umbră geometrică a obiectelor opace de diverse forme a arătat că lumina poate ocoli corpurile interpușe între sursă și un ecran. Fenomenul poartă denumirea de difracție.

Problema a fost parțial rezolvată de Huygens care a considerat că fiecare punct al frontului de undă la un moment dat, devine sursă secundară de oscilație. La un moment ulterior noul front de undă este dat de înfășurătoarea fronturilor undelor secundare.

Astfel poate fi explicată calitativ propagarea undelor prin aperturi mari care este prezentată în Fig.1.41 a.

Trebuie remarcat faptul că în ambele cazuri la marginea obstacolului lumina pătrunde în regiunea de umbră geometrică. În cazul unei aperturi mici (Fig. 1.41 b) dacă asupra acesteia cade o undă plană, elementul de suprafață al aperturii acționează ca o sursă punctiformă și în cealaltă parte a ecranului se formează o undă sferică. Totuși luarea în considerare doar a principiului lui Huygens nu permite explicarea în detaliu a fenomenelor respective. Nu este elucidată distribuția intensității undelor

Figura 1.42: Construcție pentru aplicarea principiului Huygens-Fresnel

în zona de difracție. Deoarece intensitatea luminoasă este proporțională cu pătratul amplitudinii vectorului câmp electric, problema se reduce la determinarea amplitudinii undei în zonele de difracție.

Pentru a rezolva această problemă Fresnel a completat principiul lui Huygens, rezultând astfel principiul Huygens - Fresnel (Fig.1.42).

Înconjurăm sursa S de oscilație cu o suprafață σ și vom considera perturbația care se manifestă în punctul P situat în exteriorul acestei suprafețe. Această perturbație va fi o rezultantă a acțiunii tuturor undelor secundare emise de fiecare element de suprafață $d\sigma$. Vom studia deci suprapunerea în punctul P a tuturor undelor secundare emise de fiecare element de suprafață $d\sigma$. Toate oscilațiile secundare sunt coerente (fazele și amplitudinile lor sunt diferite de ale sursei primare). Atunci în punctul P amplitudinea undei secundare este proporțională cu amplitudinea surselor secundare, proporțională cu suprafața elementului emițător și invers proporțională cu distanța de la elementul $d\sigma$ la punctul P . Fresnel a introdus în plus și un coeficient de oblicitate $k(\Psi)$ a cărui valoare este maximă atunci când direcția normalei \vec{n} coincide cu direcția lui \vec{r} ($\Psi = 1$) și devine nul când $\Psi \geq \pi/2$. Introducerea coeficientului exprimă absența undelor ce s-ar propaga în sens opus. Atunci amplitudinea vibrațiilor provenite de la un element de arie $d\sigma$ se poate determina astfel:

Dacă admitem că sursa S oscilează după legea:

$$E = E_0 \exp(-i\omega t) \quad (1.313)$$

în punctul A amplitudinea va fi proporțională cu:

$$\frac{E_0}{r_0} \exp(ikr_0) \exp(-i\omega t) \quad (1.314)$$

În punctul P perturbația determinată de elementul de suprafață $d\sigma$ va fi invers proporțională cu distanța r :

$$dE = k(\Psi) \left[\frac{E_0 \exp(ikr_0)}{r_0} \right] \frac{\exp(ikr)}{r} d\sigma \quad (1.315)$$

unde $k = 2\pi/\lambda$.

1.4.2 Clasificarea fenomenelor de difracție

Cele mai multe fenomene de difracție se obțin cu ajutorul unui ecran opac care conține o apertură de formă arbitrară. Undele secundare care provin din diverse părți ale aperturii interferă și dau naștere unei imagini de difracție. Fenomenele de difracție se pot clasifica astfel în două mari clase:

a) Fenomenele în care sursa și ecranul de observație se află la distanță finită față de obstacolul ce produce difracția poartă numele de difracție Fresnel. În acest caz nu se poate neglija curbura suprafeței de undă a undelor ce ating obstacolul respectiv.

b) Fenomenele în care sursa de lumină și paravanul pe care se observă figura de difracție se găsesc la o distanță infinită față de apertura care provoacă difracția poartă denumirea de difracție Fraunhofer. Ea este difracția suferită de undele plane. Practic, aceste fenomene sunt ușor de tratat teoretic. Pentru a obține difracția Fraunhofer se plasează sursa de lumină în focarul unei lentile convergente și se observă imaginea de difracție în planul focal al altei lentile convergente.

1.4.3 Difracția Fresnel. Teoria zonelor Fresnel

Fie o sursă S care emite o undă sferică monocromatică și o suprafață de undă σ de rază R ca în Fig. 1.43.

Într-un punct P exterior suprafeței σ perturbația totală este definită de expresia:

$$E_o(P) = \frac{E_0 \exp(ikR)}{R} \int \int_{\sigma} k(\Psi) \frac{\exp(ikr)}{r} d\sigma \quad (1.316)$$

Figura 1.43: Difrakție Fresnel. Zone Fresnel

Pentru a efectua această sumare vom folosi metoda propusă de Fresnel și anume aceea de a diviza frontul de undă în zone inelare numite zone Fresnel. Împărțirea se face în așa fel încât diferența de drum optic în punctul P a undelor secundare ce provin de la două zone vecine să fie $\lambda/2$ (diferența de fază este π). Astfel undele ce provin din două zone vecine sunt în opoziție de fază, încât în P se formează un minim de interferență.

Astfel:

$$A_1P - A_0P = A_2P - A_1P = \dots = A_nP - A_{n-1}P \dots = \lambda/2$$

Rezultă:

$$A_nP - A_0P = n \frac{\lambda}{2} \quad (1.317)$$

sau:

$$r_n = r_0 + n \frac{\lambda}{2} \quad (1.318)$$

Vom demonstra în continuare că ariile zonelor Fresnel sunt egale. Notățiile ρ_n și h_n sunt arătate în Fig.1.43.

Astfel:

$$\rho_n^2 = R^2 - (R - h_n)^2 = r_n^2 - (r_0 + h_n)^2 \quad (1.319)$$

De aici:

$$h_n = \frac{r_n^2 - r_0^2}{2(R + r_0)} \quad (1.320)$$

Din relația (1.318) se obține:

$$r_n^2 = r_0^2 + r_0 n \lambda + n^2 \frac{\lambda^2}{4}$$

$$r_n^2 - r_0^2 = r_0 n \lambda + n^2 \frac{\lambda^2}{4}$$

În cazul când $\lambda \ll r_0$ rezultă:

$$r_n^2 - r_0^2 = r_0 n \lambda \quad (1.321)$$

și înlocuind în relația 1.320:

$$h_n = k \frac{r_0}{R + r_0} \frac{\lambda}{2} \quad (1.322)$$

Aria zonei de înălțime h_n este:

$$S_n = n \frac{2\pi r_0 R}{(R + r_0)} \frac{\lambda}{2} = 2\pi R h_n \quad (1.323)$$

și atunci aria zonei n este:

$$S = S_{n+1} - S_n = \frac{\pi r_0 R \lambda}{R + r_0} \quad (1.324)$$

Se observă că toate zonele Fresnel au aceeași arie.

Elementul de suprafață al unei zone este:

$$d\sigma = 2\pi (R \sin \theta) R d\theta \quad (1.325)$$

Dar:

$$r^2 = (R + r_0)^2 - 2R(R + r_0) \cos \theta + R^2 \quad (1.326)$$

și deci:

$$2rdr = 2R(R + r_0) \sin \theta d\theta \quad (1.327)$$

astfel că:

$$d\sigma = \frac{2\pi Rr}{R + r_0} dr \quad (1.328)$$

Presupunem că în interiorul unei zone $k(\Psi)$ este constant.
Atunci perturbația creată de zona n în punctul P este:

$$E_n = 2\pi \frac{E_0 \exp(ikR)}{R + r_0} \int_{r_0 + (n-1)\lambda/2}^{r_0 + n\lambda/2} k_n \exp(ikr) dr \quad (1.329)$$

unde k_n este coeficientul de oblicitate în zona respectivă.

$$\begin{aligned} \int_{r_0 + (n-1)\lambda/2}^{r_0 + n\lambda/2} \exp(ikr) dr &= \frac{\exp[ik(r_0 + n\lambda/2)] - \exp[r_0 + (n-1)\lambda/2]}{ik} = \\ &= \frac{[\exp(ikr_0)] \{ \exp(ink\lambda/2) - \exp[ik(n-1)\lambda/2] \}}{ik} = \\ &= \exp(ikr_0) \frac{[\exp(ink\lambda/2)] [1 - \exp(-ik\lambda/2)]}{ik} = \\ &= \frac{\exp(ikr_0) (-1)^n 2\lambda}{i2\pi} = i \frac{\exp(ikr_0) (-1)^{n+1} \lambda}{\pi} \end{aligned}$$

deoarece:

$$\exp(ink\lambda/2) = \exp\left(in \frac{2\pi \lambda}{\lambda} \frac{\lambda}{2}\right) = \exp(in\pi) = (-1)^n$$

$$1 - \exp(-ik\lambda/2) = 1 - \exp\left(-i \frac{\lambda}{2} \frac{2\pi}{\lambda}\right) = 2$$

Atunci pentru o zonă Fresnel:

$$E_n = 2i\lambda \frac{(-1)^{n+1} E_0 \exp[ik(r_0 + R)]}{R + r_0} k_n \quad (1.330)$$

Se observă că amplitudinile E_n iau alternativ valori pozitive și negative. Aceasta înseamnă că undele ce provin din zone adiacente sunt în opoziție de fază și tind să se anuleze. Calculul contribuției tuturor zonelor Fresnel se rezumă la calculul unei serii cu semne alternante:

$$E = |E_1| - |E_2| + |E_3| - |E_4| + \dots$$

Regrupăm termenii astfel:

$$E = \frac{|E_1|}{2} + \left(\frac{|E_1|}{2} - |E_2| + \frac{|E_3|}{2} \right) + \left(\frac{|E_3|}{2} - |E_4| + \frac{|E_5|}{2} \right) + \dots \quad (1.331)$$

Întrucât factorul $k_n(\Psi)$ nu variază substanțial de la o zonă la altă zonă putem presupune:

$$\left(\frac{|E_{k-1}|}{2} - |E_k| + \frac{|E_{k+1}|}{2} \right) \cong 0 \quad (1.332)$$

Rezultatul sumei (1.331) depinde de numărul n de zone Fresnel.

Dacă n este impar:

$$E = \frac{|E_1|}{2} + \left(\frac{|E_1|}{2} - |E_2| + \frac{|E_3|}{2} \right) \dots + \left(\frac{|E_{n-2}|}{2} - |E_{n-1}| + \frac{|E_n|}{2} \right) + \frac{|E_n|}{2}$$

și:

$$E \cong \frac{|E_1|}{2} + \frac{|E_n|}{2} \quad (1.333)$$

Dacă n este par:

$$E = \frac{|E_1|}{2} + \dots + \left(\frac{|E_{n-3}|}{2} - |E_{n-2}| + \frac{|E_{n-1}|}{2} \right) + \frac{|E_{n-1}|}{2} - |E_n|$$

Dar pentru n mare $|E_n| \cong |E_{n-1}|$ și:

$$E \cong \frac{|E_1|}{2} - \frac{|E_n|}{2} \quad (1.334)$$

Astfel:

$$E \cong \frac{|E_1|}{2} \pm \frac{|E_n|}{2} \quad (1.335)$$

unde semnul plus corespunde pentru n impar iar semnul minus corespunde pentru n par.

Putem considera pentru ultima zonă Fresnel $\Psi = \pi/2$ și $k(\Psi) = 0$. Atunci:

$$E = \frac{|E_1|}{2} \quad (1.336)$$

De aici rezultă că amplitudinea vibrațiilor în P este jumătate din amplitudinea creată în P de prima zonă Fresnel. Intensitatea radiației fiind proporțională cu pătratul amplitudinii, rezultă că intensitatea globală în P este $1/4$ din cea determinată de prima zonă Fresnel.

Se pot face o serie de experiențe spectaculoase pentru a pune în evidență aceste concluzii. Astfel putem determina aria primei zone Fresnel. Pentru undele luminoase când $R = 1\text{ m}$ și $r_0 = 1\text{ m}$ aceasta este de aproximativ 1 mm^2 . Astfel dacă se lasă descoperită doar prima zonă Fresnel, intensitatea luminoasă va fi de 4 ori mai intensă decât în cazul întregului front de undă. Dacă se lasă descoperite doar primele două zone luminoase iluminarea în punctul P devine foarte mică.

Într-o altă experiență presupunem că aria unei deschideri circulare practică într-un ecran opac este egală, pentru valori bine determinate pentru R și r_0 , cu aria primei zone Fresnel. Dacă deplasăm punctul P în lungul dreptei care îl unește cu sursa de lumină se observă o variație periodică a intensității luminoase. Aceasta se produce deoarece devin active succesiv una, două, trei, etc. zone Fresnel. Aceasta se datorează faptului că aria unei zone Fresnel este o funcție ce depinde de r_0 , R și λ .

Amplitudinea în punctul P poate fi mărită dacă se utilizează așa numitele "rețele zonale". Acestea sunt astfel construite încât acoperă toate zonele Fresnel pare sau impare. Dacă se acoperă toate zonele pare atunci:

$$E = |E_1| + |E_2| + \dots + |E_{2n-1}| \quad (1.337)$$

Figura 1.44: Dispozitiv pentru realizarea difracției unei unde plane

și deci se obține o creștere importantă a iluminării punctului P (și a unei mici zone din jurul său).

Dacă sunt acoperite doar primele m zone Fresnel iar restul sunt lăsate libere $|E_n| \rightarrow 0$ deoarece $\Psi(\pi/2) = 0$. Atunci:

$$E_0(P) = \frac{1}{2} |E_{m+1}| \quad (1.338)$$

Astfel se observă că în punctul P intensitatea luminoasă este diferită de zero.

1.4.4 Difracția Fraunhofer

În Fig.1.44 se prezintă schema unui dispozitiv de observare a difracției undelor plane.

Undele emise de sursa punctiformă S sunt transformate de lentila L_1 într-o undă plană, care va traversa apertura (circulară sau dreptunghiulară) practică în ecran. Razele ce provin de la această deschidere trec prin lentila L_2 și dau o imagine de difracție pe un ecran aflat în planul focal al lentilei L_2 .

Aplicarea principiului Huygens-Fresnel în acest caz este foarte simplă. Admitem că suprafața σ se confundă cu planul ecranului și cuprinde în întregime apertura considerată. În cazul cel mai simplu, adică al

Figura 1.45: Unda difractată după direcția φ

incidenței normale a undei pe suprafața ecranului, diferența de drum dintre undele ce provin din diverse porțiuni ale fantei este determinată de unghiul φ de difracție. Aceasta deoarece toate undele difractate sub un unghi φ dat sunt strânse în același punct din planul focal.

Calculul intensității sistemului de franje de difracție se rezumă la calculul interferenței undelor emise de sursele elementare fictive. Cum toate aceste surse sunt coerente vom calcula amplitudinea vibrației rezultante și apoi vom calcula pătratul acesteia. Aceasta va permite calculul intensității luminoase în planul focal.

Să considerăm o undă plană care cade pe o fantă de lărgime b (Fig. 1.45) practică în ecranul opac. Vom considera axa Ox în lungul fantei de lărgime b , iar axa Oz perpendiculară pe suprafața fantei.

Considerăm că segmentul dx emite o undă plană în direcția φ cu defazajul:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi\delta}{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda}x \sin \varphi = kx \sin \varphi \quad (1.339)$$

Pentru a determina amplitudinea acestei unde considerăm că fanta în totalitate emite o radiație de amplitudine E_0 . În consecință un segment dx din fanta de lărgime b va determina o undă a cărei amplitudine este $E_0 dx/b$. Atunci unda emisă de segmentul dx în direcția φ este:

$$dE_\varphi = \frac{E_0 dx}{b} \exp [i(\omega t - kx \sin \varphi)] \quad (1.340)$$

Intensitatea câmpului electric E_φ datorat interferenței acestor unde, emise de toate zonele dx se obține integrând expresia de mai sus:

$$E_\varphi = \frac{E_0}{b} \exp(i\omega t) \int_0^b \exp(-ikx \sin \varphi) dx \quad (1.341)$$

$$E_\varphi = \frac{E_0}{b} \exp(i\omega t) \frac{\exp(-ikx \sin \varphi)}{-ik \sin \varphi} \Big|_0^b$$

$$E_\varphi = E_0 \exp(i\omega t) \frac{\exp(-ikb \sin \varphi) - 1}{-ikb \sin \varphi}$$

sau:

$$E_\varphi = \frac{E_0 \exp\left(\frac{-ikb \sin \varphi}{2}\right) - \exp\left(\frac{ikb \sin \varphi}{2}\right)}{-i(kb \sin \varphi)} \exp\left[i\left(\omega t - \frac{kb \sin \varphi}{2}\right)\right]$$

$$E_\varphi = E_0 \frac{-2i \sin\left(\frac{kb \sin \varphi}{2}\right)}{-2i\left(\frac{kb \sin \varphi}{2}\right)} \exp\left[i\left(\omega t - \frac{kb \sin \varphi}{2}\right)\right]$$

$$E_\varphi = E_0 \frac{\sin\left(\frac{kb \sin \varphi}{2}\right)}{\left(\frac{kb \sin \varphi}{2}\right)} \exp\left[i\left(\omega t - \frac{kb \sin \varphi}{2}\right)\right] \quad (1.342)$$

Notând cu:

$$u = \frac{1}{2} kb \sin \varphi = \frac{\pi b}{\lambda} \sin \varphi \quad (1.343)$$

atunci amplitudinea unei unde care se propagă în lungul unei direcții ce formează un unghi φ cu axa Oz este egală cu:

$$E_{0\varphi} = E_0 \frac{\sin u}{u} \quad (1.344)$$

iar intensitatea este:

$$I_\varphi = I_0 \left(\frac{\sin u}{u}\right)^2 \quad (1.345)$$

Figura 1.46: Rezolvarea grafică a ecuației $\operatorname{tg} u = u$

Se observă că intensitatea este maximă când $\varphi \rightarrow 0$ și $u = \frac{\pi b}{\lambda} \sin \varphi \rightarrow 0$. Atunci:

$$\frac{\sin u}{u} \rightarrow 1$$

Minimele intensității se obțin din condiția $I = 0$ adică:

$$\begin{aligned} \sin u &= 0 \\ u &= p\pi, \quad (p = \pm 1, \pm 2, \pm \dots) \end{aligned}$$

Atunci:

$$\frac{kb \sin \varphi}{2} = p\pi$$

Cum $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ rezultă:

$$\sin \varphi = p \frac{\lambda}{b}$$

Figura 1.47: Intensitatea luminii difractate pe o fantă

Între minime se găsesc maxime secundare. Ele se obțin punând condiția:

$$\frac{dI}{du} = 0 \quad (1.346)$$

$$I_0 \frac{2u^2 \sin u \cos u - 2u \sin^2 u}{u^4} = 0 \quad (1.347)$$

Rezultă:

$$\operatorname{tg} u = u \quad (1.348)$$

Aceasta este o ecuație transcendențială. Rezolvarea acesteia se face grafic, prin intersecția funcției $y = \operatorname{tg} u$ cu dreapta $y = u$. Se observă din Fig.1.46 că maximele secundare se obțin aproximativ pentru:

$$u = (2n + 1) \frac{\pi}{2}, \quad (n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots) \quad (1.349)$$

Trebuie remarcat că valorile extreme ale funcției $\left(\frac{\sin u}{u}\right)^2$ se micșorează rapid. Dacă se consideră $I_0 = 1000$ și notăm cu I_1 intensitatea primului maxim secundar, cu I_2 intensitatea celui de-al doilea maxim secundar găsim:

$$I_0 : I_1 : I_2 = 1000 : 47 : 17$$

Astfel majoritatea fluxului luminos este concentrat în intervalul definit de:

$$\sin \varphi = \pm \frac{\lambda}{b} \quad (1.350)$$

Doar 5% din fluxul incident va fi concentrat pe maximul de ordinul întâi iar 2% pe maximul de ordinul al doilea.

Fig.1.47 reprezintă iluminarea rezultată prin difracția unei plane pe o fantă.

1.4.5 Rețeaua de difracție

Vom studia fenomenul care are loc când un fascicol cade pe un mare număr de fante de același tip practicate într-un ecran opac. Efectul interferențial suplimentar nu se poate manifesta dacă aceste fante nu sunt repartizate de o manieră regulată.

Să considerăm o structură regulată compusă din N fante paralele; considerăm că toate fantele au o lărgime b și sunt plasate una față de alta la distanța d . O astfel de structură se numește rețea de difracție. În acest caz putem trata unidimensional problema, considerând axa Ox de-a lungul lățimii fantelor.

Presupunem o undă monocromatică plană care cade sub incidență normală pe această structură. Vom calcula intensitatea luminii I_φ ce se propagă în lungul unei direcții ce formează un unghi φ cu normala la planul în care sunt practicate cele N fante (Fig.1.48).

Fiecare element dx a fantei n trimite în direcția fixată de unghiul φ o undă descrisă de ecuația:

$$\frac{E_0}{b} dx \exp i\{\omega t - k[(n-1)d + x] \sin \varphi\} \quad (1.351)$$

unde: $\Delta\theta = k[(n-1)d + x] \sin \varphi$ este defazaajul.

Toată fanta emite unda:

$$\frac{E_0}{b} \exp i[\omega t - k(n-1)d \sin \varphi] \int_0^b \exp(-ikx \sin \varphi) dx \quad (1.352)$$

Pentru a calcula contribuția celor N fante trebuie să sumăm undele pe care ele le produc. Deoarece undele sunt coerente vom aduna intensitățile câmpului electric. Se obține:

Figura 1.48: Rețea de difracție

$$\frac{E_0}{b} \exp(i\omega t) \sum_{n=1}^N \exp[-ik(n-1)d \sin \varphi] \int_0^b \exp(-ikx \sin \varphi) dx \quad (1.353)$$

Dar:

$$\frac{E_0}{b} \int_0^b \exp(-ikx \sin \varphi) dx = E_0 \frac{\sin u}{u} \quad (1.354)$$

unde:

$$u = \frac{\pi b \sin \varphi}{\lambda} \quad (1.355)$$

Acest factor nu depinde de n . Rămâne să calculăm suma:

$$S = \sum_{n=1}^N \exp[-ik(n-1)d \sin \varphi] = \sum_{n=1}^N \exp\left[-i\frac{2\pi}{\lambda}(n-1)d \sin \varphi\right] \quad (1.356)$$

Introducând notația:

$$\frac{\pi d \sin \varphi}{\lambda} = \delta$$

atunci:

$$S = \sum_{n=1}^N \exp[-2\delta(n-1)i] = 1 + \exp(-2\delta i) + \dots + \exp[-2\delta(N-1)i]$$

Această sumă este o progresie geometrică cu rația $q = \exp(-2\delta i)$.

$$S = \frac{1 - q^N}{1 - q} = \frac{1 - \exp(-2N\delta i)}{1 - \exp(-2\delta i)} \quad (1.357)$$

Amplitudinea undei este:

$$E = E_0 \frac{1 - \exp(-2N\delta i)}{1 - \exp(-2\delta i)} \frac{\sin u}{u} \quad (1.358)$$

Intensitatea undei rezultate este:

$$I = EE^* = E_0^2 \frac{[1 - \exp(-2N\delta i)][1 - \exp(2N\delta i)]}{[1 - \exp(-2\delta i)][1 - \exp(2\delta i)]} \left(\frac{\sin u}{u}\right)^2 \quad (1.359)$$

Observăm că:

$$\begin{aligned} [1 - \exp(-2N\delta i)][1 - \exp(2N\delta i)] &= 2 \left[1 - \frac{\exp(-2N\delta i) + \exp(2N\delta i)}{2} \right] \\ &= 2 \left[1 - \frac{2 \cos(2N\delta)}{2} \right] = 4 \sin^2 N\delta \end{aligned}$$

În mod analog:

$$[1 - \exp(-2\delta i)][1 - \exp(2\delta i)] = 4 \sin^2 \delta$$

Rezultă că intensitatea luminii ce este difractată după un unghi φ făcut cu normala este:

$$I_\varphi = I_0 \left(\frac{\sin u}{u}\right)^2 \left(\frac{\sin N\delta}{\sin \delta}\right)^2 \quad (1.360)$$

unde:

$$u = \frac{\pi b}{\lambda} \sin \varphi \quad (1.361)$$

$$\delta = \frac{\pi d}{\lambda} \sin \varphi \quad (1.362)$$

Factorul $\left(\frac{\sin u}{u}\right)^2$ caracterizează variația intensităților luminoase difractate de fiecare fantă. Factorul $\left(\frac{\sin N\delta}{\sin \delta}\right)^2$ ține cont de interferența fasciculelor determinate de toate fantele. Factorul I_0 caracterizează intensitatea luminii în direcția $\varphi = 0$, valoarea sa depinzând de fluxul de energie luminoasă ce cade pe rețea.

Pentru a analiza rezultatele obținute se determină variația mărimii $\left(\frac{\sin N\delta}{\sin \delta}\right)^2$ în funcție de unghiul de difracție φ . În Fig. 1.48 se arată că $d \sin \varphi$ este egală cu diferența de drum Δ dintre undele emise de două puncte echivalente din două fante vecine. Dacă Δ este egal cu un număr întreg de lungimi de undă are loc o interferență constructivă. Considerăm:

$$d \sin \varphi = m\lambda \quad (1.363)$$

unde m este un număr întreg: $0, 1, 2, 3, \dots$ și vedem ce devine factorul considerat.

$$\delta = \frac{\pi d \sin \varphi}{\lambda} = m\pi \text{ implică } \sin N\delta = 0 \text{ și } \sin \delta = 0$$

Din acest motiv vom considera cazul la limită pentru care $\delta \rightarrow m\pi$

$$\lim_{\delta \rightarrow m\pi} \left(\frac{\sin N\delta}{\sin \delta}\right) = N$$

Atunci:

$$(I_\varphi)_{\max} = I_0 \left(\frac{\sin u}{u}\right)^2 N^2 \quad (1.364)$$

Se observă că atunci când avem de-a face cu lumina difractată prin N fante, intensitatea luminoasă crește nu de N ori ci de N^2 ori.

Maximele care apar în acest caz poartă numele de maxime principale și sunt date de condiția 1.363. Ele apar atunci când avem simultan

Figura 1.49: Reprezentarea curbelor $\left(\frac{\sin N\delta}{\sin \delta}\right)^2$ în funcție de δ pentru $N = 2$ și $N = 4$

$N\delta = 0$ și $m\delta = 0$. Între două maxime principale apar $N - 1$ minime nule corespunzătoare valorilor $\sin N\delta = 0$ și $\sin \delta \neq 0$. Între aceste minime trebuie să existe $N - 2$ maxime secundare a căror intensitate luminoasă este neglijabilă în raport cu cea a maximelor principale. Pentru a pune în evidență mai ușor condițiile de formare a acestora vom scrie în ordine crescătoare valorile $N\delta$.

$$\delta N : 0, \pi, 2\pi, \dots, (N - 1)\pi, \underline{N\pi}, (N + 1)\pi, \dots, (2N - 1)\pi, \underline{2N\pi}, \dots$$

Valorile subliniate sunt cele pentru care $\sin \delta N = 0$ și $\sin \delta = 0$. Pentru celelalte valori $\sin \delta \neq 0$.

În Fig. 1.49 sunt reprezentate curbele $\left(\frac{\sin N\delta}{\sin \delta}\right)^2$ pentru $N = 2$ și pentru $N = 4$.

Cu cât N crește mai mult cu atât maximele principale devin mai punctuale și sunt separate unul de altul de distanțe mai mari.

Să calculăm în continuare contribuția fiecărei fante la repartiția intensității; pentru aceasta trebuie să studiem variația funcției $\left(\frac{\sin u}{u}\right)^2$ ținând cont de condiția:

$$d \sin \varphi = m\lambda \quad (1.365)$$

Atunci din (1.361) rezultă:

$$u = \frac{\pi b m \lambda}{\lambda d} = \pi m \frac{b}{d} \quad (1.366)$$

și

$$\left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 = d^2 \frac{\sin^2(\pi m b/d)}{\pi^2 b^2 m^2} \quad (1.367)$$

Remarcând că pentru maximele principale:

$$\left| \lim_{\delta \rightarrow m\pi} \frac{\sin N\delta}{\sin \delta} \right| = N$$

intensitatea maximului principal de ordin m este:

$$I_m = I_0 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 \frac{\sin^2 N\delta}{\sin^2 \delta} = I_0 N^2 d^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{\pi m b}{d} \right)}{b^2 \pi^2 m^2} \quad (1.368)$$

Considerând această formulă putem să tragem următoarele concluzii:

1. $I_m \sim 1/m^2$. Aceasta semnifică că pe măsură ce crește ordinul de difracție, intensitatea maximelor principale descrește rapid.

2. Intensitatea luminoasă a maximului de ordin m depinde de raportul $\frac{b}{d}$. Dacă $\left(\frac{b}{d} \right) m = m'$, unde m' este un număr întreg, $I_m = 0$ deoarece $\sin \pi m' = 0$. Rezultă că intensitatea luminoasă este nulă.

Condiția de a se obține un minim de difracție pentru o singură fantă se exprimă prin $b \sin \varphi = m\lambda$. Se observă că acest caz corespunde unei coincidențe pentru apariția unui maxim principal pentru difracția pe N fante și condiția de minim pentru fiecare fantă. Aceasta face ca maximul principal să dispară. De exemplu, dacă $b/d = 1/4$, atunci maximele de ordin 4, 8, 12, 16, ..dispar.

Rezultă deci că în cazul difracției unei unde plane pe o rețea regulată de N fante, intensitatea relativă a maximelor principale este determinată atât de raportul $1/m^2$, cât și de raportul b/d .

În Fig. 1.50 este reprezentat modul în care se obține repartiția intensității I ce rezultă din difracția pe o structură regulată de $N = 4$ fante.

Una din cele mai importante proprietăți a unei rețele de difracție este dispersia unghiulară.

Figura 1.50: Repartiția intensității pentru o rețea de 4 fante în funcție de δ .

Să considerăm două unde plane cu lungimile de undă apropiate λ și $\lambda + d\lambda$ care cad pe o rețea sub incidență normală. Diferența $d\varphi$ dintre unghiurile sub care undele sunt difractate se obține pornind de la relația:

$$d \sin \varphi = m\lambda \quad (1.369)$$

Diferențiind găsim:

$$d \cos \varphi d\varphi = md\lambda \quad (1.370)$$

Definim dispersia unghiulară D_α a rețelei în vecinătatea maximului de ordin m ca fiind cantitatea:

$$D_\alpha = \frac{d\varphi}{d\lambda} = \frac{m}{d \cos \varphi_m} \quad (1.371)$$

Constatăm că dispersia este cu atât mai mare cu cât ordinul de difracție este mai mare (m -mai mare) și rețeaua este mai fină (d este mai mic). În relația 1.371 $d\varphi$ reprezintă variația unghiului φ pentru care se obține din nou un maxim de difracție de ordin m atunci când lungimea de undă variază cu $d\lambda$.

Figura 1.51: Descompunerea luminii albe în radițiile componente cu ajutorul prisme

1.5 Dispersia luminii

Fenomenul de dispersie constă în variația indicelui de refracție cu lungimea de undă. Lumina albă poate fi descompusă în radițiile componente. Fenomenul de dispersie cel mai cunoscut și ușor de urmărit este curcubeul. Acesta constă în descompunerea luminii albe de către minusculele picături de apă rămase în atmosferă după ploaie, în cele șapte culori ale spectrului vizibil. Primul studiu al dispersiei a fost efectuat de de Isaac Newton.

Astfel, dacă un fascicol ce provine de la un corp incandescent cade pe suprafața unei prisme acesta se descompune într-o succesiune continuă sau discretă de culori (Fig. 1.51). Lumina albă se descompune într-o succesiune continuă de culori care formează spectrul continuu din vizibil.

Au fost făcute numeroase tentative de a se obține dependența $n(\lambda)$. Una din aceste formule este aceea obținută de Cauchy:

$$n = a + \frac{b}{\lambda_0^2} + \frac{c}{\lambda_0^4} + \dots \quad (1.372)$$

unde λ_0 este lungimea de undă în vid, iar a, b, c, \dots , sunt constante. Se observă că $\frac{dn}{d\lambda} < 0$. În acest caz spunem că avem de-a face cu dispersie normală.

Le Roux a descoperit în 1862 că în cazul unei prisme umplute cu vapori de iod apar porțiuni unde avem de-a face cu o creștere a indicelui de refracție cu lungimea de undă, adică $\frac{dn}{d\lambda} > 0$. Spunem în acest caz, că substanța prezintă o dispersie anomală. Mai trebuie menționat că în

regiunea din spectru în care există dispersie anomală există o absorbție puternică.

1.5.1 Ecuația de dispersie

Problema complexă a interacției unui câmp electromagnetic cu substanța se poate rezolva prin metode clasice sau cuantice.

Metoda clasică este simplă: pentru a stabili dependența indicelui de refracție a unei substanțe în funcție de frecvența luminii incidente este suficient să calculăm vectorul densitate de polarizare \vec{P} creat în substanță de câmpul electric \vec{E} al undei. Calculăm apoi vectorul inducție câmp electric $\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$ și apoi $\varepsilon = \frac{D}{\varepsilon_0 E}$. În sfârșit, ținând cont că $n = \sqrt{\varepsilon}$ găsim relația $n = n(\omega) = n(\lambda)$.

Fie N numărul de atomi egal repartizați în unitatea de volum a substanței considerate. Admitem că fiecare atom conține un electron optic (a cărui deplasare determină polarizarea atomului) cu sarcina e . Câmpul electric exercită asupra electronului o forță $\vec{F} = e\vec{E}$. Neglijăm influența asupra electronului a câmpului electric creat de ceilalți electroni ai sistemului. Această aproximație este valabilă în cazul în care densitatea substanței este mică. Presupunem în continuare că electronul este menținut în atom de o forță elastică $-k\vec{r}$ care este proporțională cu deplasarea electronului față de poziția de echilibru \vec{r} datorată undei incidente. Masa electronului și constanta elastică determină pulsația ω_0 a oscilațiilor proprii $\omega_0^2 = \frac{k}{m_e}$. Faptul că electronul pierde energie datorită radiației emise, a ciocnirilor și agitației termice, necesită introducerea unei forțe de amortizare de forma $-\alpha \frac{d\vec{r}}{dt}$ unde $\alpha = 2m\gamma$, iar γ este numit coeficient de amortizare. Atunci ecuația de mișcare a electronului are forma:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -k\vec{r} - \alpha \frac{d\vec{r}}{dt} + e\vec{E} \quad (1.373)$$

Presupunând un câmp sinusoidal ecuația (1.373) devine:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp(i\omega t) \quad (1.374)$$

$$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + \frac{k}{m_e} \vec{r} + 2\gamma \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{e\vec{E}_0}{m_e} \exp(i\omega t) \quad (1.375)$$

Pentru ecuația 1.375, diferențială de ordinul I și neomogenă se poate alege o soluție particulară de forma membrului drept.

$$\vec{r} = \vec{r}_0 \exp(i\omega t) \quad (1.376)$$

Introducând (1.374) și (1.376) în (1.375) se obține:

$$\vec{r}(\omega_0^2 - \omega^2 + i2\gamma) = \frac{e\vec{E}_0}{m_e} \quad (1.377)$$

de unde:

$$\vec{r} = \frac{e/m_e}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i2\gamma} \vec{E} \quad (1.378)$$

Deoarece densitatea de polarizare este:

$$\vec{P} = Ne\vec{r} \quad (1.379)$$

atunci:

$$\varepsilon - 1 = n^2 - 1 = \frac{P}{\varepsilon_0 E} = \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m_e} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i2\gamma} \quad (1.380)$$

Rezultă din ecuația de mai sus că permitivitatea este o mărime complexă. Trecerea de la permitivitatea complexă la permitivitatea reală este echivalentă cu a neglija absorbția undelor electromagnetice, adică $\gamma = 0$. Se obține:

$$n^2 - 1 = \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (1.381)$$

În Fig. 1.52 este reprezentată variația cantității $n^2 - 1$ în funcție de pulsația radiației.

Cu excepția punctului $\omega = \omega_0$ unde funcția prezintă o discontinuitate, indicele de refracție crește cu frecvența (scade cu lungimea de undă), adică avem o dispersie normală.

Vom defini condițiile fizice în care $\gamma = 0$. Trebuie remarcat faptul că în vizibil corpurile transparente incolore nu au nici o bandă de absorbție însă ele absorb puternic undele electromagnetice în ultraviolet. În regiunea vizibilă a spectrului se verifică inegalitatea $\omega < \omega_0$ (acolo unde

Figura 1.52: Variația lui $n^2 - 1$ în funcție de ω

nu avem absorbție). Este suficient să considerăm ramura din stânga a curbei anterioare. Aceasta înseamnă că frecvența proprie de oscilație a electronilor se află în regiunea ultravioletă a spectrului. În consecință corpurile transparente prezintă o dispersie normală. Presupunând că $\omega \ll \omega_0$ relația (1.381) se mai scrie:

$$n^2 = 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m \omega_0^2} \frac{1}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2} \simeq 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m \omega_0^2} \left[1 + \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2\right] \quad (1.382)$$

Cum $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ se obține o formulă simplă cu care pot fi verificate rezultatele experimentale:

$$n^2 = 1 + \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m \omega_0^2} + \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m \omega_0^4} \frac{4\pi^2 c^2}{\lambda^2} \quad (1.383)$$

$$n^2 = 1 + A \left(1 + \frac{B}{\lambda^2}\right) \quad (1.384)$$

unde

$$A = \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m \omega_0^2} \quad (1.385)$$

$$B = \frac{4\pi^2 c^2}{\omega_0^2} \quad (1.386)$$

Calculând raportul acestor două constante se obține:

$$\frac{B}{A} = \frac{4\pi^2 c^2 \varepsilon_0 m}{Ne^2} \quad (1.387)$$

Acest raport nu depinde de ω_0 pulsația proprie a electronilor. Se observă că formula (1.372) coincide cu (1.384) iar constantele A și B pot fi determinate experimental din curba $n(\lambda)$ sau teoretic din formulele (1.385) și (1.386). Dacă se realizează estimările respective se constată o concordanță a valorilor parametrilor A și B obținuți teoretic și experimental de aproximativ 20%.

Se constată că relația este valabilă pentru gaze la presiuni mici și pentru substanțe a căror centri emisivi sunt rari. Acest caz corespunde absenței interacției între electronii oscilanți.

Dacă densitatea substanței este mare, asupra unui electron oscilant acționează în locul câmpului extern un câmp electric local care ia în considerație și acțiunea celorlalți electroni:

$$E_{loc} = E + \frac{P}{3\varepsilon_0} \quad (1.388)$$

Calculule se pot reface ca în cazul precedent și se obține:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{Ne^2}{3m_e \varepsilon_0} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + 2i\gamma\omega} \quad (1.389)$$

În cazul când absorția este neglijabilă:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{Ne^2}{3m_e \varepsilon_0} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (1.390)$$

Dacă spectrul studiat conține mai multe benzi de absorție este necesar ca membrul drept al formulei (1.384) să fie înlocuit cu o sumă, adică:

$$n^2 = 1 + \frac{e^2}{m_e \varepsilon_0} \sum_j \frac{N_j}{\omega_{0j}^2 - \omega^2} \quad (1.391)$$

unde N_j reprezintă numărul de atomi din unitatea de volum ai căror electroni au pulsațiile proprii de oscilați ω_{0j} .

1.5.2 Dispersia anomală

Admitem că frecvența ω a oscilațiilor forțate este puțin diferită de frecvența proprie a electronilor optici ω_0 . Aceasta înseamnă că ipotezele făcute anterior nu mai sunt valabile. Remarcăm că în acest caz permitivitatea va fi o cantitate complexă. Indicele de refracție va putea fi pus sub forma unei cantități complexe:

$$n' = n - in\chi = n(1 - i\chi) \quad (1.392)$$

Atunci permitivitatea complexă este:

$$\varepsilon'^2 = n^2 (1 - 2i\chi - \chi^2) \quad (1.393)$$

Putem separa partea reală de partea imaginară al lui n'^2 și vom obține o ecuație ce leagă indicele de refracție real de factorul de absorbție.

Atunci relația (1.380) se poate rescrie ca:

$$n^2 (1 - 2i\chi - \chi^2) = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2) - 2i\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \quad (1.394)$$

De aici obținem prin separarea părții reale și imaginare:

$$n^2 (1 - \chi^2) = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \quad (1.395)$$

$$2n^2\chi = \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} \quad (1.396)$$

Remarcăm că variația funcției $2n^2\chi$ cu pulsația este asemănătoare factorului de absorbție $n\chi$. Când $\omega \rightarrow \infty$ atunci $2n^2\chi \rightarrow 0$ în timp ce pentru $\omega = \omega_0$ această funcție prezintă un maxim, care se estompează pe măsură ce $\omega_0^2 - \omega^2$ scade. Valoarea maximului:

Figura 1.53: Forma funcțiilor $2n^2\chi$ și $n^2(1 - \chi^2)$ în funcție de ω^2

$$n^2\chi = \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{2\gamma\omega} \quad (1.397)$$

este cu atât mai mare cu cât constanta de amortizare este mai mică.

Forma lui $n^2(1 - \chi^2)$ reproduce în mare dependența lui $n(\lambda)$. Când $\omega \rightarrow \infty$ funcția tinde la unitate. Funcția $y = n^2(1 - \chi^2)$ prezintă valori maxime și minime în apropierea frecvenței la care absorbția este maximă. Valorile extreme ω_1 și ω_2 pot fi calculate egalând cu zero prima derivată $\frac{dy}{d\omega}$. Calculul arată că distanța ce separă extremele funcției $y(\omega)$ este egală cu lărgimea la jumătate a maximumului lui $2n^2\chi$. Figurile celor două funcții $2n^2\chi$ și $n^2(1 - \chi^2)$ care reflectă în mod esențial alura factorului de absorbție și indicele de refracție în vecinătatea absorbției sunt reprezentate în Fig. 1.53.

Se observă că în regiunea de absorție unde $2n^2\chi$ are un maxim, indicele de refracție scade cu creșterea frecvenței, deci regiunea de absorție este una de dispersie anomală.

Figura 1.54: Efectul de birefrință în cristalul de spat de Islanda: 1. raza ordinară; 2. raza extraordinară

1.6 Optica mediilor anizotrope

1.6.1 Introducere

Dacă un cristal de spat de Islanda este traversat de o rază de lumină nepolarizată, la ieșirea din acesta se observă două raze pe care Huygens le-a numit: raza ordinară și raza extraordinară. Se constată că indicele de refracție n_e al razei extraordinare depinde de direcția razei în cristal în timp ce indicele de refracție al razei ordinare n_o nu depinde de unghiul de incidență (Fig. 1.54)

Pentru cristalul de spat de Islanda $n_o = 1,658$ și $n_e \in (1,486; 1,658)$ în cazul luminii cu lungimea de undă $\lambda = 589,3$ nm. Dacă $n_e < n_o$ cristalul face parte din clasa cristalelor optice negative iar dacă $n_e > n_o$ cristalul face parte din clasa cristalelor optice pozitive. În toate cristalele există o direcție în lungul căreia nu există birefrință ($n_e = n_o$). Această direcție poartă numele de axă optică a cristalului. Planele ce conțin axa optică poartă numele de plane principale. Dacă planul principal este perpendicular pe o pereche de suprafețe opuse poartă numele de secțiune principală. Există cristale care au o singură axă principală (spatul de Islanda, cuarțul). Ele poartă denumirea de cristale uniaxe. Există și cristale care au două axe optice și care poartă numele de cristale biaxe.

În cazul spatului de Islanda axa optică principală unește două unghiuri obtuze ale cristalului. Razele care apar prin fenomenul de birefrință sunt total polarizate pe direcții perpendiculare. Astfel vectorul electric \vec{E} al razei ordinare vibrează perpendicular pe secțiunea principală iar vectorul \vec{E} al razei extraordinare vibrează în planul secțiunii principale.

Un caz extrem de interesant este acela în care propagarea luminii are

loc de-a lungul unei direcții perpendiculare pe axa optică. Deși cele două raze nu se observă separat ele există, iar diferența indicilor de refracție $|n_e - n_o|$ este maximă. Dacă se trimite pe o astfel de direcție o rază de lumină liniar polarizată al cărei vector \vec{E} să nu vibreze în planul principal și nici într-un plan perpendicular pe acesta se obțin două unde care se propagă de-a lungul acestei direcții cu viteze diferite: $v_1 = c/n_o$ și $v_2 = c/n_e$. Undele sunt polarizate pe direcții perpendiculare. În funcție de grosimea lamei, la ieșirea din aceasta între cele două raze există o diferență de fază $\Delta\varphi$. Dacă $\Delta\varphi = m\pi$, unde m este un număr întreg unda rezultată prin compunerea celor două unde polarizate pe direcții perpendiculare este liniar polarizată. Dacă $\Delta\varphi \neq m\pi$ unda care rezultă este eliptic polarizată. Pe acest principiu funcționează lama sfert de undă care este utilizată pentru a transforma lumina liniar polarizată în lumină circular polarizată. Grosimea unei astfel de lame se calculează ținând cont că defazajul este legat de diferența de drum a celor două raze prin relația:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi\delta}{\lambda} \quad (1.398)$$

unde $\delta = (\Delta n)d$. Dacă se pune condiția ca diferența de fază să fie $\Delta\varphi = (2m + 1)\pi/2$ cu m întreg rezultă:

$$d(n_o - n_e) = (2m + 1)\frac{\lambda}{4} \quad (1.399)$$

de unde și numele de lamă sfert de undă.

1.6.2 Teoria electromagnetică a mediilor anizotrope

Punctul de plecare în cazul acestei teorii sunt cele patru ecuații ale lui Maxwell scrise în medii fără sarcini libere ($\rho = 0$), fără curenți ($\vec{j} = 0$) și nemagnetice ($\vec{B} = \mu_0\vec{H}$):

$$\nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (1.400)$$

$$\nabla \vec{H} = 0 \quad (1.401)$$

$$\nabla \vec{D} = 0 \quad (1.402)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.403)$$

În cazul mediilor anizotrope și liniare legătura dintre vectorii \vec{E} și \vec{D} este dată de relația:

$$\vec{D} = \bar{\bar{\epsilon}} \vec{E} \quad (1.404)$$

unde $\bar{\bar{\epsilon}}$ este tensorul permitivitate electrică reprezentat de o matrice pătrată de ordin trei. Relația (1.404) se scrie desfășurat astfel:

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (1.405)$$

Se demonstrează că matricea care exprimă tensorul permitivităților este simetrică $\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx}$, $\epsilon_{xz} = \epsilon_{zx}$, $\epsilon_{yz} = \epsilon_{zy}$. Atunci există un sistem de coordonate în care matricea tensorului permitivitate este diagonală.

$$\bar{\bar{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_3 \end{pmatrix} \quad (1.406)$$

Aceste axe particulare poartă numele de axe principale sau axe de simetrie ale mediului iar ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 reprezintă constantele dielectrice principale. Vom considera ca soluție a ecuațiilor Maxwell o undă plană. Vectorii caracteristici ai acestei unde sunt de forma:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k} \vec{r} \right) \right] \quad (1.407)$$

$$\vec{H} = \vec{H}_0 \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k} \vec{r} \right) \right] \quad (1.408)$$

$$\vec{D} = \vec{D}_0 \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k} \vec{r} \right) \right] \quad (1.409)$$

Introduși pe rând în relațiile (1.400), (1.401), (1.402) și (1.403) rezultă:

$$\vec{k} \times \vec{E} = \mu_0 \omega \vec{H} \quad (1.410)$$

$$\vec{k} \vec{H} = 0 \quad (1.411)$$

$$\vec{k} \vec{D} = 0 \quad (1.412)$$

$$\vec{k} \times \vec{H} = -\omega \vec{D} \quad (1.413)$$

Figura 1.55: Structura unei plane într-un mediu anizotrop. Vectorii \vec{k} , \vec{D} , \vec{E} și \vec{S} sunt coplanari.

Din relațiile (1.411) și (1.412) rezultă că $\vec{H} \perp \vec{k}$, $\vec{D} \perp \vec{k}$ iar din (1.413) că \vec{D} este perpendicular pe planul format de vectorii \vec{k} și \vec{H} . Rezultă că vectorii \vec{k} , \vec{D} și \vec{H} formează un triedru drept.

Deoarece \vec{H} este perpendicular pe planul format de vectorii \vec{k} și \vec{D} rezultă că vectorii \vec{k} , \vec{D} și \vec{E} sunt coplanari. Planul format de vectorii \vec{D} și \vec{k} poartă numele de plan de polarizare, iar planul definit de vectorii \vec{D} și \vec{H} și care este perpendicular pe \vec{k} poartă numele de planul unde. Mediul fiind liniar direcția de propagare a energiei este dată de direcția vectorului Poynting $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$. Deoarece $\vec{S} \perp \vec{E}$ și $\vec{S} \perp \vec{H}$, vectorul \vec{S} se află în planul determinat de vectorii \vec{k} și \vec{D} . Astfel vectorii \vec{k} , \vec{D} , \vec{E} și \vec{S} sunt coplanari. Structura unei care se propagă în mediul anizotrop este arătată în Fig. 1.55.

Astfel, unda plană se propagă în mediul anizotrop de-a lungul direcției vectorului \vec{k} cu viteza $v = \omega/c$. Această direcție poartă numele de direcția unde. Direcția de propagare a energiei este dată de direcția vectorului \vec{S} și poartă numele de direcția razei. Se observă că vectorul \vec{E} este perpendicular pe \vec{H} dar nu mai este perpendicular pe \vec{k} , adică pe direcția de propagare a unde. Din acest punct de vedere unda nu mai este riguros transversală deoarece există o componentă nenulă a lui \vec{E} pe direcția lui \vec{k} .

1.6.3 Suprafața vectorului de undă și ecuațiile lui Fresnel

Se numește suprafață a vectorilor de undă suprafața descrisă de extremitățile vectorilor $\overrightarrow{OK} = \vec{k}$ unde O este o origine arbitrară. Înmulțim vectorial ecuația (1.410) cu \vec{k} și se ține cont de (1.413):

$$\begin{aligned}\vec{k} \times (\vec{k} \times \vec{E}) &= \mu_0 \omega (\vec{k} \times \vec{H}) \\ \vec{k} (\vec{k} \vec{E}) - k^2 \vec{E} &= -\mu_0 \omega^2 \vec{D} = -\mu_0 \omega^2 \vec{\epsilon} \vec{E}\end{aligned}\quad (1.414)$$

Vom considera această ecuație în sistemul axelor principale și o vom scrie pe componente:

$$\begin{aligned}k_x (\vec{k} \vec{E}) - k^2 E_x &= -\mu_0 \omega^2 \epsilon_1 E_x \\ k_y (\vec{k} \vec{E}) - k^2 E_y &= -\mu_0 \omega^2 \epsilon_2 E_y \\ k_{zz} (\vec{k} \vec{E}) - k^2 E_z &= -\mu_0 \omega^2 \epsilon_3 E_z\end{aligned}$$

sau

$$\begin{aligned}E_x (k^2 - \mu_0 \omega^2 \epsilon_1) &= k_x (\vec{k} \vec{E}) \\ E_y (k^2 - \mu_0 \omega^2 \epsilon_2) &= k_y (\vec{k} \vec{E}) \\ E_z (k^2 - \mu_0 \omega^2 \epsilon_3) &= k_z (\vec{k} \vec{E})\end{aligned}\quad (1.415)$$

Se ține cont că $E_x = D_x/\epsilon_1$, $E_y = D_y/\epsilon_2$, $E_z = D_z/\epsilon_3$ și se notează cu $k_1^2 = \mu_0 \omega^2 \epsilon_1$, $k_2^2 = \mu_0 \omega^2 \epsilon_2$, $k_3^2 = \mu_0 \omega^2 \epsilon_3$. Atunci se obține:

$$D_x = \frac{\epsilon_1 k_x (\vec{k} \vec{E})}{k^2 - k_1^2}\quad (1.416)$$

$$D_y = \frac{\epsilon_2 k_y (\vec{k} \vec{E})}{k^2 - k_2^2}\quad (1.417)$$

$$D_z = \frac{\epsilon_3 k_z (\vec{k} \vec{E})}{k^2 - k_3^2}\quad (1.418)$$

Deoarece $\vec{k}\vec{D} = 0$ atunci:

$$k_x D_x + k_y D_y + k_z D_z = 0 \quad (1.419)$$

Înlocuim în (1.419) relațiile (1.416), (1.417) și (1.418) și se obține:

$$\varepsilon_1 \frac{k_x^2}{k^2 - k_1^2} + \varepsilon_2 \frac{k_y^2}{k^2 - k_2^2} + \varepsilon_3 \frac{k_z^2}{k^2 - k_3^2} = 0 \quad (1.420)$$

Aceasta este ecuația vectorilor de undă.

Definim viteza de propagare a unei de-a lungul direcției dată de vectorul \vec{k} , $v = \omega/k$, precum și vitezele de propagare a unei $v_1^2 = 1/\mu_0\varepsilon_1 = \omega^2/k_1^2$, $v_2^2 = 1/\mu_0\varepsilon_2 = \omega^2/k_2^2$, $v_3^2 = 1/\mu_0\varepsilon_3 = \omega^2/k_3^2$ de-a lungul celor trei axe principale. Definim cosinuși directori ai direcției de propagare $\alpha = k_x/k$, $\beta = k_y/k$, $\gamma = k_z/k$. Nu trebuie confundate mărimile k_x , k_y , k_z care sunt componentele vectorului de undă cu mărimile k_1 , k_2 , k_3 care sunt vectorii de undă în cazul undelor ce se propagă de-a lungul axelor principale. Prelucrăm primul termen din (1.420):

$$\varepsilon_1 \frac{k_x^2}{k^2 - k_1^2} = \varepsilon_1 \frac{k_x^2/k^2}{1 - k_1^2/k^2} = \varepsilon_1 \frac{\alpha^2}{1 - v^2/v_1^2} = -\mu_0^{-1} \frac{\alpha^2}{v^2 - v_1^2} \quad (1.421)$$

În mod analog se pot exprima și ceilalți doi termeni. Ecuația (1.420) se transformă în:

$$\frac{\alpha^2}{v^2 - v_1^2} + \frac{\beta^2}{v^2 - v_2^2} + \frac{\gamma^2}{v^2 - v_3^2} = 0 \quad (1.422)$$

Această ecuație poartă numele de ecuația lui Fresnel și permite calcularea vitezei de fază în funcție de direcția lui \vec{k} determinată de cei trei cosinuși directori α , β , γ și de vitezele principale v_1 , v_2 , v_3 care sunt mărimi caracteristice ale mediului. Trebuie remarcat că $v^2 \neq v_1^2 + v_2^2 + v_3^2$.

Ecuația (1.422) este o ecuație de gradul doi în v^2 . Astfel, pentru fiecare direcție de propagare \vec{k} există două viteze distincte v' și v'' . Dacă direcția lui \vec{k} coincide cu una din axele principale, doi dintre cosinușii directori sunt nuli. Atunci viteza de fază va coincide cu viteza principală corespunzătoare.

Ecuația (1.422) poate fi scrisă în funcție de indicele de refracție $n = c/v$ și indicii de refracție principali $n_1 = c/v_1$, $n_2 = c/v_2$, $n_3 = c/v_3$. Rezultă ecuația:

$$\frac{n_1^2 \alpha^2}{n^2 - n_1^2} + \frac{n_2^2 \beta^2}{n^2 - n_2^2} + \frac{n_3^2 \gamma^2}{n^2 - n_3^2} = 0 \quad (1.423)$$

Ecuția permite calculul indicelui de refracție în funcție de direcția de propagare și mărimile caracteristice ale mediului care sunt indicii de refracție principali. Putem defini un vector \vec{n} cu componentele $n_x^2 = k_x^2/k^2 = \alpha^2$, $n_y^2 = k_y^2/k^2 = \beta^2$, $n_z^2 = k_z^2/k^2 = \gamma^2$. Rezultă ecuația:

$$n_1^2 \frac{n_x^2}{n^2 - n_1^2} + n_2^2 \frac{n_y^2}{n^2 - n_2^2} + n_3^2 \frac{n_z^2}{n^2 - n_3^2} = 0 \quad (1.424)$$

Ecuția (1.420) are două soluții. Există două direcții de propagare a undei astfel că există două orientări pentru vectorul inducție câmp electric \vec{D}' și \vec{D}'' . Se demonstrează că cei doi vectori sunt perpendiculari. Pentru a demonstra acest lucru se efectuează produsul scalar $\vec{D}' \cdot \vec{D}''$. Pentru aceasta se ține cont de relațiile (1.416), (1.417) și (1.418):

$$D'_x D''_x = \frac{\varepsilon_1^2 k'_x k''_x (\vec{k}' \cdot \vec{E}) (\vec{k}'' \cdot \vec{E})}{(k'^2 - k_1^2)(k''^2 - k_1^2)}$$

$$D'_x D''_x = \varepsilon_1^2 (\vec{k}' \cdot \vec{E}) (\vec{k}'' \cdot \vec{E}) \frac{k'_x k''_x}{k_1^2} \frac{k_1^2}{(k'^2 - k_1^2)(k''^2 - k_1^2)} \quad (1.425)$$

dar

$$\frac{k_1^2}{(k'^2 - k_1^2)(k''^2 - k_1^2)} = \frac{1}{(k''^2 - k'^2)} \left(\frac{k'^2}{k'^2 - k_1^2} - \frac{k''^2}{k''^2 - k_1^2} \right)$$

și

$$k_1^2 = k_0^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0}$$

Atunci dacă notăm cu:

$$A = (\vec{k}' \cdot \vec{E}) (\vec{k}'' \cdot \vec{E}) \frac{\varepsilon_0}{k_0^2} \frac{1}{(k''^2 - k'^2)}$$

$$D'_x D''_x = A \left[k'^2 \frac{k''_x}{k'_x} \left(\varepsilon_1 \frac{k_x'^2}{k'^2 - k_1^2} \right) - k''^2 \frac{k'_x}{k''_x} \left(\varepsilon_1 \frac{k_x''^2}{k''^2 - k_1^2} \right) \right] \quad (1.426)$$

Deoarece:

$$\frac{k''_x}{k'_x} = \frac{k''_y}{k'_y} = \frac{k''_z}{k'_z} = a$$

$$\left(\frac{k''}{k'} \right)^2 = \frac{k_x''^2 + k_y''^2 + k_z''^2}{k_x'^2 + k_y'^2 + k_z'^2} = a^2$$

Figura 1.56: Propagarea unei unde plane într-un mediu anizotrop

$$k'^2 \frac{k''_2}{k'_x} = k''^2 \frac{k'_2}{k''_x} = ak'^2$$

relația (1.426) devine:

$$D'_x D''_x = Aak'^2 \left[\varepsilon_1 \frac{k_x'^2}{k'^2 - k_1^2} - \varepsilon_1 \frac{k_x''^2}{k''^2 - k_1^2} \right] \quad (1.427)$$

Produsele $D'_y D''_y$ și $D'_z D''_z$ au expresii analoage. Atunci:

$$\begin{aligned} \vec{D}' \vec{D}'' &= Aak'^2 \left[\varepsilon_1 \frac{k_x'^2}{k'^2 - k_1^2} + \varepsilon_2 \frac{k_y'^2}{k'^2 - k_1^2} + \varepsilon_3 \frac{k_z'^2}{k'^2 - k_3^2} \right] - \\ &Aak'^2 \left[\varepsilon_1 \frac{k_x''^2}{k''^2 - k_1^2} + \varepsilon_2 \frac{k_y''^2}{k''^2 - k_1^2} + \varepsilon_3 \frac{k_z''^2}{k''^2 - k_3^2} \right] \end{aligned}$$

Se ține cont de ecuația vectorilor de unda. Rezultă că cele două paranteze sunt nule. Astfel $\vec{D}' \vec{D}'' = 0$

1.6.4 Suprafața de undă

Fie o undă care se propagă într-un mediu anizotrop. Fie planul de fază constantă la momentele t_1 și t_2 .

De-a lungul direcției lui \vec{k} se definește viteza de fază v , iar după direcția lui \vec{S} se definește viteza v_r , viteza radială de propagare a energiei. Atunci:

$$\begin{aligned} ON &= v\Delta t \\ OR &= v_r\Delta t \end{aligned}$$

Rezultă:

$$\frac{ON}{OR} = \frac{v}{v_r} = \cos \psi \quad (1.428)$$

Definim în continuare vectorul unitate al direcției lui \vec{k} , $\vec{u} = \vec{k}/k$ și vectorul unitate al direcției de propagare a energiei $\vec{s} = \vec{S}/S$. Definim suprafața de undă ca fiind locul geometric al vârfului vectorului \vec{S} considerat cu originea într-un punct arbitrar. Pentru determinarea ecuației acestuia vom porni de la relația (1.414) scrisă astfel:

$$\vec{k} \left(\vec{k} \vec{E} \right) - k^2 \vec{E} = -\mu_0 \omega^2 \vec{D} \quad (1.429)$$

Punând $\vec{k} = k\vec{u}$ și $\omega = kv$ din relația (1.429) se obține:

$$\mu_0 \vec{D} = \frac{1}{v^2} \left[\vec{E} - \vec{u} \left(\vec{u} \vec{E} \right) \right] \quad (1.430)$$

Se înmulțește (1.430) cu vectorul \vec{s} și se obține:

$$\mu_0 \vec{D} \vec{s} = \frac{1}{v^2} \left[\vec{E} \vec{s} - \vec{u} \vec{s} \left(\vec{u} \vec{E} \right) \right]$$

Deoarece $\vec{E} \perp \vec{s}$ rezultă:

$$\mu_0 \vec{D} \vec{s} = -\frac{1}{v^2} \vec{u} \vec{s} \left(\vec{u} \vec{E} \right) = -\frac{1}{v^2} \left(\vec{u} \vec{E} \right) \cos \psi \quad (1.431)$$

Vectorii \vec{E} , \vec{D} și \vec{s} sunt coplanari. Atunci vectorul \vec{s} se poate exprima în funcție de vectorii \vec{E} și \vec{D} :

$$\vec{s} = a\vec{D} + b\vec{E} \quad (1.432)$$

în care a și b sunt constante. Pentru determinarea lor, relația (1.432) se înmulțește cu \vec{s} și se obține:

$$\vec{s}^2 = a\vec{D}\vec{s} + b\vec{E}\vec{s} \quad (1.433)$$

Deoarece $\vec{s}^2 = 1$, și $\vec{E}\vec{s} = 0$ atunci:

$$a = \frac{1}{\vec{D}\vec{s}} \quad (1.434)$$

Înmulțim (1.432) cu vectorul \vec{u} :

$$\vec{s}\vec{u} = a\vec{D}\vec{u} + b\vec{E}\vec{u} \quad (1.435)$$

Deoarece $\vec{D}\vec{u} = 0$, vectorul \vec{D} fiind normal pe direcția de propagare, rezultă:

$$b = \frac{\cos \psi}{\vec{E}\vec{u}} \quad (1.436)$$

Din (1.432):

$$\vec{E} = \frac{\vec{s}}{b} - \frac{a}{b}\vec{D}$$

și ținând cont de expresia constantelor a și b rezultă:

$$\vec{E} = \frac{\vec{E}\vec{u}}{\cos \psi} \left(\vec{s} - \frac{\vec{D}}{\vec{s}\vec{D}} \right) \quad (1.437)$$

Dar din (1.431) se obține:

$$\vec{E}\vec{u} = -\frac{\mu_0 \vec{D}\vec{s}v^2}{\cos \psi}$$

Atunci relația (1.437) devine:

$$\vec{E} = -\mu_0 \vec{D}\vec{s} \frac{v^2}{\cos^2 \psi} \left(\vec{s} - \frac{\vec{D}}{\vec{s}\vec{D}} \right) \quad (1.438)$$

Dar cum $v_r^2 = v^2 / \cos^2 \psi$ rezultă:

$$\vec{E} = \mu_0 v_r^2 \left[\vec{E} - \vec{s} \left(\vec{s}\vec{D} \right) \right] \quad (1.439)$$

Se compară această relație cu relația (1.430). Cele două relații sunt echivalente dacă se fac corespondențele $\mu_0 \vec{D} \rightarrow \vec{E}$, $\vec{u} \rightarrow \vec{s}$, $v \rightarrow 1/v_r$. Atunci putem scrie direct relația lui Fresnel pentru viteza radială:

$$\frac{\alpha_r^2}{\frac{1}{v_r^2} - \frac{1}{v_1^2}} + \frac{\beta_r^2}{\frac{1}{v_r^2} - \frac{1}{v_2^2}} + \frac{\gamma_r^2}{\frac{1}{v_r^2} - \frac{1}{v_3^2}} = 0 \quad (1.440)$$

unde $\alpha_r, \beta_r, \gamma_r$ sunt cosinuşii directori ai vectorului \vec{S} . Dacă se ține cont că $v_{rx} = v_r \alpha_r, v_{ry} = v_r \beta_r, v_{rz} = v_r \gamma_r$ relația (1.440) devine:

$$\frac{v_1^2 v_{rx}^2}{v_r^2 - v_1^2} + \frac{v_2^2 v_{ry}^2}{v_r^2 - v_2^2} + \frac{v_3^2 v_{rz}^2}{v_r^2 - v_3^2} = 0 \quad (1.441)$$

Se înmulțește relația (1.441) cu t^2 și se ține cont că $x = v_{rx}t; y = v_{ry}t; z = v_{rz}t$. Se obține:

$$\frac{v_1^2 x^2}{v_r^2 - v_1^2} + \frac{v_2^2 y^2}{v_r^2 - v_2^2} + \frac{v_3^2 z^2}{v_r^2 - v_3^2} = 0 \quad (1.442)$$

Relația se mai scrie ca:

$$\begin{aligned} & x^2 v_1^2 (v_r^2 - v_2^2) (v_r^2 - v_3^2) + \\ & v_2^2 y^2 (v_r^2 - v_1^2) (v_r^2 - v_3^2) + \\ & v_3^2 z^2 (v_r^2 - v_1^2) (v_r^2 - v_2^2) = 0 \end{aligned} \quad (1.443)$$

Aceasta este ecuația suprafeței de undă.

1.6.5 Elipsoidul indicilor de refracție

Se pune problema de a determina indicele de refracție funcție de direcția vectorului \vec{D} . Pentru aceasta se consideră relația (1.416) scrisă sub forma:

$$\frac{D_x}{\varepsilon_1} (k^2 - k_1^2) = k_x (\vec{k} \vec{E}) \quad (1.444)$$

pe care o vom înmulți cu D_x . Relația devine:

$$\frac{D_x^2}{\varepsilon_1} (k^2 - k_1^2) = D_x k_x (\vec{k} \vec{E}) \quad (1.445)$$

Rezultă:

$$k_x D_x = \frac{D_x^2 (k^2 - k_1^2)}{\varepsilon_1 (\vec{k} \vec{E})} = \frac{D_x^2 (k^2 - k_1^2)}{\varepsilon_0 n_1^2 (\vec{k} \vec{E})} \quad (1.446)$$

$$k_y D_y = \frac{D_y^2 (k^2 - k_2^2)}{\varepsilon_0 n_2^2 (\vec{k} \vec{E})} \quad (1.447)$$

$$k_z D_z = \frac{D_z^2 (k^2 - k_3^2)}{\varepsilon_0 n_3^2 (\vec{k} \vec{E})} \quad (1.448)$$

Deoarece:

$$\vec{k} \vec{D} = k_x D_x + k_y D_y + k_z D_z = 0$$

ținând cont de relațiile (1.446), (1.447), (1.448) rezultă:

$$\frac{D_x^2 (k^2 - k_1^2)}{n_1^2} + \frac{D_y^2 (k^2 - k_2^2)}{n_2^2} + \frac{D_z^2 (k^2 - k_3^2)}{n_3^2} = 0 \quad (1.449)$$

sau:

$$\left(\frac{D_x^2}{n_1^2} + \frac{D_y^2}{n_2^2} + \frac{D_z^2}{n_3^2} \right) k^2 = \frac{D_x^2 k_1^2}{n_1^2} + \frac{D_y^2 k_2^2}{n_2^2} + \frac{D_z^2 k_3^2}{n_3^2} \quad (1.450)$$

Dar:

$$\frac{k_1^2}{n_1^2} = \frac{k_2^2}{n_2^2} = \frac{k_3^2}{n_3^2} = \frac{k^2}{n^2} \quad (1.451)$$

Rezultă:

$$\frac{D_x^2}{n_1^2} + \frac{D_y^2}{n_2^2} + \frac{D_z^2}{n_3^2} = \frac{D^2}{n^2} \quad (1.452)$$

Relația (1.452) se înmulțește cu n^2/D^2 ; rezultă:

$$n^2 \left[\frac{D_x^2}{D^2 n_1^2} + \frac{D_y^2}{D^2 n_2^2} + \frac{D_z^2}{D^2 n_3^2} \right] = 1 \quad (1.453)$$

Vom introduce un nou vector \vec{m} astfel încât modulul lui să fie egal cu n ($|\vec{m}| = n$) dar a cărei direcție să coincidă cu direcția vectorului \vec{D} (Fig. 1.57):

$$\vec{m} = n \frac{\vec{D}}{D} \quad (1.454)$$

Relația (1.454) se scrie pe componente astfel:

$$m_x = n \frac{D_x}{D}; \quad m_y = n \frac{D_y}{D}; \quad m_z = n \frac{D_z}{D}; \quad (1.455)$$

Atunci, relația (1.453) devine:

$$\frac{m_x^2}{n_1^2} + \frac{m_y^2}{n_2^2} + \frac{m_z^2}{n_3^2} = 1 \quad (1.456)$$

Figura 1.57: Definierea vectorului \vec{m}

Acesta este elipsoidul indicilor de refracție. Pornind de la acesta putem determina direcția câmpului electric. Diferențiem relația (1.456):

$$2\frac{m_x}{n_1^2}dm_x + 2\frac{m_y}{n_2^2}dm_y + 2\frac{m_z}{n_3^2}dm_z = 0 \quad (1.457)$$

Înlocuim componentele vectorului \vec{m} în relația (1.457) și se obține:

$$\frac{D_x}{n_1^2}dm_x + \frac{D_y}{n_2^2}dm_y + \frac{D_z}{n_3^2}dm_z = 0 \quad (1.458)$$

$$\frac{D_x}{\varepsilon_1} = \frac{D_x}{\varepsilon_0 n_1^2} = E_x \quad (1.459)$$

$$\frac{D_y}{\varepsilon_2} = \frac{D_y}{\varepsilon_0 n_2^2} = E_y \quad (1.460)$$

$$\frac{D_z}{\varepsilon_3} = \frac{D_z}{\varepsilon_0 n_3^2} = E_z \quad (1.461)$$

Atunci din relația (1.458) rezultă:

$$E_x dm_x + E_y dm_y + E_z dm_z = 0 \quad (1.462)$$

Deoarece $\vec{E}d\vec{m} = 0$ rezultă că \vec{E} este perpendicular pe elipsoidul indicilor.

Figura 1.58: Structura undei

1.6.6 Structura undei

Cunoașterea elipsoidului indicilor permite determinarea structurii undei monocromatice cu vectorul de undă \vec{k} (Fig. 1.58).

Planul undei este perpendicular pe vectorul \vec{k} și conține vectorii \vec{D} , \vec{H} , \vec{B} . Vectorul \vec{E} este perpendicular pe suprafața elipsoidului indicilor.

Numim axe optice drepte pentru care cele două viteze v' și v'' sunt egale. În general există două axe pentru care această condiție este îndeplinită. Un astfel de mediu poartă numele de mediu biax. În cazul particular în care două constante dielectrice principale sunt egale $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ cele două axe se confundă și formează axa optică principală. Un astfel de mediu poartă numele de mediu uniax.

1.6.7 Medii uniaxe

Suprafața de undă

Dacă $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ rezultă $v_1 = v_2$. Ecuația (1.443) devine:

$$v_1^2 x^2 (v_r^2 - v_1^2) (v_r^2 - v_3^2) +$$

$$v_2^2 y^2 (v_r^2 - v_1^2) (v_r^2 - v_3^2) + v_3^2 z^2 (v_r^2 - v_1^2)^2 = 0 \quad (1.463)$$

$$(v_r^2 - v_1^2) [x^2 v_1^2 (v_r^2 - v_3^2) + v_2^2 y^2 (v_r^2 - v_3^2) + v_3^2 z^2 (v_r^2 - v_1^2)] = 0 \quad (1.464)$$

Rezultă că:

$$v_r^2 - v_1^2 = 0 \quad (1.465)$$

și:

$$x^2 v_1^2 (v_r^2 - v_3^2) + v_2^2 y^2 (v_r^2 - v_3^2) + v_3^2 z^2 (v_r^2 - v_1^2) = 0 \quad (1.466)$$

de unde rezultă:

$$(x^2 v_1^2 + y^2 v_1^2 + z^2 v_3^2) v_r^2 - v_1^2 v_3^2 (x^2 + y^2 + z^2) = 0 \quad (1.467)$$

Dar $x^2 + y^2 + z^2 = v_r^2 t^2$ și facem $t = 1$. Rezultă:

$$\frac{x^2 + y^2}{v_3^2} + \frac{z^2}{v_1^2} = 1 \quad (1.468)$$

Ecuția (1.465) este ecuația unei sfere de rază v_1 . Ecuția (1.468) este ecuația unui elipsoid de rotație. Astfel

$$x = 0; \quad \frac{y^2}{v_3^2} + \frac{z^2}{v_1^2} = 1 \quad (1.469)$$

$$y = 0; \quad \frac{x^2}{v_3^2} + \frac{z^2}{v_1^2} = 1 \quad (1.470)$$

$$z = 0; \quad x^2 + y^2 = 0 \quad (1.471)$$

De-a lungul axei Oz cele două viteze radiale se confundă. Axa Oz este axa optică a sistemului (Fig. 1.59). Suprafața sferică este cea a unei ordinare iar suprafața elipsoidală este cea a unei extraordinare. Notăm cu $v_o = v_1$ viteza ordinară și cu $v_E = v_3$ viteza extraordinară. Putem denumi indicii de refracție: $n_o = c/v_1 = c/v_o$ indicele de refracție ordinar, $n_E = c/v_E$ indicele de refracție extraordinar. Dacă $v_o < v_E$ mediul este negativ iar dacă $v_o > v_E$ mediul este pozitiv. În Fig. 1.60 sunt reprezentate intersecțiile suprafețelor de undă cu planul yOz.

Figura 1.59: Suprafețele de undă în cazul unor medii uniaxe.

Figura 1.60: Intersecția suprafețelor de unda cu planul yOx pentru a) un mediu negativ $v_0 < v_E$; b) un mediu pozitiv $v_0 > v_E$

Figura 1.61: Elipsoidul indicilor de refracție pentru mediile uniaxe

Elipsoidul indicilor de refracție

Pentru aceasta în formula (1.456) se pune $n_1 = n_2 = n_o$ și $n_3 = n_E$. Ecuația elipsoidului indicilor de refracție devine:

$$\frac{m_x^2 + m_y^2}{n_o^2} + \frac{m_z^2}{n_E^2} = 1 \quad (1.472)$$

Acesta este un elipsoid de revoluție în jurul axei Oz care este axa optică a cristalului.

În Fig. 1.61 este reprezentat și vectorul de undă \vec{k} . Direcțiile vectorilor \vec{D} ai celor două unde monocromatice sunt obținute prin intersecția planului unde cu elipsoidul indicilor de refracție:

a) prima undă este caracterizată de vectorul inducție \vec{D}_o perpendicular pe axa optică a cristalului. Câmpul \vec{E}_o este paralel cu \vec{D}_o și vectorul Poynting \vec{S} are aceeași orientare cu vectorul \vec{k} . Unda asociată poartă numele de undă ordinară. Indicele de refracție n_o este independent de direcția lui \vec{k} .

b) a doua undă este caracterizată de vectorul \vec{D}_E paralel cu planul format de vectorul de undă și axa optică a cristalului. \vec{E}_E și \vec{D}_E nu mai

Figura 1.62: Intersecția elipsoidului indicilor cu planul yOz

sunt paraleli ca \vec{S} și \vec{k} . Indicele corespunzător este indicele de refracție extraordinar n_e și el variază cu direcția lui \vec{k} . Trebuie remarcat că n_E este valoarea maximă pe care o poate lua indicele de refracție extraordinar. În Fig. 1.62 este arătată intersecția suprafeței elipsoidului indicilor cu planul yOz care este o elipsă de ecuație:

$$\frac{m_y^2}{n_o^2} + \frac{m_z^2}{n_E^2} = 1 \quad (1.473)$$

Vom discuta legătura dintre indicele de refracție extraordinar în funcție de direcția vectorului \vec{k} . Din Fig. 1.62 rezultă că:

$$\begin{aligned} m_y &= -n \cos \theta \\ m_z &= +n \cos \theta \end{aligned}$$

Atunci (1.473) devine:

$$\frac{n^2 \cos^2 \theta}{n_o^2} + \frac{n^2 \sin^2 \theta}{n_E^2} = 1$$

sau:

$$\frac{1}{n^2} = \frac{\cos^2 \theta}{n_o^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_E^2} \quad (1.474)$$

Astfel indice n de refracție extraordinar variază cu orientarea vectorului de undă între valorile n_o când \vec{k} este paralel cu axa optică și n_E când \vec{k} este perpendicular pe axa optică.

Ca exemplu de mediu uniax pozitiv este cuarțul (SiO_2) care pentru lungimea de undă $\lambda = 589,3$ nm are indicii de refracție $n_o = 1,5442$ și $n_E = 1,5533$. Ca exemplu de mediu uniax negativ este calcitul (CaCO_3) sau spatul de Islanda care pentru $\lambda = 589,3$ nm are indicii de refracție $n_o = 1,6584$ și $n_E = 1,4864$.

Suprafața indicilor

Dacă punem condițiile ca $n_1 = n_2 = n_o$ și $n_3 = n_E$ ecuația (1.424) devine:

$$n_o^2 \frac{n_x^2}{n^2 - n_o^2} + n_o^2 \frac{n_y^2}{n^2 - n_o^2} + n_E^2 \frac{n_x^2}{n^2 - n_E^2} = 0 \quad (1.475)$$

Rezultă ecuația unui elipsoid de rotație:

$$\frac{n_x^2 + n_y^2}{n_E^2} + \frac{n_z^2}{n_o^2} = 1 \quad (1.476)$$

a cărui intersecție cu planul zOy este o elipsă (Fig.1.63):

$$\frac{n_y^2}{n_E^2} + \frac{n_z^2}{n_o^2} = 1 \quad (1.477)$$

Cercul corespunde indicilor undei ordinare. Se observă că indicele undei extraordinare este același indiferent de direcția de propagare a acesteia. Elipsa corespunde undei extraordinare. Se observă că în acest caz indicele de refracție este dependent de direcția vectorului \vec{k} .

1.6.8 Birefrința

Vom considera un mediu uniax negativ în care ne propunem să determinăm direcțiile în care se propagă unda ordinară și cea extraordinară. Presupunem că unda incidentă cade sub un unghi de 45° pe suprafața de separație dintre aer și un mediu anizotrop. În plus considerăm că raza incidentă este construită în planul secțiunii principale (definit de normala la suprafața de separație și axa optică). Cazul este reprezentat în Fig.

Figura 1.63: Intersecția suprafeței indicilor de refracție cu planul zOy

1.64 unde vom face construcția razelor refractate cu ajutorul suprafeței indicilor de refracție.

Se trasează cercul de rază n_1 , apoi elipsa cu axele n_o și n_E . Fie N_i intersecția acestui cerc cu direcția razei incidente. Se duce apoi o perpendiculară din N pe suprafața de separație. Aceasta intersectează cercul de rază n_o în punctul N_o și elipsa indicilor în N_e . Astfel, unghiul făcut de ON_o cu normala este i_o unghiul de refracție al razei ordinare. Direcția vectorului Poynting al razei ordinare coincide cu direcția acestei raze. Unghiul făcut de ON_e cu normala este unghiul făcut de unda extraordinară cu normala și este i_e . Trebuie remarcat că în acest caz direcția razei extrordinare nu coincide cu direcția vectorului \vec{S} , adică "unda extraordinară" și "raza extraordinară" nu coincid.

Acest fapt este prezentat în Fig 1.65 unde raza incidentă cade normal la suprafața de separație. Pentru a fi îndeplinită condiția de concordanță a fronturilor de undă este necesar ca $k_i \sin i_1 = k \sin i$. Deoarece $i_1 = 0$, pentru ambele unde $i = 0$ și vectorii \vec{k} ai undei ordinare și extraordinare sunt pe aceeași direcție. Pentru raza ordinară direcția vectorului \vec{k} coincide cu direcția vectorului \vec{S} ("raza ordinară" este paralelă cu "unda ordinară"). În schimb pentru unda extraordinară vectorul de undă \vec{k} formează unghiul θ_s cu vectorul Poynting \vec{S} adică cu "raza extraordinară". Polarizarea celor două raze este prezentată în Fig. 1.65.

Figura 1.64: Raza incidentă pe un mediu uniax

Figura 1.65: Raza ordinară și extraordinară în cazul incidenței normale

1.6.9 Lame cristaline

Lamele cristaline sunt lame cu fețe plan paralele care se utilizează pentru a produce lumină cu o polarizare bine determinată.

Cu ajutorul elipsoidului indicelui construit în punctul O cele două vibrații polarizate rectiliniu în lamă sunt caracterizate prin vectorii \vec{D}_o și \vec{D}_e orientați de-a lungul axelor elipsei \mathcal{E} determinată de intersecția planului perpendicular pe \vec{k} cu elipsoidul indicilor. Aceste direcții poartă numele de linii neutre, deoarece toate undele polarizate rectiliniu după aceste direcții traversează lama fără să sufere vreo modificare. Dacă vibrația incidentă polarizată după axa ordinară care este axa elipsei \mathcal{E} perpendiculară pe axa optică traversează lama, apare o variație a fazei:

$$\varphi_o = \frac{2\pi\delta_o}{\lambda_0} = \frac{2\pi}{\lambda_0}n_o e = \frac{2\pi\nu e}{v_o} \quad (1.478)$$

La fel, dacă vibrația unei incidente este polarizată după axa extraordinară (care este cealaltă axă a elipsei), suferă o variație a fazei egală cu:

$$\varphi_e = \frac{2\pi}{\lambda_0}n_e e = \frac{2\pi\nu e}{v_e} \quad (1.479)$$

Dacă $n_e > n_o$ (mediu uniax pozitiv), $v_e < v_o$ axa ordinară este numită axă rapidă iar axa extraordinară axă lentă. Punerea în evidență a liniilor neutre se face introducând lama între doi polarizori încrucișați. Se rotește lama în jurul fascicolului incident până ce apare extincția fascicolului. Cele două direcții sunt axele neutre.

Lamă tăiată paralel cu axa optică

Pentru o undă care cade perpendicular pe lamă undele ordinară și extraordinară se propagă pe aceeași direcție.

Vibrațiile unei ordinare sunt perpendiculare pe axa optică (adică perpendiculare pe planul secțiunii din Fig. 1.66), în timp ce vibrațiile unei extraordinare sunt paralele cu axa optică. La ieșirea din lama de grosime e cele două raze prezintă un defazaj:

$$\Delta\varphi = \varphi_o - \varphi_e = \frac{2\pi}{\lambda_0}(n_o - n_e)e \quad (1.480)$$

Figura 1.66: Unda ordinară și unda extraordinară în cazul unei lame tăiată paralel cu axa optică

Dacă se consideră α_0 unghiul făcut de direcția vibrațiilor liniare cu axa optică atunci vom considera componentele vibrației incidente după direcția axei optice:

$$D_{0e} = D_m (\cos \alpha_0) \cos \omega t \quad (1.481)$$

și perpendicular cu axa optică:

$$D_{0o} = D_m (\sin \alpha_0) \cos \omega t \quad (1.482)$$

La ieșirea din lamă cele două componente sunt:

$$D_e = (\cos \alpha_0) \cos (\omega t + \varphi_0) \quad (1.483)$$

$$D_o = D_m (\sin \alpha_0) \cos (\omega t + \varphi_0) \quad (1.484)$$

Cele două unde sunt polarizate rectiliniu perpendicular cu diferența de fază $\Delta\varphi = \varphi_o - \varphi_e$, se recompun, iar extremitatea vectorului rezultatant \vec{D} va descrie o elipsă

$$\frac{D_e^2}{D_m^2 \cos^2 \alpha_0} + \frac{D_o^2}{D_m^2 \sin^2 \alpha_0} - \frac{2D_e D_o \cos \Delta\varphi}{D_m^2 \sin \alpha_0 \cos \alpha_0} = \sin^2 \Delta\varphi \quad (1.485)$$

Unda emergentă este în general o undă polarizată eliptic. Se poate obține o polarizare circulară dacă:

$$\Delta\varphi = \varphi_o - \varphi_e = \frac{2\pi}{\lambda_0} (n_o - n_e) e = \frac{\pi}{2} \quad (1.486)$$

și $\alpha_0 = \pi/4$. Atunci (1.485) devine:

$$\frac{2D_e^2}{D_m^2} + \frac{2D_o^2}{D_m^2} = 1 \quad (1.487)$$

O astfel de lamă poartă numele de lamă sfert de undă.

1.6.10 Birefrința provocată

Materiale optic izotrope pot deveni optic anizotrope, adică birefringente sub acțiunea unui câmp electric sau magnetic, astfel că proprietățile optice ale unor astfel de materiale sunt modificate.

Efectul Pockels

Efectul Pockels apare sub acțiunea câmpului electric în anumite substanțe care prezintă centre de simetrie (ca de exemplu difosfatul de potasiu $\text{PO}_4\text{H}_2\text{K}$ numit în general cristal KDP). Există două tipuri de efect Pockels: unul longitudinal și altul transversal.

a) Efectul Pockels longitudinal

Acest efect apare atunci când se aplică un câmp electric paralel cu direcția de propagare a luminii. Materialul devine birefringent și:

$$n_e - n_o = \alpha E \quad (1.488)$$

Diferența de fază dintre unda ordinară și unda extraordinară este:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda_0} (n_o - n_e) e = -\frac{2\pi}{\lambda_0} \alpha E e = -\frac{2\pi}{\lambda_0} \alpha U \quad (1.489)$$

unde U este tensiunea aplicată între cei doi electrozi. S-a presupus că mediul optic umple complet spațiul dintre acești electrozi.

b) Efectul Pockels transversal

Acest efect apare atunci când se aplică un câmp electric perpendicular pe direcția de propagare a fascicolului luminos.

Figura 1.67: Celula Kerr: P – polarizor, A – analizor,

Efectul Kerr

Un câmp electric aplicat pe substanțe lichide sau solide izotrope face ca acestea să devină anizotrope uniaxe, direcția axei optice fiind paralelă cu direcția câmpului electric aplicat. Efectul Kerr este un efect electrooptic care se explică prin orientarea moleculelor polare în câmp electric. Deoarece agitația termică contrabalansează ordonarea moleculelor, efectul este important la temperaturi joase.

Considerăm între un polarizor și un analizor o celulă Kerr în care câmpul electric \vec{E} este perpendicular pe direcția de propagare a fascicolului luminos. Substanța se va comporta ca un mediu anizotrop cu axa optică corespunzând direcției câmpului electric (Fig. 1.67).

Diferența de fază ce apare între undele ordinară și extraordinară din cauza acestei birefrințe este:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda_0} (n_o - n_E) = -2\pi ke \left(\frac{U}{d}\right)^2 \quad (1.490)$$

unde U este tensiunea aplicată între electrozi, e este distanța străbătută de lumină în material iar d distanța dintre electrozi. Dacă se utilizează ca substanță de lucru nitrobenzenul $C_6H_5NO_2$ pentru care constanta Kerr este $k = 3,84 \times 10^{12} \text{ mV}^{-2}$, $d = 1 \text{ cm}$, $e = 2 \text{ cm}$, tensiunea necesară pentru ca o astfel de celulă să se comporte ca o lamă semiundă se obține din relația:

$$2\pi ke \left(\frac{U}{d} \right)^2 = \pi$$

de unde:

$$U = \frac{d}{\sqrt{2ke}} = 25 \text{ kV} \quad (1.491)$$

Efectul Cotton Mouton

Acest efect este provocat de un câmp magnetic transversal pe direcția de propagare a luminii și este analogul efectului Kerr. Materialele introduse în câmpul magnetic se comportă precum mediile uniaxe, a căror axă optică este dirijată după câmpul \vec{B} . Birefringența este proporțională cu pătratul câmpului magnetic B^2 și cu lungimea de undă λ_0 .

$$n_E - n_o = M\lambda_0 B^2 \quad (1.492)$$

unde M este o constantă pozitivă sau negativă numită constanta Cotton-Mouton. Ea depinde de natura substanței și de lungimea de undă. Pentru nitrobenzen constanta $M = 2,5 \times 10^{-2} \text{ m}^{-1}\text{T}^{-2}$. Efectul este cu câteva ordine de mărime mai mic decât efectul Kerr. Birefringența nu-și schimbă semnul odată cu schimbarea sensului inducției câmpului magnetic.

Birefringența mecanică

Anizotropia optică determinată de constanțeri mecanice a fost descoperită de Brewster în anul 1815. Pornind de la aceasta, s-a dezvoltat o tehnică numită fotoelasticimetrie, utilă pentru observarea câmpurilor tensiunilor interne.

Dacă se plasează un material plastic între un polarizor și un analizor încrucișate se obține extincție. Dacă plexiglasul este supus unor constrângeri mecanice (Fig. 1.68) se constată că pe ecran se obține din nou lumină. Dacă se rotește analizorul cu 180° nu mai apare extincție. Aceasta înseamnă că lumina care trece prin lamă are o polarizare eliptică. Materialul devine anizotrop cu axa optică dirijată după direcția forțelor ce acționează asupra sa. Dacă p este presiunea ce acționează asupra materialului:

Figura 1.68: Birefringentă provocată mecanic

$$n_e - n_o = C_m p \quad (1.493)$$

atunci:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda_0} (n_o - n_e) e = -\frac{2\pi}{\lambda_0} C_m p e \quad (1.494)$$

C_m este o constantă pozitivă sau negativă. De exemplu pentru plexiglas ea are valoarea $C_m = 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$. Pentru ca lama să se comporte ca lamă sfert de undă:

$$\frac{2\pi}{\lambda_0} C_m p e = \frac{\pi}{2} \quad (1.495)$$

În cazul unei lame de plexiglas cu grosimea de 1 cm presiunea care trebuie exercitată trebuie să fie $p = 375 \text{ MPa}$.

1.6.11 Polarizarea rotatorie

Polarizarea rotatorie este proprietatea unei anumite substanțe (fluide sau solide) de a induce o rotație a planului de polarizare pentru lumina liniar polarizată ce traversează substanța respectivă.

Pe un ecran (Fig. 1.69) se formează imaginea unei diafragme circulare cu ajutorul unei lentile convergente. Un condensator permite iluminarea convenabilă a diafragmei. Cu ajutorul unui filtru plasat după obiect se transformă lumina într-una cvasimonocromatică. Utilizând polarizorul

Figura 1.69: Montajul pentru a punerea în evidență a polarizării rotatorii

obținem o lumină polarizată rectiliniu. Un nou polarizor joacă rolul analizorului care permite studierea vibrațiilor luminoase la nivelul ecranului de observație. Dacă polarizorul și analizorul sunt încrucișați atunci există o extincție a fascicolului. Dacă între polarizorul și analizorul încrucișați se pune o cuvă cu o soluție de zahăr în apă, lumina re apare. Pentru a obține extincția, analizorul trebuie rotit cu un unghi α . În consecință, substanța nu modifică starea de polarizare dar rotește planul de polarizare. Facând experiența cu o cuvă a cărei lățime este dublă (lumina străbate o distanță dublă prin substanță) constatăm că unghiul de rotație al planului de polarizare se dublează. Se obține un fenomen asemănător pentru un cristal de cuarț tăiat perpendicular pe axa optică.

Legile polarizării rotatorii

Legea I-a Anumite corpuri izotrope transparente în lumină monocromatică polarizată rectiliniu, rotesc planul de polarizare în jurul direcției de propagare a luminii. Același lucru este produs de anumite medii anizotrope uniaxe, a căror axă optică este paralelă cu direcția fascicolului incident.

Legea a II-a Există două tipuri de substanțe active: substanțe levogire, care rotesc planul de polarizare către stânga unui observator ce primește lumină și substanțe dextrogire care rotesc planul de polarizare spre dreapta.

Legea a III-a Unghiul de rotație al planului de polarizare este proporțional cu grosimea substanței stăbătută de lumină.

Se poate defini pentru un lichid puterea rotatorie ρ :

$$\rho = \frac{\alpha}{l} \quad (1.496)$$

unde l este lungimea străbătută de lumină prin substanță. Pentru o soluție de concentrație c puterea rotatorie este dată de:

$$\rho_c = \frac{\alpha}{lc} \quad (1.497)$$

Unitatea de măsură pentru ρ_c este m^2kg^{-1} .

Legea a IV-a Unghiul de rotație α depinde de lungimea de undă după legea:

$$\alpha = \frac{A}{\lambda^2} \quad (1.498)$$

Legea a V-a Sensul de rotație a planului de polarizare nu depinde de sensul de propagare a luminii în mediul respectiv.

Puterea rotatorie ρ pentru diverse substanțe pentru $\lambda = 589 \text{ nm}$

Substanță	Putere rotatorie
Cuarț	$\pm 2170 \text{ }^\circ/\text{m}$
HgS	$\pm 3250 \text{ }^\circ/\text{m}$
NaClO ₃	$\pm 3140 \text{ }^\circ/\text{m}$
Metanol lichid	$-497 \text{ }^\circ/\text{m}$
Soluție de zahăr	$645 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{kg}^{-1}$

Efectul Faraday

Anumite substanțe inactive optic devin active optic sub acțiunea unui câmp magnetic \vec{B} paralel cu direcția fascicolului luminos.

Efectul se observă când un cristal de sticlă de flint este plasat între polii unui magnet. Un fascicol de lumină provenind de la un laser He-Ne traversează succesiv un polarizor, cristalul plasat între polii unui electromagnet și un analizor. În absența unui câmp magnetic dacă polarizorul și analizorul sunt încrucișați există extincție. Dacă se aplică un câmp magnetic reapare lumina. Regăsim extincție dacă se rotește analizorul cu un unghi care crește cu grosimea stratului de sticlă traversat. Acest fenomen a fost studiat de fizicianul francez M. Verdet care a arătat că unghiul de rotație este proporțional cu câmpul aplicat:

$$\alpha = V_l B l \quad (1.499)$$

unde V_l este o constantă numită constanta Verdet.

Constanta Verdet pentru diverse materiale ($\lambda = 589 \text{ nm}$)

Material	V_l ($^{\circ}\text{T}^{-1}\text{m}^{-1}$)
ZnS	3750
Flint	528
S ₂ C	705
Apă	218

Efectul prezintă o diferență esențială față de activitatea optică naturală: unghiul de rotație al planului de polarizare se inversează în raport cu sensul de propagare a luminii. Efectul este dublu dacă după prima traversare fascicolul este reflectat de o oglindă. (În cazul unei substanțe natural optice active, o astfel de experiență face să se revină la polarizarea normală după a doua traversare.)

Teoria Fresnel

În cadrul acestei teorii fenomenologice se admite că un mediu activ transmite fără deformații unde polarizate circular dreapta sau circular stânga cu viteze de propagare diferite.

Descompunem unda inițială în două unde, una polarizată circular dreapta și una polarizată circular stânga. Unghiurile de rotație φ_d și φ_s ai vectorilor \vec{E}_d și \vec{E}_s sunt diferite. Pentru a determina direcția vibrației rezultante se adună cele două unde după ce au parcurs același drum prin mediul activ. Planul vibrației vectorului \vec{E} al undei polarizate rezultate este rotit față de vibrațiile undei incidente cu un unghi egal cu (Fig. 1.70):

$$\alpha = \frac{\varphi_d - \varphi_s}{2} \quad (1.500)$$

Dacă o undă plană liniar polarizată este descrisă prin ecuația:

$$E = \text{Re} \left\{ E_0 \exp \left[i\omega \left(t - \frac{z}{v} \right) \right] \right\} \quad (1.501)$$

unda polarizată circular va fi descrisă prin ecuația:

Figura 1.70: Diagramă pentru determinarea unghiului de rotație a planului de polarizare

$$\vec{E} = \text{Re} \left\{ E_0 \vec{u}_x \exp \left[i\omega \left(t - \frac{z}{v} \right) \right] \pm i E_0 \vec{u}_y \exp \left[i\omega \left(t - \frac{z}{v} \right) \right] \right\} \quad (1.502)$$

deoarece orice undă polarizată circular poate fi reprezentată prin sumarea a două unde polarizate perpendicular de aceeași amplitudine, defazate cu un unghi egal cu $\pi/2$. Defazaajul este luat în considerație prin numărul complex $i = \exp(i\pi/2)$. Semnul $+$ corespunde unei polarizări dreapta, iar semnul $-$ corespunde unei polarizări stânga. Pentru determinarea tipului de polarizare se ține cont că pentru o undă polarizată circular dreapta componenta E_y este defazată înaintea componentei E_x cu $\pi/2$:

$$\frac{(E_y)_d}{(E_x)_d} = \exp \left(\frac{i\pi}{2} \right) = i$$

iar pentru o undă polarizată circular stânga E_y este defazată după componenta E_x cu $\pi/2$:

$$\frac{(E_y)_s}{(E_x)_s} = \exp \left(-\frac{i\pi}{2} \right) = -i$$

Dacă se ține cont că $\cos(\alpha + \pi/2) = -\sin \alpha$ atunci:

a) pentru unda polarizată circular dreapta:

$$E_x = E_0 \cos \omega \left(t - \frac{z}{v_d} \right) \quad (1.503)$$

$$E_y = -E_0 \sin \omega \left(t - \frac{z}{v_d} \right) \quad (1.504)$$

b) pentru unda polarizată circular stânga:

$$E_x = E_0 \cos \omega \left(t - \frac{z}{v_s} \right) \quad (1.505)$$

$$E_y = E_0 \sin \omega \left(t - \frac{z}{v_s} \right) \quad (1.506)$$

Utilizăm ipoteza că într-un mediu activ optic viteza de propagare a unei polarizată circular dreapta este diferită de viteza unei polarizată circular stânga. Componenta după axa Ox a câmpului electric este:

$$E_x = (E_x)_d + (E_x)_s \quad (1.507)$$

și componenta după axa Oy a câmpului electric este:

$$E_y = (E_y)_d + (E_y)_s \quad (1.508)$$

Astfel, într-un mediu activ în care neglijăm absorbția după parcurgerea unei distanțe egale cu z componenta după axa Ox este:

$$E_x = E_0 \cos \omega \left(t - \frac{z}{v_d} \right) + E_0 \cos \omega \left(t - \frac{z}{v_s} \right)$$

$$E_x = \left[2E_0 \cos \frac{\omega}{2c} (n_s - n_d) z \right] \left[\cos \omega \left(t - \frac{n_d + n_s}{2c} z \right) \right] \quad (1.509)$$

Componenta după axa Oz este:

$$E_y = E_0 \sin \omega \left(t - \frac{z}{v_d} \right) - E_0 \sin \omega \left(t - \frac{z}{v_s} \right)$$

$$E_y = \left[2E_0 \sin \frac{\omega}{2c} (n_s - n_d) z \right] \left[\cos \omega \left(t - \frac{n_d + n_s}{2c} z \right) \right] \quad (1.510)$$

În relațiile de mai sus am ținut cont că $v_s = c/n_s$ și $v_d = c/n_d$, prin n_s și n_d înțelegând indici de refracție diferiți pentru unda polarizată circular stânga și unda polarizată circular dreapta.

Formulele (1.509) și (1.510) arată că E_x și E_y sunt în fază. Rezultă o undă polarizată liniar. Când unda parcurge în mediul activ un drum $d = z$ planul de polarizare se rotește cu unghiul:

$$\varphi = \frac{\omega}{2c} (n_s - n_d) d = \frac{\pi}{\lambda_0} (n_s - n_d) z \quad (1.511)$$

deoarece inițial unda care intră în mediul optic activ este polarizată de-a lungul axei Ox. Măsurarea unghiului de rotație φ permite determinarea cu precizie a mărimii $\Delta n = n_s - n_d$. Rotația planului de polarizare a fost făcută în cadrul unei teorii electromagnetice fenomenologice. Teoria nu explică însă de ce vitezele celor două unde polarizate circular sunt diferite.

Capitolul 2

Teoria Relativității

2.1 Introducere

Studiul legilor fizicii se face în general în sisteme de referință inerțiale. Problema care se pune este aceea de a formula legile fizicii în diverse sisteme de referință. Această problemă a fost rezolvată prin creerea de către Albert Einstein începând din 1905 a teoriei relativității restrânse și generale.

Teoria relativității restrânse se referă doar la sistemele de referință inerțiale și la invarianța legilor fizicii față de aceste sisteme. În Teoria relativității generale se abordează legile fizicii în sisteme arbitrare și neinertiale. Apariția teoriei relativității a negat sistemul deja constituit al mecanicii newtoniene care fusese construit pe baza unor concepte ca spațiul și timpul absolut și al unor viteze infinite de propagare a interacțiilor. Formularea de către Maxwell a legilor electromagnetismului a permis să se stabilească că interacțiile de acest tip se propagă cu viteză finită, viteză care în vid este egală cu viteza luminii c :

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (2.1)$$

Având în vedere importanța acesteia vom menționa câteva caracteristici ale sale:

1. Ea este viteza tuturor undelor electromagnetice în vid independent de frecvență.
2. Nici un semnal nu poate fi transmis în vid sau în alt mediu cu o viteză mai mare decât viteza luminii.

3. Din relația (2.1) rezultă că viteza luminii depinde de două constante universale ε_0 permitivitatea vidului și μ_0 permeabilitatea vidului. Aceasta înseamnă că ea va avea aceeași valoare $c = 2,99733 \times 10^8$ m/s în orice sistem de referință galilean. Rezultă astfel o primă concluzie și anume că principiul relativității galileene nu se aplică în cazul luminii.

4. Se poate arata că ecuațiile Maxwell nu sunt invariante în raport cu transformările Galilei.

2.2 Bazele experimentale ale teoriei relativității

Studiul fenomenelor magnetice și electrice a condus la sfârșitul secolului XIX la introducerea ipotezei eterului. Eterul era considerat un mediu deosebit de restul mediilor materiale în care se presupune că pătrunde. El era considerat suportul material al câmpului electromagnetic. Au existat două modalități de a formula legile fenomenelor electromagnetice pentru corpurile în mișcare:

a) *Ipoteza antrenării complete a eterului.* Această ipoteză a fost formulată de Hertz și presupune că eterul este antrenat de corpurile în mișcare, antrenarea fiind completă în apropierea lor. Ipoteza a fost introdusă pentru ca să se păstreze invarianța legilor electrodinamicii față de transformările lui Galilei. Ipoteza a fost infirmată experimental de fenomenul aberației stelare (Bradley) și experiența Fizeau pentru determinarea vitezei de propagare a luminii în medii în mișcare.

b) *Ipoteza neantrenării eterului.* Eterul nu participă la mișcarea corpurilor. Din acest motiv la suprafața Pământului ar exista un vânt eteric a cărui viteză este de 30 km/s (viteza de deplasare a Pământului în jurul Soarelui). Ipoteza a fost propusă de Lorentz care a renunțat la aplicarea principiului relativității fenomenelor electromagnetice. Astfel, eterul devine un sistem de referință inerțial privilegiat, viteza luminii față de acesta fiind c iar față de alt sistem de referință valoarea vitezei luminii este dată de relația galileană de compunere a vitezelor.

Deoarece proprietățile optice, electrice și magnetice ale substanțelor depind de pozițiile și vitezele relative ale constituenților microscopici purtători de sarcină, teoria lui Lorentz era în bună concordanță cu experiența. Lorentz a demonstrat că principiul relativității se păstrează până

Figura 2.1: Dispozitivul experimental folosit de Michelson și Morley

la efecte care sunt de ordinul unu în raport cu v/c .

Rămânea posibilitatea ca să se pună în evidență mișcarea unui sistem de referință față de eterul fix prin efecte de ordinul doi în v/c . O astfel de experiență își propune să măsoare viteza vântului de eter față de Pământ prin măsurarea vitezei luminii dintr-un sistem de referință legat de Pământ.

2.2.1 Experiența Michelson și Morley

Dispozitivul experimental (Fig.2.1) constă dintr-o sursă de lumină (S), o oglindă (O) semitransparentă care să permită împărțirea fascicolului în două componente și două oglinzi (O_1 și O_2). Brațul OO_1 are lungimea l_1 , brațul OO_2 are lungimea l_2 .

Fasciculul de lumină ce pleacă din S este separat în O în două fascicole, unul care se propagă spre O_1 și altul care se propagă spre O_2 care apoi după reflexii și transmisii pe oglinzi ajung să interfere în punctul I . Deoarece porțiunile SO și OI sunt comune diferența de drum optic între cele două fascicule se datorează porțiunilor OO_1 și OO_2 .

Să considerăm deplasarea prin eter cu viteza v , a interferometrului. Calculăm timpii în care fasciculele de lumină parcurg drumurile OO_1O și OO_2O . Pentru aceasta vom considera valabile transformările Galilei pentru viteze. Calculul timpului în care raza ce străbate brațul OO_1O îl vom face în sistemul de referință legat de interferometru care se deplasează

Figura 2.2: Schemă pentru calculul lui t_2 în sistemul de referință al eterului față de eter cu v .

$$t_1 = \frac{l_1}{c-v} + \frac{l_1}{c+v} = \frac{2l_1}{c} \frac{1}{1-v^2/c^2} \quad (2.2)$$

Calculul timpului în care raza ce străbate brațul OO_2O îl vom face în sistemul de referință al eterului (Fig. 2.2).

Pentru aceasta vom aplica teorema lui Pitagora:

$$l_2^2 + \left(\frac{1}{2}vt_2\right)^2 = \left(\frac{1}{2}ct_2\right)^2 \quad (2.3)$$

De aici rezultă:

$$t_2 = \frac{2l_2}{c} \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad (2.4)$$

Diferența de timp între cele două raze este:

$$\Delta t = t_1 - t_2 = \frac{2}{c} \left(\frac{l_1}{1-v^2/c^2} - \frac{l_2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \right) \quad (2.5)$$

Rotind interferometrul cu 90° rezultă că:

$$t'_1 = \frac{2l_1}{c} \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad (2.6)$$

și:

$$t'_2 = \frac{2l_2}{c} \frac{1}{1-v^2/c^2} \quad (2.7)$$

Astfel:

$$\Delta t' = t'_1 - t'_2 = \frac{2}{c} \left(\frac{l_1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - \frac{l_2}{1 - v^2/c^2} \right) \quad (2.8)$$

Corespunzător diferențelor de timp Δt și $\Delta t'$ în I se înregistrează anumite franje de interferență. Prin rotirea întregului dispozitiv cu 90° ar trebui să se observe o deplasare a sistemului de franje corespunzătoare diferenței de timp ΔT .

$$\Delta T = \Delta t - \Delta t' = \frac{2(l_1 + l_2)}{c} \left[\frac{1}{1 - \beta^2} - \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \right] \quad (2.9)$$

Pentru viteze mult mai mici decât viteza luminii se obține:

$$\Delta T \simeq \frac{2(l_1 + l_2)}{c} \left[1 + v^2/c^2 - 1 - \frac{1}{2}v^2/c^2 \right] \quad (2.10)$$

$$\Delta T \simeq \frac{2(l_1 + l_2)}{c} \frac{v^2}{c^2} \quad (2.11)$$

Efectul observabil este de ordin 2 în v/c . Rezultatul experiențelor a fost unul negativ, adică nu s-a observat nici o deplasare a sistemului de franje de interferență deși precizia experimentelor inițiale ar fi putut pune în evidență vitezele de ordinul a 10 km/s, iar experiențele mai recente chiar de ordinul metrilor pe secundă.

Au existat o serie de încercări de explicare a acestor rezultate.

a) ipoteza eterului antrenat - care a fost infirmată de alte experiențe;
 b) ipoteza că viteza luminii are valoare absolută în sistemul de referință al sursei (teoria balistică a lui Ritz). Ea a fost infirmată deoarece aceeași experiență realizată cu o sursă extraterestră dă un rezultat tot negativ.

c) ipoteza contracției Lorentz-Fitzgerald. Orice corp în mișcare față de eterul fix se contractă pe direcția de mișcare conform relației:

$$l(v) = l_0 \sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (2.12)$$

unde l_0 este lungimea corpului în repaus față de sistemul de referință al eterului.

Chiar cu această ipoteză mișcarea Pământului față de un sistem de referință privilegiat s-ar pune în evidență prin efectuarea unui experiment de tip Michelson și Morley cu aceeași poziție a dispozitivului și observarea sistemului de franje la două momente astfel alese încât valorile corespunzătoare vitezei Pământului să difere esențial. Ipoteza a fost infirmată de experimentul realizat în 1935 de Kennedy și Thorndyke.

2.2.2 Experiența lui Bertozzi

Rezultatele experimentului au fost publicate de W. Bertozzi în *American Journal of Physics* 32, 1964 p 551. Experimentul a răspuns la întrebarea: viteza luminii poate fi depășită? Pentru aceasta se consideră mișcarea unor electroni într-un accelerator Van-der Graff. Electronii sunt accelerați la o diferență de potențial U care este cunoscută cu o bună precizie. Energia cinetică căpătată de electroni este:

$$E_c = eU \quad (2.13)$$

Electronii cad pe un disc de aluminiu căruia îi cedează energia lor și-i măresc temperatura. Astfel poate fi măsurată cu precizie energia pe care electronii o cedează discului în unitatea de timp. Pe baza mecanicii nerelativiste ar trebui ca pătratul vitezei să fie egal cu:

$$v^2 = \frac{2}{m} E_c \quad (2.14)$$

Viteza este măsurată prin determinarea timpului în care electronii accelerați străbat o regiune în care nu există câmp electric până ce ajung la discul considerat.

Astfel graficul $v^2 = v^2(E_c)$ ar trebui să fie o dreaptă. Se constată că pentru energii ale electronilor mai mari decât 10^5 eV graficul teoretic nu corespunde cu cel experimental și se observă că pe măsură ce energia cinetică crește, viteza se apropie asimptotic de valoarea limită c (Fig.2.3).

Concluziile care se trag din totalitatea experimentelor realizate sunt:

- a) Teoriile câmpului electromagnetic bazate pe ipoteza eterului sunt inconsistente, deoarece eterul ar trebui să aibă proprietăți contradictorii.
- b) Prin nici o experiență nu a putut să fie pusă în evidență mișcarea uniformă a sistemului de referință propriu față de un sistem de referință privilegiat (eterul).

Figura 2.3: Rezultatul experimentului Bertozzi: pătratul vitezei tinde asimptotic către o anumită limită

c) Experimentele de tip Michelson și Morley pot fi explicate dacă admitem că viteza luminii în vid are aceiași valoare indiferent de mișcarea sursei sau observatorului.

2.3 Postulatele teoriei relativității

Teoria relativității se bazează pe două principii fundamentale:

1. *Principiul relativității restrânse:*

Legile fizicii și rezultatele tuturor experiențelor efectuate sunt aceleași în toate sistemele de referință inerțiale; nu există sistem de referință inerțial preferențial.

2. *Principiul constanței vitezei luminii:*

Valoarea vitezei de propagare a luminii în vid este aceeași în toate sistemele de referință inerțiale.

Primul principiu constituie o generalizare la toate fenomenele fizice a proprietății de invarianță în raport cu translația la viteză constantă, proprietate admisă în fizica nerelativistă la fenomene mecanice.

Dacă se admite valabilitatea ecuațiilor Maxwell într-un sistem inerțial având în vedere incompatibilitatea acestora cu transformările Galilei, trebuie să renunțăm la valabilitatea acestora din urmă. Aceasta duce la reformularea legilor mecanicii și la găsirea altor transformări față de care acestea și ecuațiile Maxwell trebuie să fie invariante. Trebuie remarcat că valabilitatea legilor lui Maxwell și a primului principiu al teoriei relativității duce la rezultatul privind invarianța vitezei luminii în vid.

Aceasta însă nu înseamnă că cel de-al doilea principiu poate fi considerat ca derivat din primul principiu. Aceasta deoarece teoria relativității este o teorie generală iar electromagnetismul este o teorie particulară care trebuie să satisfacă condițiile impuse de teoria relativității restrânse.

Al doilea principiu are o formulare ce pare particulară datorită referirii la un fenomen fizic particular - și anume acela al propagării luminii în vid. Se va constata că orice alt fenomen particular de propagare cu viteza c într-un anumit sistem de referință inerțial, satisface în mod obligatoriu aceeași proprietate de invarianță (adică valoarea vitezei de propagare se păstrează constantă în orice alt sistem de referință). Principiul al doilea duce la recunoașterea unei viteze invariante. Atunci când ne referim la viteza luminii o facem pentru a preciza valoarea acesteia.

Determinarea pozițiilor și momentelor presupune existența unor rigle și ceasornice proprii fiecărui sistem de referință inerțial. Referitor la măsurarea lungimilor trebuie remarcat că etaloanele sunt identice în mecanica newtoniană. Ele pot fi alese arbitrar, deoarece legile fizicii se exprimă la fel indiferent de etalon.

Măsurarea timpului nu poate fi considerată în afara evenimentelor ce-i măsoară scurgerea. Practic nu se măsoară timpul ci se precizează momente. Reperul temporal presupune măsurarea timpului în fiecare loc prin considerarea unor ceasornice locale. Posibilitatea de a defini ceasornice identice în orice punct din spațiu rezultă din proprietatea de omogenitate a spațiului (legile fizicii sunt independente de locurile unde se produc procesele respective).

Problema care se pune este aceea a definirii unui timp comun pentru punctele A și B , adică de a corela indicațiile din cele două puncte (într-un sistem de referință inerțial dat). Aceasta înseamnă să se dea o semnificație pentru simultaneitate. Vom utiliza în continuare definiția pentru sincronizare dată de Einstein. Să considerăm de exemplu că la momentul t_A (măsurat de ceasornicul din A) este emis un semnal luminos care ajunge în B unde se consideră că se reflectă și că ajunge din nou în A la momentul t'_A . Vom considera că momentul în care semnalul ajunge în punctul B este t_B (măsurat cu ceasornicul din B). Timpul necesar parcurgerii drumului AB și BA este $\Delta t = t'_A - t_A$. Duratele în care semnalele parcurg drumurile AB și BA sunt egale. Atunci momentul asociat evenimentului care constă în ajungerea semnalului luminos în B va fi:

$$\frac{t_A + t'_A}{2}$$

indicat de ceasornicul din A .

În mod natural vom considera că pentru ca cele două ceasornice din A și B să fie simultane este necesar ca indicația t_B a ceasornicului din B să coincidă cu indicația ceasornicului din A considerată pentru evenimentul respectiv. Rezultă că pentru ca cele două ceasornice să fie sincrone este necesar ca:

$$t_B = \frac{1}{2}(t_A + t'_A) \quad (2.15)$$

În acest mod pot fi sincronizate toate ceasornicele din sistemul de referință considerat. Pe baza operației de sincronizare, simultaneitatea pentru două evenimente ce se desfășoară în locuri diferite, se poate introduce prin egalitatea momentelor de timp t_A și t_B indicate de ceasornicele din punctele respective.

Introducem acum și al doilea principiu al teoriei relativității prin considerarea distanței D dintre punctele A și B și a vitezei luminii c . Momentul emisieii semnalului din A , t_A și cel al recepției semnalului în punctul B adică t_B sunt legate prin relația:

$$t_B - t_A = \frac{D}{c} \quad (2.16)$$

În virtutea principiilor teoriei relativității ecuația de mai sus trebuie să se verifice în orice alt sistem de referință inerțial, adică:

$$t'_B - t'_A = \frac{D'}{c} \quad (2.17)$$

În general spunem că două evenimente sunt corelabile printr-un semnal luminos dacă momentele când au loc evenimentele și distanța dintre ele satisfac o relație de tipul (2.16).

2.3.1 Intervalul spațio-temporal

Așa cum am discutat, un eveniment este definit prin locul unde se petrece și momentul de timp când se petrece, adică poate fi caracterizat cu ajutorul a trei coordonate spațiale și una temporală. Adesea este

comod să utilizăm un spațiu reprezentativ cu patru dimensiuni, trei axe fiind axele de coordonate, iar a patra axa timpului. În acest spațiu un eveniment va fi reprezentat printr-un punct. Astfel de puncte se numesc puncte de univers. În cursul evoluției spațio-temporale a unei particule, punctul de univers descrie o anumită curbă în acest spațiu. Curba poartă numele de linie de univers. Pentru o particulă fixă, linia de univers este o dreaptă paralelă cu axa timpului.

Să transcriem principiul invarianței vitezelor în limbaj matematic. Pentru aceasta vom considera două sisteme de referință S și S' care se deplasează unul față de altul cu viteza v , astfel încât axele Ox și $O'x'$ coincid, iar axele Oy și Oz să fie paralele cu $O'y'$ și respectiv cu $O'z'$.

Să considerăm primul eveniment, emisia unui semnal luminos din punctul de coordonate (x_1, y_1, z_1) la momentul t_1 în sistemul de referință S și cel de-al doilea eveniment sosirea acestui semnal în punctul caracterizat de coordonatele (x_2, y_2, z_2) la momentul t_2 . Semnalul se propagă cu viteza c astfel că spațiul parcurs este $c(t_2 - t_1)$. Pe de altă parte drumul parcurs este:

$$\left[(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 \right]^{1/2}$$

Atunci:

$$(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 - c^2 (t_2 - t_1)^2 = 0 \quad (2.18)$$

Aceleași două evenimente pot fi observate și în sistemul S' . Fie x'_1, y'_1, z'_1 și t'_1 coordonatele primului eveniment și x'_2, y'_2, z'_2 și t'_2 coordonatele celui de-al doilea eveniment. Viteza luminii fiind aceeași avem o relație analoagă cu cea dată de (2.18):

$$(x'_2 - x'_1)^2 + (y'_2 - y'_1)^2 + (z'_2 - z'_1)^2 - c^2 (t'_2 - t'_1)^2 = 0 \quad (2.19)$$

Dacă (x_1, y_1, z_1, t_1) și (x_2, y_2, z_2, t_2) sunt coordonatele a două evenimente oarecare, cantitatea:

$$s_{12}^2 = c^2 (t_2 - t_1)^2 - (x_2 - x_1)^2 - (y_2 - y_1)^2 - (z_2 - z_1)^2 \quad (2.20)$$

este numită intervalul spațio-temporal dintre cele două evenimente (sau interval de univers).

Dacă două evenimente sunt infinitezimal vecine intervalul se scrie:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 \quad (2.21)$$

Expresiile anterioare permit să se considere că intervalul din punct de vedere formal este o distanță între două puncte ale spațiului reprezentativ. Astfel, dacă $ds^2 = 0$ într-un sistem de referință inerțial atunci $ds'^2 = 0$ în alt sistem de referință inerțial iar ds^2 și ds'^2 trebuie să fie proporționale:

$$ds'^2 = a ds^2 \quad (2.22)$$

Coeficientul a trebuie să depindă doar de viteza relativă a celor două sisteme. Dacă a ar depinde de coordonate și de timp, diferitele puncte din spațiu nu ar mai fi echivalente. Coeficientul a nu depinde nici de direcția vitezei căci în acest caz ar contrazice izotropia spațiului.

Să considerăm trei sisteme de referință inerțiale S, S_1, S_2 . Fie \vec{v}_1 viteza relativă a lui S_1 față de S și \vec{v}_2 viteza relativă a lui S_2 față de S . Atunci:

$$ds^2 = a(v_1) ds_1^2 \quad (2.23)$$

$$ds^2 = a(v_2) ds_2^2 \quad (2.24)$$

și

$$ds_1^2 = a(v_{12}) ds_2^2 \quad (2.25)$$

De aici rezultă:

$$\frac{a(v_1)}{a(v_2)} = a(v_{12}) \quad (2.26)$$

Dar v_{12} depinde nu numai de valorile absolute ale lui \vec{v}_1 și \vec{v}_2 ci și de unghiul dintre ele. Acest unghi însă nu trebuie să apară în membrul drept al relației (2.26). Din relația (2.26) rezultă că această constantă este egală cu unitatea. Rezultă că:

$$ds^2 = ds'^2 \quad (2.27)$$

Egalitatea intervalelor infinitezimale determină și egalitatea intervalelor finite:

$$s = s' \quad (2.28)$$

Rezultă o concluzie foarte importantă și anume aceea că intervalul dintre două evenimente este același în toate sistemele de referință inerțiale.

Figura 2.4: Sistemul S' este în mișcare cu viteza \vec{u} față de sistemul S .

2.4 Transformările Lorentz

2.4.1 Transformările Lorentz speciale

Ne propunem să găsim formulele de transformare de la un sistem de referință la altul adică să găsim formulele ce exprimă coordonatele x' , y' , z' , t' ale unui eveniment într-un sistem de referință S' în funcție de coordonatele x , y , z , t ale aceluiași eveniment raportat la sistemul de referință S (Fig.2.4).

Noile transformări trebuie să fie liniare ca și transformările lui Galilei, deoarece ecuațiile de grad mai înalt au mai multe soluții și atunci observațiile dintr-un sistem de referință s-ar interpreta în mod neunivoc în alte sisteme de referință. Trebuie să existe o corespondență biunivocă între coordonatele aceluiași eveniment în diverse sisteme de referință. În plus pentru fenomenele mecanice obișnuite noile transformări trebuie să se reducă la transformările lui Galilei.

Vom considera cele două sisteme de referință ca în Fig. 2.4 (axele Ox și $O'x'$ se suprapun iar axele Oy și Oz sunt paralele cu Oy' și respectiv Oz'). Sistemul S' se deplasează cu viteza u constantă de-a lungul axei Ox . În cazul celor două sisteme coordonatele y și z nu sunt afectate de mișcarea reciprocă a sistemelor adică $y' = y$ și $z' = z$. Într-adevăr să presupunem:

$$y' = ax + by + cz + dt \tag{2.29}$$

Pentru un eveniment din planul Oxz avem $y = 0$ și $y' = 0$ adică:

$$0 = ax + cz + dt$$

pentru orice x, z și t . Aceasta implică $a = 0, c = 0$ și $d = 0$.

Rezultă:

$$y' = by \quad (2.30)$$

Sistemele fiind echivalente este necesar ca și

$$y = by' \quad (2.31)$$

De aici rezultă $b^2 = 1$ adică $b = \pm 1$. Pentru aceeași orientare a axelor, $b = 1$ și $y = y'$. Dacă axele sunt în sensuri contrare $b = -1$. În mod analog ajungem la concluzia că $z = z'$.

Pentru coordonatele x', x relația de transformare nu trebuie să depindă de coordonatele y și z .

$$x' = \alpha (x - ut) \quad (2.32)$$

unde α nu depinde de coordonate ci eventual de viteza u de translație dintre cele două sisteme de referință. În mod analog dacă considerăm transformarea inversă ea trebuie să aibă aceeași formă, singura schimbare este aceea că viteza relativă a lui S față de S' este $-u$.

$$x = \alpha (x' + ut') \quad (2.33)$$

Coeficientul α trebuie să fie același în virtutea echivalenței sistemelor de referință. Pentru determinarea lui α vom aplica principiul constanței vitezei luminii în vid. Să considerăm că în momentul în care originile celor două sisteme O și O' coincid se emite un semnal luminos. Un punct oarecare în care ajunge semnalul luminos are coordonatele $x = ct$ în S și $x' = ct'$ în S' . Aplicăm transformările pentru acest punct:

$$ct' = \alpha (c - u) t \quad (2.34)$$

și:

$$ct = \alpha (c + u) t' \quad (2.35)$$

Înmulțind membru cu membru relațiile (2.34) și (2.35) rezultă:

$$c^2 tt' = \alpha^2 (c^2 - u^2) tt'$$

Atunci:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.36)$$

Rezultă:

$$x' = \frac{x - ut}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.37)$$

și:

$$x = \frac{x' + ut'}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.38)$$

Pentru a determina transformarea timpului vom înlocui (2.37) în relația (2.38). Atunci:

$$x = \frac{x - ut}{1 - u^2/c^2} + \frac{ut'}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.39)$$

Rezultă:

$$t' = \frac{t - \frac{ux}{c^2}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.40)$$

În mod analog:

$$t = \frac{t' + \frac{ux'}{c^2}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.41)$$

Rezumând: transformările Lorentz exprimă trecerea de la un sistem de referință la altul care se mișcă față de primul cu viteză constantă. Ele sunt:

$$x' = \frac{x - ut}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.42)$$

$$y' = y \quad (2.43)$$

$$z' = z \quad (2.44)$$

$$t' = \frac{t - \frac{ux}{c^2}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.45)$$

sau:

$$x = \frac{x' + ut'}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.46)$$

$$y = y' \quad (2.47)$$

$$z = z' \quad (2.48)$$

$$t = \frac{t' + \frac{ux'}{c^2}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} \quad (2.49)$$

Transformările lui Galilei se obțin ca un caz limită când $c \rightarrow \infty$ sau în mod aproximativ când $u \ll c$.

2.4.2 Consecințe ale transformărilor Lorentz

Contrația lungimilor

Să considerăm o bară în repaus față de sistemul S' care este în mișcare uniformă cu viteza u față de sistemul S . Deoarece bara este în repaus față de sistemul S' , coordonatele extremităților sale x'_1 și x'_2 sunt independente de momentul măsurării. Lungimea:

$$l_0 = x'_2 - x'_1 \quad (2.50)$$

reprezintă lungimea de repaus sau lungimea proprie a barei.

Pentru a determina lungimea barei din sistemul S măsurăm coordonatele capetelor barei x_1 și x_2 la același moment de timp. Legăturile dintre coordonatele x_1 , x_2 și x'_2 , x'_1 se obțin cu ajutorul transformărilor Lorentz:

$$x'_2 = \frac{x_2 - ut}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.51)$$

$$x'_1 = \frac{x_1 - ut}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.52)$$

$$l_0 = x'_2 - x'_1 = \frac{x_2 - x_1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.53)$$

Notând cu $l = x_2 - x_1$ lungimea barei măsurate din sistemul S atunci:

$$l = l_0 \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}} \quad (2.54)$$

Rezultă că la măsurarea unei bare în mișcare se obține o lungime mai mică decât atunci când bara este măsurată în repaus. Această contracție se numește contracția Lorentz.

Relativitatea simultaneității

Să considerăm două evenimente A și B simultane în sistemul S . Aceasta înseamnă că evenimentele au loc la același moment de timp. Considerăm că ele au loc în punctele de coordonate $(x_1, 0, 0)$ și $(x_2, 0, 0)$. În sistemul S' evenimentul A se petrece la momentul:

$$t_1 = \frac{t - \frac{u}{c^2}x_1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.55)$$

iar evenimentul B se petrece la momentul:

$$t_2 = \frac{t - \frac{u}{c^2}x_2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.56)$$

Se observă că:

$$t_1 - t_2 = \frac{u}{c^2} \frac{(x_2 - x_1)}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \neq 0 \quad (2.57)$$

Rezultă că în sistemul S' cele două evenimente nu sunt simultane.

Dilatarea duratelor

Să considerăm două evenimente care au loc în același punct de coordonate (x', y', z') din sistemul S' , la momentele t'_1 și t'_2 . Timpul care separă cele două evenimente în sistemul S' este $\Delta t' = t'_2 - t'_1$ și poartă numele de timp propriu.

Dacă măsurăm intervalul de timp dintre cele două evenimente în sistemul S , față de care S' se deplasează cu viteza u de-a lungul axei Ox obținem:

$$\Delta t = t_2 - t_1 \quad (2.58)$$

Legătura dintre momentele de timp din cele două sisteme de referință se obține cu ajutorul transformărilor Lorentz:

$$t_1 = \frac{t'_1 + \frac{u}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.59)$$

și

$$t_2 = \frac{t'_2 + \frac{u}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.60)$$

Atunci:

$$\Delta t = t_2 - t_1 = \frac{t'_2 - t'_1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2.61)$$

Efectul poartă numele de dilatare a timpului, deoarece timpul măsurat în sistemul S este mai mare decât cel măsurat în sistemul propriu. Rezultă că ceasurile în mișcare par a rămâne în urma celor aflate în repaus.

Compunerea vitezelor

Considerăm în continuare că sistemul S' se deplasează cu viteza u de-a lungul axei Ox . Diferențiind relațiile (2.46)-(2.49) se obține:

$$dx = \frac{dx' + udt'}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.62)$$

$$dy = dy' \quad (2.63)$$

$$dz = dz' \quad (2.64)$$

$$dt = \frac{dt' + \frac{u}{c^2} \cdot dx'}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.65)$$

Atunci prin împărțirea relației (2.62) la (2.65) rezultă:

$$v_x = \frac{dx}{dt} = \frac{dx' + udt'}{dt' + \frac{u}{c^2}dt'} \quad (2.66)$$

Deoarece $v'_x = dx'/dt'$ din relația (2.66):

$$v_x = \frac{v'_x + u}{1 + \frac{u}{c^2}} \quad (2.67)$$

Prin împărțirea lui (2.63) la (2.65) rezultă:

$$v_y = \frac{dy}{dt} = \frac{dy' \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}{dt' + \frac{u}{c^2} dx'} = \frac{v'_y \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}{1 + \frac{u}{c^2} v'_x} \quad (2.68)$$

În mod analog:

$$v_z = \frac{v'_z \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}{1 + \frac{u}{c^2} \cdot v'_x} \quad (2.69)$$

În cazul limită când $c \rightarrow \infty$ se regăsesc formulele de compunere a vitezelor din mecanica clasică: $v_x = v'_x + u$, $v_y = v'_y$, $v_z = v'_z$.

2.5 Universul cuadrimensional

2.5.1 Cuadrivectorul spațiu- timp

În relativitate evenimentul este noțiunea fundamentală. El este caracterizat de trei coordonate spațiale (x, y, z) și una temporală (t) .

Vom utiliza pentru coordonatele spațiale notația $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$. Astfel, într-un sistem S un eveniment va fi specificat prin coordonate (x_1, x_2, x_3, t) iar într-un alt sistem de referință S' prin coordonatele (x'_1, x'_2, x'_3, t') . Dacă considerăm două evenimente $E_1(x_1, x_2, x_3, t_1)$ și $E_2(y_1, y_2, y_3, t_2)$ în S și aceleași două evenimente în alt sistem S' , $E_1(x'_1, x'_2, x'_3, t'_1)$ și $E_2(y'_1, y'_2, y'_3, t'_2)$ atunci mărimile care reprezintă intervalele spațio-temporale în cele două sisteme de referință:

$$\Delta s^2 = (x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2 - c^2 (t_1 - t_2)^2$$

și:

$$\Delta s'^2 = (x'_1 - y'_1)^2 + (x'_2 - y'_2)^2 + (x'_3 - y'_3)^2 - c^2 (t'_1 - t'_2)^2$$

sunt egale.

$$\Delta s^2 = \Delta s'^2 \quad (2.70)$$

Această proprietate sugerează, din punct de vedere matematic, o structură de tip spațiu vectorial a mulțimii evenimentelor. Fiecărui eveniment

îi corespunde în acest spațiu un punct, mărimea Δs^2 având în acest spațiu rolul de normă deoarece ea este un invariant.

În acest nou spațiu, cuadrimensional introducem formal notația $x_4 = ix_0 = ict$. Se poate astfel scrie:

$$\Delta s^2 = \sum_{\mu=1}^4 (\Delta x_{\mu})^2 = \sum_{k=1}^3 (\Delta x_k)^2 - (\Delta x_0)^2 \quad (2.71)$$

Această mărime o putem considera ca o definiție a “lungimii” în spațiul respectiv. Trebuie remarcat că această “lungime” nu este afectată de schimbarea sistemului de coordonate.

Definim cuadvectoul spațiu-timp ca fiind ansamblul de patru coordonate ce caracterizează un eveniment (trei spațiale și una temporală). ($x_1, x_2, x_3, x_4 = ix_0 = ict$). Mai mult, cele patru coordonate pot fi considerate ca fiind componentele unei raze vectoriale cuadrimensionale, care poate fi privită ca fiind echivalentul vectorului de poziție în spațiul tridimensional.

Pentru a ușura modul în care se vor exprima mărimile ce vor interveni în continuare vom utiliza notațiile:

$$\beta = \frac{u}{c} \quad (2.72)$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.73)$$

Dacă se ține cont de notațiile introduse mai sus, atunci relațiile de transformare (2.42-2.45) dintre coordonatele unui eveniment în $S (x_1, x_2, x_3, x_4)$ și ale aceluiași eveniment în $S' (x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)$ se scriu:

$$x'_1 = \frac{x_1 + i\frac{u}{c}(ict)}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = \alpha(x_1 + i\beta x_4) \quad (2.74)$$

$$x'_2 = x_2 \quad (2.75)$$

$$x'_3 = x_3 \quad (2.76)$$

$$x'_4 = ict' = ic \frac{t - \frac{ux}{c^2}}{\sqrt{1 - u^2/c^2}} = \alpha(x_4 - i\beta x_1) \quad (2.77)$$

Dacă reprezentăm cuadrivectorul spațiu-timp printr-o matrice coloană atunci putem introduce o matrice de transformare, astfel că relațiile (2.74-2.77) se pot scrie astfel:

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \\ x'_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & i\beta\alpha \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -i\beta\alpha & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \quad (2.78)$$

Putem generaliza și vom defini un cuadrivector ca fiind ansamblul mărimilor A_1, A_2, A_3, A_4 care se transformă la trecerea de la un sistem de referință la alt sistem de referință cu ajutorul aceleiași matrice de transformare ca și cuadrivectorul spațiu-timp. Se poate defini norma în acest spațiu:

$$\sum_{\mu=1}^4 A_\mu^2 = A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 + A_4^2 \quad (2.79)$$

Se poate demonstra că această mărime este un invariant în orice sistem de referință inerțial.

Timpul propriu

Pentru a defini acest concept ne imaginăm că se observă dintr-un sistem de referință inerțial un corp care este în mișcare arbitrară, de care este legat un ceasornic. Mișcarea corpului poate fi considerată uniformă la orice moment de timp. Rezultă că se poate atașa de corp un sistem de referință inerțial pentru un interval de timp infinitezimal. În intervalul de timp dt măsurat de ceasornicul aflat în repaus, ceasornicul aflat în mișcare parcurge distanța:

$$\sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}$$

Problema care se pune este aceea de a determina timpul indicat de ceasornicul aflat în mișcare. El este în repaus față de sistemul de referință atașat de el. Atunci $x'_1 = x'_2 = x'_3 = 0$. Se ține cont că intervalul spatio-temporal este constant:

$$ds^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 - c^2 dt^2 = -c^2 d\tau^2 \quad (2.80)$$

unde τ reprezintă timpul măsurat de ceasornicul mobil în sistemul de referință legat de el. El poartă denumirea de timp propriu.

Deoarece:

$$\frac{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}{dt^2} = v^2$$

rezultă:

$$d\tau = dt \sqrt{1 - \frac{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}{c^2 dt^2}} = dt \sqrt{1 - \frac{v^2 dt^2}{c^2 dt^2}} = dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (2.81)$$

Semnificația lui $d\tau$ este aceea de interval de timp infinitezimal măsurat în sistemul instantaneu propriu de referință al corpului.

Integrând această expresie rezultă timpul indicat de ceasornicul mobil față de cel indicat de ceasornicul fix. Dacă viteza este constantă:

$$\Delta\tau = \tau_2 - \tau_1 = (t_2 - t_1) \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \Delta t \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (2.82)$$

Formula arată că timpul propriu al unui corp în mișcare este mai scurt decât timpul în sistemul de referință față de care se deplasează corpul.

2.5.2 Cuadrivectorii viteză și accelerație

Pornind de la cuadrivectorul spațiu-timp, este posibil să formăm un nou cuadrivector:

$$u_i = \frac{dx_i}{d\tau} \quad (2.83)$$

El poartă numele de cuadriviteză a unei particule. Componentele sale se explicitează astfel:

$$u_i = \frac{dx_i}{d\tau} = \frac{dx_i}{dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \alpha v_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.84)$$

$$u_4 = \frac{dx_4}{d\tau} = \frac{ic dt}{dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{ic}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = i\alpha c \quad (2.85)$$

Putem face notația:

$$u_i = \frac{dx_i}{d\tau} = (\alpha v_1, \alpha v_2, \alpha v_3, i\alpha c) = (\alpha \vec{v}, i\alpha c) \quad (2.86)$$

Se observă că:

$$\sum_{i=1}^4 u_i u_i = \alpha^2 v^2 - \alpha^2 c^2 = -c^2 \quad (2.87)$$

Din punct de vedere geometric u_i este un cuadvivector tangent la linia de univers.

În mod analog se poate defini cuadvivectorul accelerație:

$$w_i = \frac{du_i}{d\tau} \quad (2.88)$$

Astfel:

$$w_i = \frac{du_i}{d\tau} = \frac{d(\alpha v_i)}{dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \alpha \left(v_i \frac{d\alpha}{dt} + \alpha a_i \right), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.89)$$

unde $a_i = dv_i/dt$. Deoarece:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) = \frac{\alpha^3}{c^2} (\vec{v}\vec{a}) \quad (2.90)$$

relația (2.89) devine:

$$w_i = \alpha^2 a_i + \frac{\alpha^4}{c^2} (\vec{v}\vec{a}) v_i, \quad i = 1..3 \quad (2.91)$$

$$w_4 = \frac{du_4}{d\tau} = ic \frac{d\alpha}{dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{i\alpha^4 (\vec{v}\vec{a})}{c} \quad (2.92)$$

Atunci:

$$w_i = \frac{du_i}{d\tau} = \left(\alpha^2 \vec{a} + \frac{\alpha^2}{c^2} (\vec{v}\vec{a}) \vec{v}, \quad \frac{i\alpha^4 (\vec{v}\vec{a})}{c} \right) \quad (2.93a)$$

Dacă se derivează relația (2.87) la τ se obține:

$$\sum_{i=1}^4 u_i w_i = 0 \quad (2.94)$$

Cuadvivectorul accelerație este ortogonal pe cuadvivectorul viteză.

Figura 2.5: Împărțirea în trei regiuni a spațiului cuadridimensional de către conul luminos

2.5.3 Intervale spațiale și temporale

Un eveniment se poate reprezenta într-un spațiu cuadridimensional care are trei axe pe care se reprezintă coordonatele spațiale (x_1, x_2 , și x_3) și a patra pe care se reprezintă coordonata temporală ($x_0 = ct$). Un eveniment care are loc într-un anumit loc și la un anumit moment de timp este reprezentat printr-un punct în acest spațiu, punct care este numit punct de univers.

Mulțimea tuturor evenimentelor (punctelor de univers) corelabile cu evenimentul 0 (evenimentul caracterizat de coordonatele nule) este dată de ecuația:

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - c^2t^2 = 0 \quad (2.95)$$

Aceasta este ecuația unei hipersuprafețe tridimensionale în spațiul $k^{(4)}$ numită hipercon luminos.

Deoarece nu putem reprezenta un spațiu cuadridimensional vom considera intersecția hiperconului luminos cu planul de coordonate (x_1, x_0) (Fig. 2.5). Dreptele de intersecție a hiperconului luminos cu planul considerat satisfac ecuațiile $x_1 = \pm x_0 = \pm ct$. Hiperconul luminos împarte spațiul în trei regiuni:

R_+ : mulțimea evenimentelor separate de origine prin intervalul $\Delta s^2 <$

0 și caracterizate prin $t > 0$; (intervalul Δs^2 este considerat între un punct din spațiu și evenimentul 0)

R_- : mulțimea evenimentelor separate de origine prin intervalul $\Delta s^2 < 0$ și caracterizate prin $t < 0$;

R : mulțimea evenimentelor separate de origine prin intervalul $\Delta s^2 > 0$.

Vom considera un nou sistem de referință S' care se deplasează cu viteza u de-a lungul axei Ox_1 și care are axele paralele cu axele sistemului S inițial. Trebuie remarcat că evenimentul caracterizat prin coordonatele $x_1 = 0, x_2 = 0, x_3 = 0$ și $x_0 = 0$ ($t = 0$) prin aplicarea relațiilor de transformare Lorentz în noul sistem de coordonate este caracterizat de coordonatele $x'_1 = 0, x'_2 = 0, x'_3 = 0$ și $x'_0 = 0$. Aceasta arată că evenimentul 0 are coordonatele nule în toate sistemele de referință. În cazul unui eveniment caracterizat de coordonatele (x_1, x_2, x_3, x_0) aplicând transformările lui Lorentz, noile coordonate (x'_1, x'_2, x'_3, x'_0) în sistemul S' sunt:

$$x'_1 = \alpha(x_1 - \beta x_0) \quad (2.96)$$

$$x'_2 = x_2 \quad (2.97)$$

$$x'_3 = x_3 \quad (2.98)$$

$$x'_0 = \alpha(x_0 - \beta x_1) \quad (2.99)$$

În Fig. 2.6 reprezentăm axele Ox_1, Ox_0 ale sistemului S și axele Ox'_1, Ox'_0 sistemului S' .

Ecuția axei Ox'_1 se obține punând $x'_0 = 0$, de unde rezultă $x_0 = \beta x_1$. Aceasta este ecuația unei drepte care face unghiul

$$\theta = \arctan \frac{x_0}{x_1} = \arctan \beta \quad (2.100)$$

cu axa Ox_1 .

Ecuția axei Ox'_0 se obține pentru $x'_1 = 0$, adică $x_1 = \beta x_0$ care este o dreaptă ce face tot unghiul:

$$\theta = \arctan \frac{x_1}{x_0} = \arctan \beta \quad (2.101)$$

cu axa Ox_0 .

Unghiul cu care sunt rotite noile axe față de cele vechi este mai mic decât $\pi/4$, deoarece $\beta = u/c < 1$.

Figura 2.6: Reprezentarea sistemului S și a sistemului S'

Intervale de tip spațial

Spunem că două evenimente sunt separate printr-un interval de tip spațial dacă $\Delta s^2 > 0$. Datorită caracterului invariant al intervalului spațio-temporal, în orice sistem de referință $\Delta s^2 > 0$. Există câteva proprietăți pe care le au aceste intervale:

a) Nu există sistem de referință în care evenimentele să se petreacă în același loc (de aici denumirea de separare spațială). Presupunând că există un astfel de sistem de referință ar rezulta că:

$$\Delta s^2 = -c^2 t^2 \leq 0 \quad (2.102)$$

ceea ce contrazice ipoteza separării spațiale.

b) Există un sistem de referință pentru care evenimentele sunt simultane.

Pentru a demonstra posibilitatea ca cele două evenimente să fie simultane vom considera pentru simplificare evenimentul E_A ca fiind evenimentul 0 și un eveniment E_B din regiunea considerată. Pentru ca evenimentele E_A și E_B să fie simultane este necesar ca să găsim un sistem de referință a cărui axă Ox'_1 să treacă prin E_B . Acest lucru este posibil deoarece se poate găsi o axă Ox'_1 , care trece prin E_B : ea trebuie rotită cu un unghi $\theta < \pi/4$ față de Ox_1 , fapt ce este posibil.

Figura 2.7: Evenimentul E_B în sistemul S este ulterior evenimentului 0, iar în sistemul S' este anterior evenimentului 0.

c) Ordinea în timp a două evenimente separate spațial poate fi inversată.

Considerăm din nou originea O în E_A și evenimentul E_B reprezentat printr-un punct al planului, $B(x_1, x_0)$ cu $x_0(B) > 0$ (Fig.2.7).

Vom considera un nou sistem de referință astfel încât unghiul dintre Ox_1 și Ox'_1 să fie $\theta > \theta_0$.

Atunci $x'_0(B) < 0$, adică în noul sistem de referință evenimentul E_B este anterior evenimentului E_A . Rezultă că ordinea temporală a celor două evenimente este inversată în cele două sisteme de referință.

Caracterul relativ al ordinii în timp a celor două evenimente face ca pe baza reprezentărilor obișnuite privind corelarea fizică a diferitelor evenimente, să excludem posibilitatea unei legături de tip cauză efect în cazul unei separări de tip spațial.

Intervale de tip temporal

Spunem că două evenimente sunt separate printr-un interval de tip temporal dacă $\Delta s^2 < 0$. În cazul a două evenimente despărțite printr-un astfel de interval există posibilitatea corelării lor printr-un semnal cu viteza $v < c$.

Invers se poate afirma că dacă două evenimente pot fi corelate printr-

Figura 2.8: Evenimentele E_B și O se petrec în același loc în sistemul S'

un semnal cu viteză mai mică decât cea a luminii intervalul care le separă este unul de tip temporal:

$$\Delta s^2 = (\vec{r}_B - \vec{r}_A)^2 - c^2 (t_B - t_A)^2 = v^2 \Delta t^2 - c^2 \Delta t^2 = (v^2 - c^2) (t_B - t_A)^2 < 0$$

Există o serie de proprietăți pe care le satisface intervalul de tip temporal.

a) Nu există nici un sistem de referință în care cele două evenimente să fie simultane. Dacă $t_B = t_A$, atunci rezultă că $\Delta s^2 > 0$; fapt ce ar contrazice definiția dată intervalului temporal $\Delta s^2 < 0$.

b) Există un sistem de referință în care cele două evenimente se petrec în același loc. Pentru acestea trebuie găsit un sistem de referință a cărui axă Ox'_0 să treacă prin E_B . Acest lucru este posibil deoarece $\theta < \pi/4$ (Fig. 2.8).

c) Ordinea în timp a două evenimente separate printr-un interval temporal nu se modifică. Acest lucru se poate justifica considerând tot o reprezentarea grafică. Faptul că ordinea temporală a acestor tipuri de evenimente nu poate fi schimbată arată faptul că ele pot fi evenimente legate cauzal. Invers intervalul spațio temporal dintre două evenimente legate cauzal este de tip temporal.

Intervalul izotrop

Este cazul când $\Delta s^2 = 0$. În acest caz E_B se află pe hiperconul luminos cu vârful în E_A . Acest interval poate fi considerat ca o limită a intervalului temporal în sensul că astfel de evenimente pot fi corelate printr-un semnal luminos (viteza luminii fiind viteza maximă în univers).

2.6 Elemente de dinamică relativistă

2.6.1 Funcția lui Lagrange

În mecanica clasică formularea cea mai generală a legilor de mișcare se obține din principiul variațional al minimei acțiuni care postulează că în mișcarea între două puncte A și B integrala numită acțiune:

$$S = \int_A^B L dt \quad (2.103a)$$

are valoare minimă.

Mărimea L este funcția lui Lagrange și ea depinde de coordonate și viteze (pentru sistemele în care există legături funcția lui Lagrange depinde de coordonatele și vitezele generalizate). Ea este invariantă la transformările Galilei. Funcția Lagrange trebuie construită pentru fiecare sistem în parte. Astfel pentru sistemul particulă liberă ea are forma:

$$L = \sum_{i=1}^3 \frac{m_0 \dot{x}_i}{2} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_0 v_i^2}{2} = \frac{m_0 v^2}{2} \quad (2.104)$$

unde $v^2 = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2$.

Impulsul asociat coordonatei x_i este:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \quad (2.105)$$

În teoria relativității formularea principiului variațional trebuie făcută în așa fel încât acesta și consecințele sale să fie în concordanță cu principiile acestei teorii. Pentru o particulă liberă integrala care definește acțiunea trebuie construită cu ajutorul unui scalar invariant la

schimbarea sistemului de referință. Deoarece un scalar invariant este intervalul spatio-temporal atunci vom defini acțiunea astfel:

$$S = k \int_A^B ds \quad (2.106)$$

Dacă se ține cont că:

$$ds = -cdt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (2.107)$$

și de relația (2.81) funcția lui Lagrange are forma:

$$L = -kc \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (2.108)$$

Pentru determinarea constantei k se ține cont că pentru o particulă liberă atunci când $v \ll c$ funcția lui Lagrange este dată de relația (2.104). Pentru viteze mici relația (2.108) devine:

$$L \simeq -kc \left(1 - \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} \right) = -kc + \frac{k}{2} \frac{v^2}{c} \quad (2.109)$$

Termenul kc este o constantă care nu are nici o importanță. Atunci prin identificarea lui (2.109) și (2.103a) se obține:

$$\frac{m_0 v^2}{2} = \frac{k}{2} \frac{v^2}{c} \quad (2.110)$$

Rezultă:

$$k = m_0 c \quad (2.111)$$

Funcția lui Lagrange are astfel forma:

$$L = -m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (2.112)$$

2.6.2 Energia și impulsul

Prin definiție impulsul particulei are componentele:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = \frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{m_0 v_i}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \text{unde } i = 1, 2, 3 \quad (2.113)$$

Atunci putem scrie că:

$$\vec{p} = m_0 \alpha \vec{v} \quad (2.114)$$

Energia particulei o vom defini ca și în cazul nerelativist:

$$W = \sum_{i=1}^3 p_i \dot{x}_i - L = \sum_{i=1}^3 p_i v_i - L = \vec{p} \vec{v} - L \quad (2.115)$$

$$W = m_0 \alpha v^2 + m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = m_0 \alpha c^2 \quad (2.116)$$

Aceasta înseamnă că energia particulei nu se anulează când viteza particulei devine zero. Această energie poartă numele de energie de repaus a particulei. Ținând cont de expresia cuadrivectorului viteză:

$$u = (\alpha \vec{v}, \quad i c \alpha)$$

și observând că $\vec{p} = m_0 \alpha \vec{v}$, iar $W = m_0 \alpha c^2 = -i m_0 c u_4$ se poate defini cuadrivectorul energie-impuls:

$$p = m_0 u = \left(\vec{p}, \quad \frac{i}{c} W \right) \quad (2.117)$$

Ținând cont de (2.87) norma cuadrivectorului energie-impuls este:

$$\sum_{i=1}^4 p_i^2 = \sum_{i=1}^4 m_0^2 u_i^2 = -m_0^2 c^2 \quad (2.118)$$

Explicităm relația (2.118) și obținem:

$$p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 - \frac{W^2}{c^2} = -m_0^2 c^2$$

$$p^2 - \frac{W^2}{c^2} = -m_0^2 c^2$$

Rezultă:

$$W^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad (2.119)$$

Aceasta este relația care leagă energia unei particule de impulsul său în mecanica relativistă.

a) Rezultă că masa nu mai este o constantă ci depinde de viteza particulei. Pentru a determina variația masei cu viteza se pornește de la definiția impulsului:

$$\vec{p} = m\vec{v} \quad (2.120)$$

Dar s-a dedus că:

$$\vec{p} = m_0 \alpha \vec{v} \quad (2.121)$$

Atunci din (2.120) și (2.121) rezultă:

$$m = m_0 \alpha = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2.122)$$

b) Pornind de la expresia variației masei cu viteza (2.122) și relația (2.116) rezultă pentru energia totală expresia:

$$W = mc^2 \quad (2.123)$$

c) Energia cinetică se definește ca fiind diferența dintre energia totală și energia de repaus:

$$E_c = W - W_0 = mc^2 - m_0 c^2 \quad (2.124)$$

Pentru viteze mici $v \ll c$ se obține:

$$E_c = m_0 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) \approx m_0 \left(\frac{1}{1 - v^2/2c^2} - 1 \right)$$

$$E_c = m_0 \left(1 + \frac{v^2}{2c^2} - 1 \right) \approx \frac{m_0 v^2}{2} \quad (2.125)$$

Aceasta este expresia energiei cinetice din mecanica clasică.

d) Definițiile anterioare sunt compatibile cu existența particulelor cu masă de repaus nulă. Pentru acestea legătura dintre energie și impuls este:

$$W = cp \quad (2.126)$$

În plus dacă se consideră că ele nu au masă de repaus este necesar ca viteza lor să fie $v = c$.

2.6.3 Particulă aflată sub acțiunea unei forțe

Dacă asupra particulei acționează o forță impulsul și energia particulei variază. Definim componentele cuadrivectorului forță pornind de la analogia cu cazul tridimensional:

$$K_i = \frac{dp_i}{d\tau} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (2.127)$$

unde p_i sunt componentele cuadrivectorului energie-impuls. Din (2.127):

$$K_i = m_0 \frac{du_i}{d\tau} = m_0 w_i \quad (2.128)$$

Componentele cuadrivectorului forță pot fi puse în legătură cu componentele vectorului forță din spațiul tridimensional. Dacă se ține cont de (2.81) atunci:

$$K_i = \alpha \frac{dp_i}{dt} = \alpha F_i \quad , \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.129)$$

unde F_i sunt componentele vectorului forță.

Se înmulțește relația 2.128 cu u_i și apoi se însumează după indicele i . Se obține:

$$\sum_{i=1}^4 K_i u_i = \sum_{i=1}^4 m_0 w_i u_i = m_0 \sum_{i=1}^4 w_i u_i = 0 \quad (2.130)$$

deoarece cuadrivectorii accelerație și viteză sunt ortogonali. Rezultă că și cuadrivectorii forță și viteză sunt ortogonali. Rescriem relația (2.130) desfășurat:

$$K_1 u_1 + K_2 u_2 + K_3 u_3 + K_4 u_4 = 0$$

$$K_4 u_4 = -K_1 u_1 - K_2 u_2 - K_3 u_3 \quad (2.131)$$

Deoarece $u_4 = i\alpha$ și $K_i = \alpha F_i$, $u_i = \alpha v_i$ pentru $i = 1, 2, 3$ atunci (2.131) devine:

$$i\alpha K_4 = -\alpha^2 (F_1 v_1 + F_2 v_2 + F_3 v_3) = -\alpha^2 \vec{F} \vec{v}$$

Astfel:

$$K_4 = \frac{i}{c} \alpha \vec{F} \vec{v} \quad (2.132)$$

Știind că produsul $\vec{F} \vec{v}$ reprezintă tocmai puterea, cuadrivectorul K se mai numește cuadrivectorul forța-putere. El poate fi scris astfel:

$$K = \frac{dp}{d\tau} = \left(\alpha \vec{F}, \quad i \frac{\alpha}{c} \vec{F} \vec{v} \right) \quad (2.133)$$

2.6.4 Echivalența dintre masă și energie

Pentru a determina această legătură vom considera relația:

$$\frac{dp_4}{d\tau} = K_4 \quad (2.134)$$

Deoarece:

$$p_4 = \frac{i}{c} W, \quad d\tau = \frac{dt}{\alpha}, \quad K_4 = i \frac{\alpha}{c} \vec{F} \vec{v} \quad (2.135)$$

se obține:

$$\frac{dW}{dt} = \vec{F} \vec{v} \quad (2.136)$$

unde:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = m_0 \frac{d(\alpha \vec{v})}{dt} = m_0 \left(\vec{v} \frac{d\alpha}{dt} + \alpha \frac{d\vec{v}}{dt} \right)$$

Atunci:

$$\frac{dW}{dt} = m_0 v^2 \frac{d\alpha}{dt} + m_0 \alpha \vec{v} \frac{d\vec{v}}{dt} \quad (2.137)$$

Pentru determinarea expresiei $\vec{v}d\vec{v}/dt$ vom deriva pe α . Avem:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v\vec{v}}{c^2}}} = \frac{\alpha^3}{c^2} \vec{v} \frac{d\vec{v}}{dt}$$

Rezultă:

$$\vec{v} \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{c^2}{\alpha^3} \frac{d\alpha}{dt} \quad (2.138)$$

Atunci relația 2.137 devine:

$$\frac{dW}{dt} = m_0 v^2 \frac{d\alpha}{dt} + \frac{m_0 c^2}{\alpha^2} \frac{d\alpha}{dt} = m_0 c^2 \frac{d\alpha}{dt} \quad (2.139)$$

Se integrează relația 2.139 între două momente de timp:

$$W_2 - W_1 = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v_2^2}{c^2}}} \right) = m_2 c^2 - m_1 c^2 \quad (2.140)$$

sau:

$$\Delta W = \Delta m c^2 \quad (2.141)$$

Rezultă că:

$$\Delta m = \frac{\Delta W}{c^2} \quad (2.142)$$

Relația de mai sus arată că unei variații a energiei particulei îi corespunde o variație a masei acesteia. Deși relația a fost stabilită între variația masei unei particule și variația energiei sale cinetice relației (2.142) i se atribuie o semnificație universală.

Capitolul 3

Fundamentele mecanicii cuantice

3.1 Radiația termică

Experiența arată că orice corp încălzit emite radiații electromagnetice (simțite sub formă de căldură). Această emisie apare la orice temperatură mai mare de 0 K, ea fiind continuu distribuită pe toate lungimile de undă. În general procesele care determină o astfel de emisie sunt procese de neechilibru. Dacă această emisie are loc în condiții de echilibru, adică în cazul în care energia emisă este egală cu energia absorbită, temperatura menținându-se constantă radiația poartă numele de radiație termică de echilibru.

La temperaturi joase (sub 500 °C) cea mai mare parte a radiației este concentrată pe lungimile de undă infraroșii (radiațiile care dau senzația de căldură), iar la temperaturi mai mari (peste 500 °C) o parte tot mai mare a energiei se deplasează în domeniul lungimilor de undă din vizibil (corpurile devin incandescente). Radiația termică emisă de Soare, a cărei suprafață se află la 6000 K acoperă toate domeniile lungimilor de undă.

3.1.1 Mărimi fundamentale

1 *Fluxul energetic* Φ . El se definește ca raportul dintre energia radiată de corp și timpul în care are loc acest proces:

$$\Phi = \frac{dE}{dt} \quad (3.1)$$

2 *Puterea de emisie* $R(T)$ este raportul dintre fluxul energetic emis $d\Phi$ de o suprafață elementară și aria acelei suprafețe dS aflată la temperatura T :

$$R(T) = \frac{d\Phi}{dS} \quad (3.2)$$

O astfel de mărime nu furnizează suficientă informație asupra sistemului considerat (radiație termică) deoarece nu ia în considerație distribuția spectrală a acesteia.

3 *Puterea spectrală de emisie* $r_\lambda(T)$

Energia emisă în unitatea de timp de unitatea de suprafață sub formă de radiații electromagnetice cu lungimea de undă λ cuprinsă în intervalul $\lambda, \lambda + d\lambda$, dR_λ va fi proporțională cu $d\lambda$:

$$dR_\lambda = r_\lambda(T) d\lambda \quad (3.3)$$

Mărimea $r_\lambda(T)$ poartă numele de putere spectrală de emisie și reprezintă funcția de distribuție a energiei radiate de unitatea de suprafață aflată la temperatura T în funcție de lungimea de undă λ . Atunci:

$$R(T) = \int_0^\infty r_\lambda(T) d\lambda \quad (3.4)$$

4 *Densitatea volumică a energiei câmpului electromagnetic* w se definește ca raportul dintre energia dW a câmpului electromagnetic aflată în volumul dV și acest volum:

$$w = \frac{dW}{dV} \quad (3.5)$$

5 *Densitatea spectrală de energie electromagnetică* $\rho_\lambda(T)$

Energia electromagnetică din unitatea de volum datorată undelor electromagnetice cu lungimile de undă cuprinse în intervalul $\lambda, \lambda + d\lambda$ este proporțională cu $d\lambda$:

$$dw_\lambda = \rho_\lambda(T) d\lambda \quad (3.6)$$

Mărimea $\rho_\lambda(T)$ poartă numele de densitate spectrală de energie și reprezintă funcția de distribuție a densității volumice a energiei funcție de lungimea de undă. Atunci:

$$w(T) = \int_0^\infty \rho_\lambda(T) d\lambda \quad (3.7)$$

Figura 3.1: Unghiul solid $d\Omega$ în jurul direcției care face un unghi θ cu normala la elementul de suprafață.

Să considerăm o cavitate vidată ai cărei pereți sunt menținuți la o temperatură constantă. În condiții de echilibru fluxul de radiație va fi același în orice punct și în orice direcție. Dacă radiația s-ar propaga într-o singură direcție fluxul de energie ar fi egal cu produsul dintre densitatea de energie w și viteza undei electromagnetice c . Însă energia se propagă în toate direcțiile ce trec printr-un punct. Deoarece acestea sunt uniform distribuite în interiorul unui unghi solid egal cu 4π , în jurul unei direcții date, în interiorul unui unghi solid $d\Omega$ (Fig. 3.1) va trece un flux de energie a cărei densitate este:

$$dj = \frac{cw}{4\pi} d\Omega \quad (3.8)$$

Să considerăm o porțiune elementară ΔS din suprafața cavității. Aceasta va emite în interiorul unghiului solid $d\Omega$ din jurul direcției care face un unghi θ cu normala \vec{n} , fluxul de energie:

$$d\Phi = dj \Delta S \cos \theta = \frac{cw}{4\pi} \Delta S \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi \quad (3.9)$$

Aria ΔS emite fluxul de energie în toate direcțiile din interiorul unui unghi solid egal cu 2π .

$$\Delta\Phi = \frac{cw}{4\pi} \Delta S \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{cw}{4} \Delta S \quad (3.10)$$

Dar fluxul de energie emis de suprafața ΔS mai poate fi scris:

$$\Delta\Phi = R\Delta S \quad (3.11)$$

Din (3.10) și (3.11) rezultă că:

$$R = \frac{cw}{4} \quad (3.12)$$

Ecuția (3.12) trebuie satisfăcută pentru toate componentele spectrale ale radiației. Atunci este adevărată și relația:

$$r_\lambda(T) = \frac{c\rho_\lambda(T)}{4} \quad (3.13)$$

6 *Coefficientul de absorbție* $a(\lambda, T)$ se definește ca fracția din energia incidentă pe suprafața unui corp care este absorbită la lungimea de undă considerată:

$$a_\lambda(T) = \frac{E_a(\lambda, T)}{E(\lambda, T)} \quad (3.14)$$

3.1.2 Corpul negru

Corpul negru este definit ca fiind corpul care absoarbe toată energia ce cade pe suprafața sa. Pentru un astfel de corp:

$$a_\lambda(T) = 1 \quad (3.15)$$

În natură nu există corpuri perfect negre. Cărbunele și platina au un coeficient de absorbție $a_\lambda(T)$ apropiat de unitate într-un domeniu limitat de frecvențe, dar în regiunea infraroșie acest coeficient este mult mai mic ca unitatea. Este posibil să se construiască un dispozitiv ale cărui proprietăți să fie foarte apropiate de cele ale unui corp negru. Să considerăm o cavitate menținută la o temperatură constantă (Fig. 3.2) în care este practicat un mic orificiu. Acest mic orificiu se comportă ca un corp negru. Justificarea este că orice radiație incidentă din afara orificiului va trece prin el și va suferi în interiorul cavității reflexii multiple în interiorul acesteia. La fiecare reflexie o parte din energia radiației este absorbită astfel încât aproape toată energie este absorbită.

Dispozitivul are un coeficient de absorbție foarte apropiat de unitate.

Radiația termică absorbită sau emisă de corpul negru poartă numele de radiație a corpului negru.

Figura 3.2: Corp negru.

Figura 3.3: Dispozitiv pentru studiul radiației corpului negru.

3.1.3 Legile clasice ale radiației termice

Legea lui Kirchhoff

Raportul dintre puterea spectrală de emisie $r_\lambda(T)$ și coeficientul de absorbție $a_\lambda(T)$ este același pentru toate corpurile aflate la aceeași temperatură și este egal cu puterea spectrală de emisie a corpului negru, fiind funcție doar de temperatura T și lungimea de undă λ .

$$r_\lambda(T) / a_\lambda(T) = f_\lambda(T) \quad (3.16)$$

Demonstrația legii a fost realizată pornind de la considerente termodinamice. Cum pentru un corp negru $a_\lambda(T) = 1$, funcțiile $r_\lambda(T)$ și $\rho_\lambda(T)$ sunt funcții universale de λ și T . Trebuie remarcat că prin orificiul incintei considerate în paragraful precedent vor ieși radiații identice cu cele ale corpului negru. Pentru studiul radiației corpului negru se utilizează dispozitivul din Fig. 3.3.

Prisma are rolul de a descompune în radiațiile componente undele electromagnetice provenite de la corpul negru. Prin deplasarea colima-

Figura 3.4: Puterea spectrală de emisie $r_\lambda(T)$ a corpului negru.

torului, pe detector vor cădea toate componentele radiației emise de corpul negru, astfel că se poate înregistra intensitatea fiecărei porțiuni a spectrului. Rezultatele obținute sunt prezentate în Fig.3.4.

Aria de sub aceste curbe reprezintă puterea de emisie a corpului negru la temperaturile respective. Pe măsura ce temperatura crește, crește și puterea de emisie a corpului negru iar maximul puterii spectrale de emisie se deplasează spre lungimi de undă mai mici.

Legea lui Stefan Boltzmann

Pe baza datelor experimentale fizicianul Josef-Stefan Boltzmann (1825-1893) a stabilit în 1879 că puterea de emisie a oricărui corp este proporțională cu puterea a patra a temperaturii absolute. În 1884 Ludwig Boltzmann a obținut din considerente termodinamice că pentru corpul negru puterea de emisie urmează legea:

$$R(T) = \sigma T^4 \quad (3.17)$$

unde: $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ poartă numele de constanta lui Stefan-Boltzmann.

Legea lui Wien

Wien a demonstrat (făcând uz în afară de termodinamică și de teoria electromagnetică a luminii) că densitatea volumică spectrală de energie este:

$$\rho_\nu(T) = \nu^3 F(\nu, T) \quad (3.18)$$

unde $F(\nu, T)$ este o funcție a cărei formă nu poate fi găsită pe baza considerentelor termodinamice.

Legea se poate exprima și atunci când densitatea spectrală de energie este exprimată în funcție de lungimea de undă $\rho_\lambda(T)$. Pentru aceasta se ține cont că pentru un interval de frecvențe $d\nu$ corespunzător intervalului de lungimi de undă $d\lambda$:

$$\rho_\lambda(T) d\lambda = \rho_\nu(T) d\nu \quad (3.19)$$

$$\rho_\lambda(T) = \rho_\nu(T) \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| \quad (3.20)$$

În formula de mai sus intervine un modul, deoarece atunci când frecvența ν crește lungimea de undă λ scade și variațiile corespunzătoare celor două mărimi au semne diferite. Cum $\nu = \frac{c}{\lambda}$ rezultă $\left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| = \frac{c}{\lambda^2}$. Atunci relația 3.20 devine:

$$\rho_\lambda(T) = \rho_\nu(T) \frac{c}{\lambda^2} = \frac{c^4}{\lambda^5} F(\lambda, T) \quad (3.21)$$

O consecință a acestei relații este *legea deplasării Wien*: lungimea de undă corespunzătoare maximului densității spectrale de energie este invers proporțională cu temperatura absolută.

Pentru a demonstra această lege se pune condiția de maxim: $\frac{d\rho_\lambda(T)}{d\lambda} = 0$: introducând totodată o nouă variabilă $\eta = \lambda T$ obținem:

$$\frac{\rho_\lambda(T)}{d\lambda} = \frac{-5c^4}{\lambda^6} F(\eta) + \frac{c^4}{\lambda^5} \frac{dF(\eta)}{d\eta} \frac{d\eta}{d\lambda} = 0 \quad (3.22)$$

adică:

$$5f(\eta) - \eta \frac{df(\eta)}{d\eta} = 0 \quad (3.23)$$

Există o anumită valoare a lui η , care satisface ecuația de mai sus și face ca $\rho_\lambda(T)$ să fie maximă. Notăm această valoare a lui η cu b . Deoarece funcția $F(\eta)$ nu este cunoscută valoarea constantei b a fost determinată pe cale experimentală. S-a obținut: $b = 0,289 \times 10^{-2}$ mK. Atunci:

$$\lambda_m T = b \quad (3.24)$$

unde λ_m este lungimea de undă la care densitatea spectrală își atinge maximumul. Relația (3.24) arată că are loc deplasarea maximumului distribuției către lungimi de undă mai mici când temperatura crește. Aceasta explică de ce un corp capătă culori din ce în ce mai deschise pe măsură ce este încălzit mai puternic.

Legea Rayleigh-Jeans

Vom considera o incintă de volum V ai cărei pereți perfect reflectători sunt încălziți la temperatura T . Deoarece pereții acestei incinte emit unde electromagnetice în aceasta se admite că există un câmp electromagnetic. Acest câmp poate fi descompus în sisteme de unde electromagnetice staționare de diferite frecvențe pe diferite direcții. Fiecare undă staționară reprezintă o undă elementară a câmpului electromagnetic și poartă denumirea de mod de vibrație.

Se poate demonstra în cadrul fizicii clasice că fiecărei unde staționare sau mod de vibrație îi revine o energie medie $\langle \varepsilon \rangle = k_B T$ și ea se compune din energiile medii ale câmpului electric și magnetic egale fiecare cu $\frac{1}{2} k_B T$.

Astfel, calculul energiei câmpului electromagnetic pentru un domeniu de frecvențe $\nu, \nu + d\nu$ se reduce la determinarea numărului modurilor de vibrație dN din acest interval de frecvențe. Exprimând această energie ca $V \rho_\nu(T) d\nu$, atunci se poate determina densitatea spectrală de energie $\rho_\nu(T)$.

Deoarece forma incintei nu influențează densitatea spectrală de energie, pentru simplificarea demonstrației se consideră că forma cavității este un cub cu latura L . Rezolvarea ecuației undelor aplicând condițiile la limită (cum ar fi anularea perturbațiilor pe pereții cavității) conduce la concluzia că valorile componentelor vectorului de undă \vec{k} iau valori discrete:

$$k_x = n_1 \frac{\pi}{L}; k_y = n_2 \frac{\pi}{L}; k_z = n_3 \frac{\pi}{L} \quad (3.25)$$

n_1, n_2, n_3 fiind numere întregi care pot lua valorile 1,2,3,..

Figura 3.5: Spațiul k

Atunci:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \quad (3.26)$$

sau:

$$(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \frac{\pi^2}{L^2} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \quad (3.27)$$

Se observă că în virtutea relației de mai sus fiecărui ansamblu de numere n_1, n_2, n_3 îi corespunde o lungime de undă. Dacă considerăm un sistem de coordonate cu axele k_x, k_y, k_z (spațiul k) fiecare vector de undă \vec{k} poate fi reprezentat de un nod al unei rețele cubice cu latura $\frac{\pi}{L}$ și volumul elementar $\left(\frac{\pi}{L}\right)^3$. Pornind de la aceste considerații putem calcula numărul total de moduri de vibrație din intervalul $(0, k)$. Cum $k_x > 0, k_y > 0, k_z > 0$ acest număr N este (Fig. 3.5):

$$N = \frac{2 \times \text{volumul unei optimi din sfera de rază } k}{\text{volumul asociat fiecărui nod al rețelei}} \quad (3.28)$$

Factorul 2 ia în considerație existența a două stări de polarizare (o undă polarizată circular dreapta și o undă polarizată circular stânga).

Atunci:

$$N = 2 \frac{1}{8} \frac{4\pi k^3}{3} \left(\frac{L}{\pi} \right)^3 = \frac{k^3 L^3}{3\pi^2} \quad (3.29)$$

Deoarece $k = \frac{2\pi}{c}\nu$ relația (3.29) devine:

$$N = \frac{8\pi}{3} \frac{L^3 \nu^3}{c^3} = \frac{8\pi}{3} \frac{V \nu^3}{c^3} \quad (3.30)$$

unde am ținut cont că L^3 este chiar volumul incintei.

Atunci numărul de moduri de vibrație în cazul că frecvența aparține intervalului $\nu, \nu + d\nu$ este:

$$dN = \frac{8\pi V \nu^2}{c^3} d\nu \quad (3.31)$$

iar energia corespunzătoare este:

$$dE = \langle \varepsilon \rangle dN = \frac{8\pi V \nu^2}{c^3} \langle \varepsilon \rangle d\nu \quad (3.32)$$

În cazul teoriei clasice valoarea medie $\langle \varepsilon \rangle$ a unui mod de vibrație este $k_B T$ astfel că:

$$dE = \frac{8\pi V \nu^2}{c^3} k_B T d\nu \quad (3.33)$$

Dar cum $dE = \rho_\nu(T) V d\nu$ rezultă că densitatea spectrală de energie este:

$$\rho_\nu(T) = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} k_B T \quad (3.34)$$

Această relație poartă numele de formula Rayleigh-Jeans și ea este în concordanță cu datele experimentale numai în cazul lungimilor de undă mari și nu este respectată în cazul lungimilor de undă mici.

Expresia densității de energie se poate exprima și în funcție de lungimea de undă ținând cont de relația:

$$\rho_\lambda(T) = \rho_\nu(T) \frac{c}{\lambda^2} \quad (3.35)$$

Atunci:

$$\rho_\lambda(T) = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} k_B T \frac{c}{\lambda^2} = \frac{8\pi}{c^3} \frac{c^2}{\lambda^2} k_B T \frac{c}{\lambda^2} \quad (3.36)$$

Figura 3.6: Densitatea spectrală de energie. Comparație între curba experimentală și formula Rayleigh-Jeans

Cum $\lambda = \frac{c}{\nu}$; $\nu = \frac{c}{\lambda}$:

$$\rho_{\lambda}(T) = 8\pi \frac{k_B T}{\lambda^4} \quad (3.37)$$

Formula lui Rayleigh-Jeans satisface legea lui Wien:

$$\rho_{\nu}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T = \nu^3 \left(\frac{8\pi T}{c^3 \nu} \right) = \nu^3 F \left(\frac{T}{\nu} \right) \quad (3.38)$$

Cu toate acestea ea duce la o concluzie absurdă. Dacă se calculează densitatea de energie totală rezultă că aceasta este infinită:

$$\rho(T) = \int_0^{\infty} \rho_{\nu} d\nu = \frac{8\pi k_B T}{c^3} \int_0^{\infty} \nu^2 d\nu = \infty \quad (3.39)$$

Aceasta înseamnă că echilibrul între corpurile materiale și radiație se va putea stabili numai la o densitate infinită a radiației. Cu alte cuvinte la echilibru atomii corpului ar trebui să emită energie neîncetat. În Fig. (3.6) sunt arătate pentru o temperatură dată curba teoretică (dată de formula Rayleigh-Jeans) și curba experimentală.

Întrucât această formulă duce la o concluzie care este în flagrantă contradicție cu experiența, această situație a fost numită catastrofa ultravioletă. Referitor la acest subiect Lorentz a afirmat că "Legile fizicii

actuale sunt incapabile să explice de ce o sobă emite radiații galbene și nu ultraviolete”.

Formula lui Wien

În anul 1896 Wien a propus o formulă care este în bună concordanță cu experiența tocmai în regiunea spectrală în care formula Rayleigh-Jeans nu este aplicabilă. Ea are formele:

$$\rho_{\lambda}(T) = c_1 \frac{\exp(-c_2/\lambda T)}{\lambda^5} \quad (3.40)$$

sau:

$$\rho_{\lambda}(T) = c'_1 \nu^3 \exp(-c'_2 \nu/T) \quad (3.41)$$

unde c_1 , c_2 , c'_1 și c'_2 sunt constante. Formula s-a dovedit a fi aplicabilă pentru undele scurte (frecvențe mari).

Astfel la sfârșitul secolului al XIX-lea existau două formule, fiecare dintre ele corespunzând datelor experimentale pentru o regiune limitată a spectrului, nici una neexplicând toată curba teoretică.

3.1.4 Teoria lui Planck

Formula empirică a lui Planck

În octombrie 1900 Planck a propus pentru densitatea spectrală de energie formula:

$$\rho_{\lambda}(T) = c_1 \frac{1}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) - 1} \quad (3.42)$$

cu c_1, c_2 constante.

Această formulă a fost prezentată Societății germane de fizică. Ea reprezintă rezultatul unei interpolări între formulele Rayleigh-Jeans și cea a lui Wien.

Când $\lambda T \gg 1$ (lungimi de undă mari și temperaturi ridicate):

$$\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) \simeq 1 + \frac{c_2}{\lambda T} \quad (3.43)$$

din (3.42) rezultă:

$$\rho_{\nu}(T) = \frac{c_1}{c_2} \frac{T}{\lambda^4} \quad (3.44)$$

Această formulă coincide cu formula Rayleigh -Jeans.

Când $\lambda T \ll 1$, $\frac{c^2}{\lambda T} \gg 1$ și cum $\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) \gg 1$, rezultă:

$$\rho_\lambda(T) = c_1 \frac{\exp\left(-\frac{c_2}{\lambda T}\right)}{\lambda^5} \quad (3.45)$$

adică se ajunge la formula lui Wien.

Ipoteza lui Planck

După această prezentare în mai puțin de o săptămână Planck a reușit să fundamenteze teoretic afirmația sa. El a considerat că formula (3.32) este corectă însă expresia pentru energia medie a unui oscilator este greșită. Astfel densitatea spectrală de energie este:

$$\rho_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \langle \varepsilon \rangle \quad (3.46)$$

Pentru calculul energiei medii $\langle \varepsilon \rangle$ Planck a făcut ipoteză că emisia și absorbția undelor electromagnetice de frecvență ν se face astfel încât energia undelor emise și absorbite este un multiplu întreg al unei cantități de energie (cuantă) a cărei mărime este proporțională cu frecvența radiației.

$$\varepsilon = h\nu \quad (3.47)$$

unde $h = 6,623 \times 10^{-34}$ Js este o constantă universală (constantă lui Planck).

Pentru calculul energiei medii a unui mod de oscilație vom considera că probabilitatea ca energia acestuia să fie $nh\nu$ este proporțională cu $\exp\left(-\frac{nh\nu}{k_B T}\right)$ conform legii de distribuție Boltzmann. Atunci energia medie a unui mod de oscilație este:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu \exp(-nh\nu\beta)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nh\nu\beta)} \quad (3.48)$$

unde $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Se observă că putem scrie:

$$\langle \varepsilon \rangle = -\frac{d}{d\beta} \left[\ln \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nh\nu\beta) \right] \quad (3.49)$$

$$\langle \varepsilon \rangle = -\frac{d}{d\beta} \ln \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} = \frac{h\nu \exp(-\beta h\nu)}{1 - \exp(-\beta h\nu)} \quad (3.50)$$

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{h\nu}{\exp(h\nu\beta) - 1} \quad (3.51)$$

Atunci relația (3.46) devine:

$$\rho_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp(h\nu\beta) - 1} \quad (3.52)$$

Din relația lui Planck rezultă legea lui Stefan-Boltzman. Pentru aceasta se calculează densitatea de energie:

$$w(T) = \int_0^\infty \rho_\nu(T) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \frac{\nu^3 d\nu}{\exp(\beta k_B T) - 1} \quad (3.53)$$

Făcând substituția:

$$x = \frac{h\nu}{k_B T} \quad (3.54)$$

relația (3.53) devine:

$$w(T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{k^4 T^4}{h^4} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (3.55)$$

Cum:

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \quad (3.56)$$

atunci:

$$w(T) = \frac{8\pi^5}{15c^3} \frac{k^4 T^4}{h^3} \quad (3.57)$$

astfel că:

$$R(T) = \frac{c}{4} w(T) = \frac{8\pi^5}{60c^2} \frac{k^4 T^4}{h^3} = \sigma T^4 \quad (3.58)$$

unde constanta lui Stefan Boltzmann este:

$$\sigma = \frac{8\pi^5 k^4}{60c^2 h^3} = 5,67 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{k}^{-4}$$

Legile radiației corpului negru furnizează metode de măsurare a temperaturii corpurilor care sunt incandescente. Ansamblul de metode de măsură a temperaturilor bazate pe dependența dintre temperatură și puterea spectrală de emisie a corpului analizat poartă numele de pirometrie optică. Metodele sunt importante pentru corpurile ale căror temperaturi sunt mai mari de 2000 K.

Astfel, pe baza legii lui Wien a fost determinată temperatura la suprafața Soarelui. După efectuarea corecțiilor datorate absorbției luminii în aer se ajunge la concluzia că puterea spectrală de emisie are maximul la lungimea de undă $\lambda_m = 4700 \text{ \AA}$. Acest maxim corespunde unei temperaturi de $6150 \text{ }^\circ\text{C}$, astfel că aceasta este temperatura la suprafața Soarelui. Trebuie în plus remarcat că după parcurgerea atmosferei spectrul solar prezintă un maxim la lungimea de undă $\lambda = 5550 \text{ \AA}$, lungimea de undă la care sensibilitatea spectrală a ochiului este maximă.

3.2 Efectul fotoelectric

Prin efect fotoelectric se înțelege emisia electronilor din substanță sub acțiunea luminii. El a fost descoperit experimental în anul 1887 de către Heinrich Rudolf Hertz.

Studiul efectului fotoelectric se realizează cu ajutorul unei instalații de genul celei prezentate în Fig. 3.7.

Tubul de sticlă (1) este vidat și este prevăzut cu o fereastră de cuarț (2) pentru a nu fi împiedicate radiațiile ultraviolete să ajungă pe catodul (3). Sub acțiunea undelor electromagnetice catodul emite electroni care ajung la anodul (4) astfel că în circuitul extern apare un curent care poate fi măsurat cu galvanometrul G. Tensiunea dintre anod și catod se reglează cu potențiometrul P. Cu ajutorul montajului prezentat mai sus se poate determina variația curentului I în funcție de tensiunea aplicată pentru diverse fluxuri de lumină. Rezultatele obținute pentru o anumită frecvență a radiației și diverse fluxuri sunt prezentate în Fig. 3.8a.

Existența unei pante în graficul dependenței $I = I(U)$ arată că electronii pornesc de la catod cu diverse viteze. O parte din acești electroni

Figura 3.7: Instalație pentru studiul efectului fotoelectric: 1- tub vidat, 2- fereastră de cuarț, 3- catod, 4- anod

Figura 3.8: a) Dependența fotocurentului de tensiunea aplicată pentru diverse fluxuri luminoase b) Dependența fotocurentului de tensiunea aplicată pentru radiații luminoase cu frecvențe diferite

Figura 3.9: Dependența tensiunii de frânare funcție de frecvența radiației care produce efectul fotoelectric.

determină un curent în circuit chiar când $U = 0$, adică au o viteză suficient de mare pentru a ajunge la anod fără a mai fi accelerați. Se observă că pentru o diferență de potențial suficient de mare se obține intensitatea I_s de saturație, ceea ce înseamnă că toți electronii emiși de catod ajung la anod. Curentul de saturație este cu atât mai mare cu cât fluxul de lumină incidentă este mai mare. Dacă tensiunii aplicate între anod și catod îi este schimbată polaritatea, pentru o anumită valoare a ei are loc anularea curentului. Această tensiune U_f poartă numele de tensiune de frânare. Rezultă că tensiunea de frânare este suficientă pentru a nu mai permite unui electron emis cu viteză maximă v_m să ajungă la anod. Putem scrie:

$$\frac{mv_m^2}{2} = eU_f \quad (3.59)$$

În plus, indiferent de valoarea fluxului luminos tensiunea de frânare este aceeași. Dacă se realizează experimente cu lungimi de undă diferite se constată că tensiunea de frânare este cu atât mai mare cu cât frecvența luminii este mai mare (Fig.3.8b).

Dacă se determină dependența tensiunii de frânare funcție de frecvența radiației se constată că aceasta este o dependență liniară, panta acesteia nedepinzând de materialul din care este realizat catodul (Fig.3.9). În plus se constată că există o anumită frecvență de prag ν_p sub care efectul fotoelectric nu mai apare indiferent de valoarea fluxului undei luminoase. S-a constatat totodată că efectul fotoelectric este practic instantaneu (tim-

pul dintre momentul iluminării și momentul apariției curentului este mai mic de 10^{-9} s).

Sintetizând, putem enunța legile experimentale ale efectului fotoelectric.

1. Emisia de electroni are loc imediat ce lumina cade pe suprafața metalului.

2. Intensitatea de saturație a fotocurentului este proporțională cu fluxul luminos ce cade pe catod.

3. Pentru un metal dat există o anumită frecvență de prag ν_p a radiației sub care nu are loc emisia de electroni.

4. Energia cinetică maximă a electronilor emiși depinde liniar de frecvența radiației și este independentă de intensitatea ei.

O abordare clasică a fenomenului nu poate explica aceste legi. Astfel, ne așteptăm ca energia cu care electronul părăsește metalul să fie proporțională cu mărimea fluxului undei electromagnetice. Experimental acest lucru nu se observă deoarece tensiunea de frânare este aceeași indiferent de fluxul undei electromagnetice. Un alt aspect care rămâne neexplicat este acela a timpului de apariție al curentului electric. Astfel, în teoria ondulatorie clasică energia undei electromagnetice este repartizată uniform pe frontul de undă. Pentru a scoate un electron dintr-un atom trebuie să se concentreze suficientă energie pe o regiune de dimensiuni atomice lucru care nu se poate realiza fără o anumită întârziere, mai ales în cazul undelor cu intensități mici.

Explicația fenomenului a fost dată de Einstein în 1905 care a considerat că lumina este formată din fotoni (Einstein a folosit conceptul de cuantă de lumină; termenul de foton a fost introdus în 1926 de G. N. Lewis). El a considerat că fiecare foton are energia:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (3.60)$$

Astfel, efectul fotoelectric este explicat prin absorbția unui foton de către un electron liber din metal. O parte din energia fotonului este folosită la scoaterea acestuia din metal; aceasta poartă numele de lucru de extracție W , restul o regăsim sub formă de energie cinetică a electronului:

$$h\nu = W + \frac{1}{2}mv^2 \quad (3.61)$$

Rezultă că pentru a obține electroni liberi:

$$h\nu \geq W$$

adică:

$$\nu \geq \frac{W}{h} \quad (3.62)$$

Mărimea $\nu_p = \frac{W}{h}$ este frecvența de prag pentru care are loc efectul fotoelectric.

Curentul de saturație este determinat de numărul de electroni ce părăsesc catodul în unitatea de timp. Numărul de electroni emiși este proporțional cu numărul de fotoni ce lovesc catodul, adică este proporțional cu fluxul luminos. Atunci și curentul de saturație este proporțional cu fluxul luminos. Ținând cont de relația (3.59) relația (3.61) devine:

$$h\nu = W + eU_f \quad (3.63)$$

de unde:

$$U_f = \frac{h\nu}{e} - \frac{W}{e} \quad (3.64)$$

Se obține astfel dependența liniară a tensiunii de frână de frecvență (adică dependența liniară a energiei cinetice maxime a electronilor de frecvența radiației). Panta dreptei h/e este aceeași pentru orice metal.

Primele măsurători precise au fost realizate de Millikan între anii 1914-1916. El a măsurat W în funcție de ν și a determinat din panta dreptei pe h obținând valoarea $h = 6,56 \times 10^{-34}$ Js, care coincide foarte bine cu cea determinată de Planck $h = 6,55 \times 10^{-34}$ Js din distribuția spectrală a corpului negru.

3.3 Efectul Compton

A fost descoperit de Compton care a studiat împrăștierea radiației X pe parafină. Radiațiile X au fost descoperite de Röntgen în 1895 și au lungimea de undă de ordinul 10^{-10} m față de 10^{-7} m cât au radiațiile luminoase. Împrăștierea radiațiilor X de către diverse substanțe a fost studiată de către C. G. Barkla în 1909 care a interpretat rezultatele cu ajutorul teoriei electronilor. Unda incidentă acționează asupra electronilor întâlniți și-i obligă să oscileze cu o frecvență egală. Drept rezultat electronii trebuie să emită unde electromagnetice cu aceeași frecvență. Radiația este împrăștiată fără schimbarea frecvenței (împrăștierea Thomson). Rezultatele obținute au fost în bună concordanță cu teoria, cu excepția

Figura 3.10: Instalație pentru punerea în evidență a efectului Compton 1. sursă de raze X 2. colimator 3. blocul de parafină 4. colimator 5. cristal 6. cameră de ionizare detector

unor rezultate anormale obținute pentru radiațiile X dure (corespunzătoare unor lungimi de undă foarte mici). El nu a putut măsura lungimea de undă a radiațiilor împrăștiate.

Acest lucru a fost posibil după anul 1912 când Max von Laue și W. Bragg au arătat că lungimile de undă ale radiațiilor X pot fi măsurate prin difracție pe cristale. Pentru realizarea măsurătorilor, Compton a folosit un dispozitiv similar cu cel prezentat în Fig. (3.10).

Instalația constă dintr-o sursă de raze X (1) în care acestea se obțin prin bombardarea unui anod din molibdem cu electroni, un colimator (2) făcut din plumb (plumbul nu permite trecerea radiațiilor X), blocul de parafină (3), un alt colimator realizat dintr-o serie de plăcuțe de plumb, un cristal (5) și o cameră de ionizare utilizată ca detector (6). Compton a studiat radiația împrăștiată sub diverse unghiuri. În Fig. 3.11 sunt prezentate rezultatele obținute pentru diverse unghiuri de împrăștiere. Dacă anodul este realizat din molibden atunci alături de linia principală a molibdenului ($\lambda_0 = 0,712 \text{ \AA}$) se constată că există o lungime de undă deplasată spre lungimi de undă mai mari.

Valoarea deplasării depinde de unghiul de difuzie și anume crește cu creșterea acestui unghi. Când unghiul de difuzie crește, intensitatea liniei nedepasate scade, iar intensitatea liniei deplasate crește. Diferența dintre lungimile de undă a radiației împrăștiate și a radiației incidente este:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$$

Figura 3.11: Rezultatele obținute în cazul împrăștierei razelor X pentru diferite unghiuri de difuzie în cazul unui anod de molibden. A - reprezintă linia caracteristică a molibdenului iar B - reprezintă linia deplasată

și se numește deplasarea Compton. Experimental s-a constatat că:

$$\Delta\lambda = 2\Lambda \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (3.65)$$

unde Λ este o constantă universală independentă de lungimea de undă λ_0 și θ .

$$\Lambda = 2,42626 \times 10^{-12} \text{ m}$$

Rezultatul poate fi explicat considerând că radiația este de natură pur corpusculară, fiind formată din fotoni. Astfel, Compton a presupus că linia deplasată este datorată împrăștierei fotonilor de către electronii slab legați de atomii țintei. Deoarece energia de legătură a acestor electroni este mult mai mică decât energia fotonilor corespunzători radiației X, împrăștierea poate fi considerată ca fiind făcută pe electroni liberi.

Dacă un foton cu energia $\frac{hc}{\lambda}$ lovește un electron el va pierde o parte din energia sa astfel că în final el va avea energia $\frac{hc}{\lambda} < \frac{hc}{\lambda_0}$. Rezultă că $\lambda > \lambda_0$, adică lungimea de undă a fotonului împrăștiat este mai mare

decât cea a fotonului incident. Pentru a putea calcula deplasarea Compton este necesar să facem unele considerații asupra naturii fotonilor.

Conform teoriei relativității masa unei particule care se deplasează cu viteza v este:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (3.66)$$

unde $\beta = (v/c)^2$. Deoarece fotonul se mișcă cu viteza c , $\beta = 1$ și numitorul formulei de mai sus devine nul. Dacă masa de repaus a fotonului ar avea o valoare finită (adică ar fi diferită de zero) s-ar obține masa de mișcare $m = \infty$. Rezultă că masa de repaus a fotonului trebuie să fie egală cu zero.

Pentru determinarea impulsului fotonului vom considera relația relativistă care leagă energia particulei de impuls:

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2} \quad (3.67)$$

În această relație, dacă se consideră $m_0 = 0$ se obține:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \quad (3.68)$$

Dacă direcția de propagare a undei este dată de vectorul \vec{k} impulsul fotonului are aceeași direcție:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (3.69)$$

Presupunem că înainte de ciocnire electronul este în repaus, adică impulsul electronului este nul. Considerând că impulsul fotonului era înainte de ciocnire $\hbar \vec{k}_0$, după ciocnire impulsul fotonului devine $\hbar \vec{k}$, iar cel al electronului $m\vec{v}$. Procesul este reprezentat în Fig. 3.12.

Aplicând legile de conservare a energiei și impulsului în cazul relativist, se obține:

$$h\nu_0 + m_0c^2 = h\nu + mc^2 \quad (3.70)$$

$$\hbar \vec{k}_0 = \hbar \vec{k} + m\vec{v} \quad (3.71)$$

Se scrie conservarea impulsului pe componente:

$$mv \cos \varphi = \frac{h\nu_0}{c} - \frac{h\nu}{c} \cos \theta \quad (3.72)$$

Figura 3.12: Împrăștierea unui foton pe un electron liber

$$mv \sin \varphi = \frac{h\nu}{c} \sin \theta \quad (3.73)$$

unde s-a ținut cont că $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c}$.

Se ridică cele două relații la pătrat și se adună. Se obține:

$$m^2 v^2 = \left(\frac{h\nu_0}{c} - \frac{h\nu}{c} \cos \theta \right)^2 + \frac{h^2 \nu^2}{c^2} \sin^2 \theta \quad (3.74)$$

de unde rezultă:

$$h^2 \nu_0^2 - 2h^2 \nu \nu_0 \cos \theta + h^2 \nu^2 = m^2 v^2 c^2 \quad (3.75)$$

Relația (3.70) se scrie:

$$h(\nu_0 - \nu) + m_0 c^2 = m c^2 \quad (3.76)$$

Ridicând la pătrat și această relație se obține:

$$h^2 \nu_0^2 - 2h^2 \nu_0 \nu + h^2 \nu^2 + 2m_0 c^2 h(\nu_0 - \nu) = m^2 c^4 - m_0^2 c^4 = m^2 v^2 c^2 \quad (3.77)$$

Scăzând relația (3.77) din (3.75) rezultă:

$$(\nu_0 - \nu) m_0 c^2 = h \nu \nu_0 (1 - \cos \theta) \quad (3.78)$$

Se împarte relația (3.78) la $\nu \nu_0 m_0 c$ și ținând cont că $\lambda = c/\nu$ și $\lambda_0 = c/\nu_0$ rezultă:

$$\Delta \lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (3.79)$$

Comparând relația (3.79) cu (3.65) rezultă că $\Lambda = \frac{h}{m_0c}$. Mărimea Λ poartă denumirea de lungime de undă Compton.

Formula (3.79) arată că deplasarea Compton nu depinde de lungimea de undă a radiației incidente. Doarece $\Lambda = 0,0242 \text{ \AA}$ deplasarea nu este observată în vizibil unde lungimile de undă sunt de ordinul 10^3 \AA . Când electronii sunt împrăștiați pe electronii puternic legați, energia și impulsul sunt schimbate practic cu întreg atomul. Deoarece masa atomului este mult mai mare decât cea a electronului, deplasarea Compton corespunzătoare acestui proces este neglijabilă. Astfel se poate explica existența componentei nemodificată având aceiași lungime de undă λ_0 cu radiația incidentă.

3.4 Modele atomice

3.4.1 Serii spectrale

Prin spectru atomic se înțelege ansamblul lungimilor de undă λ_i (sau frecvențelor ν_i) ale radiațiilor electromagnetice monocromatice emise sau absorbite de un corp. Spectrele pot fi continue dacă radiația electromagnetică conține toate lungimile de undă dintr-un interval dat (spectru de bandă) sau pot fi discrete dacă conține numai anumite lungimi de undă. În cazul corpurilor gazoase pe lângă spectrul de linii pot apare și spectre de bandă. Dacă se utilizează spectrocoape cu putere de rezoluție foarte mare se constată că benzile sunt formate dintr-o mulțime de linii foarte apropiate.

Primul care a descompus lumina albă cu ajutorul unei prisme a fost Isaac Newton. În 1752 T. Melvill a arătat că lumina unui gaz incandescent este compusă dintr-un număr discret de lungimi de undă. S-a descoperit totodată că există și linii de absorbție. Astfel, dacă lumina albă trece printr-un strat absorbant se constată că din spectru lipsesc anumite lungimi de undă. În 1859 Kirchhoff a arătat că pentru o anumită substanță lungimile de undă emise coincid cu lungimile de undă absorbite. Acest fapt constituie practic baza analizei chimice prin metoda spectroscopică. La începutul secolului XX s-a stabilit că spectrele de linii sunt emise de atomi sau ioni în timp ce spectrele de bandă sunt emise de molecule. Din acest motiv unele sunt numite spectre atomice iar celelalte spectre moleculare.

Existența unui mare număr de linii spectrale a reliefat structura internă complexă a atomului. Pentru a caracteriza poziția unei linii spectrale se poate utiliza lungimea de undă λ sau frecvența $\nu = c/\lambda$. Utilizarea frecvenței este mai adecvată pentru a se pune în evidență regularitățile spectrale. Dar pentru calculul frecvențelor trebuia cunoscută viteza luminii c , a cărei valoare nu era cunoscută cu o precizie suficient de bună. Lungimea de undă însă putea fi măsurată cu o precizie foarte bună până la a șaptea zecimală. Din această cauză în spectroscopie în locul frecvenței se utilizează numărul de undă spectroscopic:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad (3.80)$$

Legea fundamentală a spectroscopiei a fost stabilită în 1908 și poartă numele de principiul de combinare Ritz. În concordanță cu acest principiu numărul de undă spectroscopic $\tilde{\nu}$ asociat unei linii spectrale poate fi determinat de diferența a două mărimi numite termeni spectrali:

$$\tilde{\nu} = T_n - T_m \quad (3.81)$$

Prin convenție acești termeni spectrali sunt pozitivi și numerotați în așa fel încât dacă crește indicele corespunzător termenului respectiv, acesta scade. Dacă $n < m$, $T_n > T_m$. Dacă fixăm pe n iar lui m îi atribuim valorile $n + 1$, $n + 2$, ... se obține o serie spectrală. Ansamblul seriilor spectrale constituie spectrul (atomic) corespunzător elementului considerat.

Diferența a două numere de undă aparținând aceleiași serii reprezintă de asemenea un număr de undă a unei linii spectrale care poate fi emisă de atom dar care aparține altei serii spectrale:

$$\begin{aligned} \nu_{nm} &= T_n - T_m \\ \nu_{n'm} &= T_{n'} - T_m \end{aligned}$$

Rezultă:

$$\nu_{nn'} = T_n - T_{n'}$$

S-a constatat că nu toate liniile spectrale care s-au obținut pe baza principiului Ritz se observă experimental. Pentru explicarea neaparității

unor linii spectrale au fost introduse în mod empiric așa numitele reguli de selecție.

Există expresii analitice pentru majoritatea termenilor spectrali ai majorității elementelor. Pentru atomul de hidrogen termenii spectrali sunt dați cu o mare precizie de formula:

$$T_n = \frac{R_H}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.82)$$

unde R_H este constanta lui Rydberg pentru hidrogen și are valoarea determinată experimental:

$$R_H = 10967876 \text{ m}^{-1} \quad (3.83)$$

Pornind de la expresiile (3.81) și (3.82) se pot obține următoarele serii spectrale:

Seria Lyman

$$\tilde{\nu}_{1m} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(1 - \frac{1}{m^2} \right) \quad n = 2, 3, 4, \dots \quad (3.84)$$

Această serie a fost descoperită în 1916 de Lyman în regiunea ultravioletă a spectrului.

Seria Balmer

$$\tilde{\nu}_{2m} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m = 3, 4, 5, \dots \quad (3.85)$$

Primele patru linii ale acestei serii se găsesc în vizibil și sunt notate cu H_α , H_β , H_γ , H_δ ; toate celelalte se situează în ultraviolet. Balmer a reușit să obțină formula (3.85).

Seria Paschen

$$\tilde{\nu}_{3m} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m = 4, 5, 6, \dots \quad (3.86)$$

Această serie a fost prevăzută în 1908 de Ritz și a fost observată anul următor de Paschen în regiunea infraroșie a spectrului.

Seria Brackett

$$\tilde{\nu}_{4m} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m = 5, 6, 7, \dots \quad (3.87)$$

Seria Pfund

$$\tilde{\nu}_{5m} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad m = 6, 7, 8, \dots \quad (3.88)$$

Aceste două serii spectrale se situează în infraroșul îndepărtat.

Pentru metalele alcaline termenii spectrali au forma

$$T_n = \frac{R}{(n + \alpha)^2} \quad (3.89)$$

unde α este o constantă.

Existența seriilor spectrale nu poate fi explicată în nici un fel cu ajutorul fizicii clasice.

3.4.2 Modelul Rutherford

Un mare număr de fapte experimentale au arătat că materia este alcătuită din sarcini pozitive și negative. Repartiția acestora în cadrul atomului a constituit obiectul a numeroase modele. Primul model propus a fost cel a lui Thomson din 1897 care considera atomul de formă sferică, sarcina pozitivă fiind repartizată omogen, iar în interiorul acestuia aflându-se sarcinile negative.

Rutherford a efectuat o serie de experiențe cu privire la împrăștierea particulelor α pe foițe metalice. Experiențele au demonstrat că majoritatea particulelor sunt deviate cu unghiuri foarte mici de la direcția inițială; o mică parte sunt deviate cu unghiuri foarte mari. Rutherford a ajuns la concluzia că aproape toată masa atomului este concentrată într-un nucleu, iar electronii se mișcă în jurul acestuia. Elaborând o teorie a difuziei particulelor α și confruntând această teorie cu rezultatele experimentale a ajuns la concluzia (valabilă și astăzi) că nucleul concentrează aproape întreaga masă atomică și are dimensiuni de ordinul a 10^{-14} m. Din punct de vedere al fizicii clasice un astfel de atom nu este stabil deoarece sarcinile electrice aflate în mișcare accelerată emit unde electromagnetice. Atunci raza traiectoriei electronului s-ar micșora și electronul ar cădea pe nucleu într-un timp $\Delta t < 10^{-10}$ s.

3.4.3 Modelul Bohr

Bohr a prezentat modelul său în anul 1913. El a admis existența modelului planetar considerând pentru simplificare că orbitele electronilor sunt circulare.

La baza teoriei structurii atomului stau două postulate:

Postulatul I: Atomii și sistemele atomice se pot găsi un timp îndelungat numai în stări bine determinate - numite stări staționare - în care acestea nu emit și nici nu absorb energie. În aceste stări sistemele atomice posedă energii care formează un șir discret.

$$E_1, E_2, \dots, E_n$$

Astfel Bohr a postulat că sistemele atomice nu se pot găsi în toate stările prevăzute de mecanica clasică și în plus în contradicție cu electrodinamica clasică, nu pot emite radiații în aceste stări.

Postulatul II: Energia unui atom nu poate varia decât discontinuu prin trecerea dintr-o stare staționară E_n în altă stare staționară E_m . Acest lucru se realizează prin emisia sau absorbția unui foton. Frecvența acestuia este dată de relația:

$$\nu_{nm} = \frac{E_m - E_n}{h}$$

dacă fotonul este absorbit ($E_m > E_n$) sau:

$$\nu_{nm} = \frac{E_n - E_m}{h}$$

dacă fotonul este emis ($E_m < E_n$).

Pentru a putea calcula efectiv valoarea nivelelor de energie a atomului de hidrogen, Bohr a mai adoptat un postulat suplimentar:

Postulatul III: Dintre toate orbitele circulare posibile electronul se află pe acelea pe care momentul său cinetic este un număr întreg de $\frac{h}{2\pi}$ (condiția de cuantificare a orbitelor circulare). Astfel:

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Considerăm pentru început un electron care se mișcă în jurul unui nucleu (pe care-l considerăm inițial infinit de greu) pe o orbită circulară (Fig. 3.13).

Figura 3.13: Electron aflat pe o orbită circulară în jurul nucleului

Pentru ca electronul să rămână pe o orbită circulară este necesar ca forța de atracție coulombiană ce acționează asupra electronului datorită interacției electrostatice cu nucleul de sarcină Ze să fie egală cu forța centrifugă:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (3.90)$$

Din relația (3.90) se obține viteza electronului pe traiectorie:

$$v = \sqrt{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r m}} \quad (3.91)$$

Perioada de mișcare pe orbită este:

$$T = \frac{2\pi r}{v} = 2\pi \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0^2 m}{Ze^2} r^{3/2}} \quad (3.92)$$

Energia totală a sistemului este suma dintre energia cinetică și energia potențială:

$$E = E_C + E_p = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.93)$$

Tinând cont de expresia vitezei (3.91) relația (3.93) devine:

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3.94)$$

Ținând cont de condiția de cuantificare:

$$mvr = n\hbar \quad (3.95)$$

și de expresia vitezei (3.91) se obține raza orbitei:

$$r_n = \frac{(4\pi\epsilon_0) mn^2\hbar^2}{Ze^2} \quad (3.96)$$

Atunci expresia energiei totale devine:

$$E_n = -\frac{Z^2e^4}{8m\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.97)$$

Astfel energia totală a electronului în atomul de hidrogen poate avea doar anumite valori discrete care sunt determinate de numărul n . Numărul de nivele discrete este infinit. Numărul n poartă numele de număr cuantic principal.

Unul din succesele teoriei lui Bohr constă în faptul că a reușit să interpreteze materialul empiric acumulat în domeniul spectroscopiei, referitor la spectrul hidrogenului și al metalelor alcaline. Astfel, dacă se aplică cel de-al doilea postulat Bohr când atomul trece din starea energetică E_n în starea energetică E_m rezultă că acesta emite un foton cu energia $h\nu_{nm}$:

$$h\nu_{nm} = E_n - E_m = \frac{Z^2e^4}{8m\epsilon_0^2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (3.98)$$

În cazul hidrogenului $Z = 1$ și:

$$\nu_{nm} = \frac{e^4}{8m\epsilon_0^2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (3.99)$$

sau:

$$\tilde{\nu}_{nm} = \frac{e^4}{8m\epsilon_0^2\hbar^2c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (3.100)$$

Comparând relația (3.100) cu relațiile (3.84-3.88) rezultă pentru constanta Rydberg expresia:

$$R_H(\infty) = \frac{Z^2e^4}{8m\epsilon_0^2\hbar^2c} \quad (3.101)$$

Figura 3.14: Montajul experimental utilizat în experimentul Frank și Hertz

Valoarea teoretică este mai mare decât cea determinată în mod experimental. Acest rezultat se datorează faptului că s-a considerat că nucleul are o masă infinită. Dacă se consideră că masa nucleului este M atunci în locul masei electronului m trebuie introdusă masa redusă:

$$m_r = \frac{m}{1 + m/M} \quad (3.102)$$

astfel că:

$$R = \frac{R(\infty)}{1 + m/M} \quad (3.103)$$

Corecția realizată este de ordinul a 10^{-3} .

O altă predicție a teoriei a fost punerea în evidență a deuteriului datorită deplasării existente în liniile spectrale ale hidrogenului (1 proton) și deuteriului (1 proton + 1 neutron). Descoperirea s-a realizat în 1932 de către Urey. Tot Urey a descoperit și apa grea D_2O care are proprietăți sensibil diferite față de apa obișnuită. Ea se utilizează ca moderator (încetinește neutronii rapizi) în reactorii nucleari. Apa naturală conține o fracție de $1/10^{18}$ apă grea.

3.4.4 Experimentul Frank și Hertz

Existența nivelelor de energie discrete ale atomului a fost confirmată experimental în anul 1914 de fizicienii James Frank și Gustav Hertz. Montajul folosit în acest experiment este arătat în Fig. 3.14.

Figura 3.15: Dependența curentului anodic în funcție de tensiunea dintre catod și grilă

Un tub umplut cu vapori de mercur la presiuni scăzute (1 torr) conține trei electrozi: catodul C, anodul A și o grilă G. Electronii proveniți de la catodul încălzit (prin emisie termoelectronică) sunt accelerați la o diferență de potențial aplicată între catod și grilă. Această diferență de potențial poate fi variată cu ajutorul potențiometrului P. Un câmp electric invers, slab (determinat de o diferență de potențial de 0,5 V) este aplicat între grilă și anod pentru a încetini mișcarea electronilor către anod.

A fost măsurată dependența curentului anodic în funcție de tensiunea dintre catod și grilă. Curentul a fost măsurat cu galvanometrul G iar tensiunea cu voltmetrul V. Rezultatele obținute sunt prezentate în Fig. 3.15.

Inițial curentul crește atingând un maxim la tensiunea de $U = 4,9$ V, apoi curentul scade brusc și după ce atinge un minim crește din nou. Valori maxime ale curentului se mai obțin la $U = 9,8$ V și $U = 14,7$ V. O astfel de curbă care dă dependența curentului de tensiune poate fi explicată prin existența unor nivele discrete de energie ale atomilor, astfel încât atomii pot absorbi energie numai în cantitățile $\Delta E_1 = E_2 - E_1$, $\Delta E_2 = E_3 - E_2$, ... unde E_1, E_2, E_3 ... sunt energiile stărilor staționare ale atomului.

Cât timp energia electronului este mai mică decât ΔE_1 , ciocnirea dintre electron și atomul de mercur este elastică. Deoarece masa elec-

tronului este mult mai mică decât cea a atomului de mercur, energia electronului nu se schimbă după ciocnire. O parte din electroni cad pe grilă, ceilalți trec prin aceasta și ajung pe anod producând un curent I în circuit. Cu cât viteza electronilor care ajung la grilă este mai mare (adică cu cât tensiunea dintre catod și grilă este mai mare) o fracție mai mare din numărul electronilor emiși de catod vor trece de grilă astfel că și curentul I va crește. Când energia electronului căpătată în spațiul dintre catod și grilă atinge valoarea ΔE_1 , ciocnirea nu va mai fi elastică și electronii care se ciocnesc cu atomii cedează energia ΔE_1 , și continuă mișcarea cu viteze mult mai mici. Astfel numărul de electroni care vor atinge anodul se va diminua.

Atomul care s-a ciocnit cu un electron primește o energie ΔE_1 și trece într-o stare excitată. Valoarea de 4,9 eV corespunde primului potențial de ionizare în atomul de mercur. După un timp de ordinul a 10^{-8} s atomul ajunge în starea fundamentală emițând un foton cu frecvența $\nu = \Delta E_1/h$.

Pentru tensiuni ce depășesc 9,8 V electronii pot pierde energia de 9,8 eV prin două ciocniri inelastice cu atomii de mercur. Ca rezultat curentul va scădea din nou.

Ca o concluzie se poate spune că experimentul a reprezentat o confirmare a postulatelor Bohr.

3.5 Ipoteza de Broglie

Ipoteza a fost formulată de Louis de Broglie în 1924 cu ocazia prezentării la Paris a tezei sale de doctorat ” Cercetări asupra teoriei cuantelor”. El a emis ipoteza că particulele pot avea și proprietăți ondulatorii așa cum radiația are proprietăți corpusculare.

În reprezentarea corpusculară se atribuie unei particulei o energie E și un impuls p . În reprezentarea ondulatorie se lucrează cu frecvența ν și lungimea de undă λ . Dacă cele două reprezentări sunt aspecte diferite ale aceluiași obiect atunci legătura dintre mărimile care-l caracterizează sunt aceleași ca pentru un foton:

$$E = h\nu \quad (3.104)$$

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (3.105)$$

De Broglie a propus ca unei particule să i se asocieze o undă plană cu frecvența ν și lungimea de undă λ determinate de relațiile:

$$\nu = \frac{E}{h} \quad (3.106)$$

și:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.107)$$

Ideea lui de Broglie oferă o explicație cantitativă postulatului al treilea al lui Bohr. Astfel, într-o stare staționară, unda asociată electronului trebuie să fie o undă staționară iar lungimea circumferinței traiectoriei trebuie să corespundă unui număr întreg de lungimi de undă. Astfel:

$$n\lambda = 2\pi r; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.108)$$

Ținând cont de relația (3.107) care dă lungimea de undă, din (3.108) se obține:

$$n \frac{h}{p} = 2\pi r$$

și:

$$L = pr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (3.109)$$

Astfel, se poate asocia unei particule o undă plană numită undă de Broglie:

$$\Psi(\vec{r}, t) = C \exp \left[i \left(\omega t - \vec{k} \vec{r} \right) \right] \quad (3.110)$$

Deoarece $E = h\nu = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \hbar\omega$ rezultă:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (3.111)$$

Cum $\lambda = \frac{h}{p}$:

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar} \quad (3.112)$$

Atunci relația (3.110) devine:

$$\Psi(\vec{r}, t) = C \exp \left[i \left(\frac{E}{\hbar} t - \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right) \right] \quad (3.113)$$

Undele de Broglie prezintă dispersie în vid, adică viteza de fază depinde de lungimea de undă sau vectorul de undă. Pentru o particulă liberă putem exprima impulsul în funcție de k :

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

Se poate astfel exprima energia în două moduri:

$$E = \hbar \omega \quad (3.114)$$

$$E = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (3.115)$$

Rezultă:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m_0} k^2 \quad (3.116)$$

Atunci viteza de fază este:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m_0} = v_f(k) \quad (3.117)$$

Pentru a stabili o relație între mișcarea particulei și evoluția în timp a undei, de Broglie a considerat că particulei trebuie să i se asocieze o undă cuasimonocromatică sau un grup de unde. Aceasta se justifică prin faptul că deplasarea acestora în spațiu poate fi considerată ca o perturbație de durată finită. Calculând viteza de grup (cea care caracterizează propagarea energiei):

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m_0} \right) = \frac{\hbar k}{m_0} = \frac{p}{m_0} = v \quad (3.118)$$

rezultă că ea coincide cu viteza particulei.

Odată stabilite caracteristicile acestei unde s-a pus problema evidențierii ei experimentale. Pentru aceasta trebuie realizate experimente de interferență și de difracție. Pentru obținerea unor fenomene de difracție și de interferență este necesar ca dimensiunile obstacolelor să fie de ordinul de mărime al lungimii de undă. Dacă lungimea de undă este mult

mai mică decât toate dimensiunile acestora aceste efecte sunt neglijabile. De exemplu pentru un corp cu $m = 10^{-6}$ kg ce se deplasează cu viteza $v = 1$ m/s se obține $\lambda = 6,6 \times 10^{-18}$ Å și ea este mult mai mică decât orice corp sau apertură. Rezultă că pentru a pune în evidență comportarea ondulatorie a microparticulelor este necesar să se lucreze cu particule cu o masă cât mai mică. Astfel de particule sunt electronii. Pentru ca aceștia să capete o anumită viteză ei vor trebui să fi accelerați la o diferență de potențial U . Viteza pe care o capătă aceștia este:

$$v = \left(\frac{2eU}{m} \right)^{1/2} \quad (3.119)$$

Lungimea de undă asociată electronului depinde de tensiunea de accelerare astfel:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{(2meU)^{1/2}} \quad (3.120)$$

Pentru a exprima lungimea de undă (măsurată în Ångstron) în funcție de tensiune (măsurată în volți) se utilizează formula:

$$\lambda = \frac{12,3}{U^{1/2}} \text{ Å} \quad (3.121)$$

Pentru $U = 1$ V, $\lambda = 12,3$ Å, pentru $U = 10$ V, $\lambda = 3,89$ Å, pentru $U = 100$ V, $\lambda = 1,23$ Å, pentru $U = 1000$ V, $\lambda = 0,39$ Å etc.

Lungimile de undă sunt comparabile cu cele ale razelor X, adică cu dimensiunile rețelelor cristaline. Rezultă că pentru a fi puse în evidență proprietățile ondulatorii ale electronilor trebuiesc realizate experimente de difracție pe cristale ca și în cazul razelor X.

Pentru verificarea ipotezei de Broglie au fost realizate două tipuri de experiențe de difracție: difracție pe monocristale și difracție pe pulberi.

3.5.1 Experimentul Davisson și Germer

În experiența lui Davisson - Germer s-a studiat reflexia electronilor pe fața unui monocristal. Instalația experimentală este prezentată în Fig. 3.16. Electronii proveniți dintr-un filament încălzit sunt accelerați la o diferență de potențial U astfel că la părăsirea tunului electronic au energia eU . Electronii sunt trimiși pe un cristal de nichel, iar cu ajutorul

Figura 3.16: Instalația experimentală în experimentul Davidson și Germer: 1. tun electronic, 2. monocristal de nichel, 3. detector (cilindru Faraday)

Figura 3.17: Împrăștierea unui fascicol de electroni pe două plane cristaline

detectorului (cilindru Faraday) este măsurat curentul determinat de electronii împrăștiați la un unghi θ față de direcția de incidență. Rezultatele obținute pentru electronii cu energia $E = 54$ eV arată că numărul de particule împrăștiate scade până la 35° apoi crește până la unghiul de împrăștiere 50° .

Pentru a explica aceste rezultate s-a considerat că electronii suferă o difracție pe rețeaua de plane cristaline a monocristalului aflate la distanța d unul de altul. Astfel, apariția unor maxime în fascicolul de electroni reflectat de monocristal este condiționată de îndeplinirea condiției Bragg (Fig. 3.17):

$$2d \sin \theta = n\lambda; \quad n = 1, 2, 3... \quad (3.122)$$

Pentru a pune în evidență maximele fascicolului reflectat se procedează în două moduri:

a) În prima metodă cristalul este bombardat cu un fascicol de electroni monoenergetici (care au toți aceeași lungime de undă λ). Se rotește cristalul și se observă că fascicolul reflectat prezintă maxime în intensitate numai pentru anumite unghiuri $\theta_1, \theta_2, \theta_3...$ care rezultă din formula Bragg.

b) În cea de a doua metodă se menține neschimbată direcția de incidență și se variază energia electronilor care ajung pe cristal (adică se variază lungimea de undă). Din relația (3.122) se obțin lungimile de undă pentru maximele de reflexie.

$$\lambda = \frac{1}{n} 2d \sin \theta \quad (3.123)$$

Dar:

$$\lambda = \frac{h}{(2meU)^{1/2}}$$

Atunci:

$$\frac{h}{(2meU)^{1/2}} = \frac{1}{n} 2d \sin \theta$$

sau:

$$U^{1/2} = \frac{nh}{(2me)^{1/2} d \sin \theta} = n \frac{ct}{\sin \theta} \quad (3.124)$$

Așa dar dacă se variază diferența de potențial de accelerare, când se măsoară intensitatea fascicolului reflectat se obțin o serie de maxime și minime (Fig.3.18). Intensitatea curentului măsurat de detector variază periodic cu rădăcina pătrată $U^{1/2}$, distanța dintre două maxime fiind egală cu $\frac{ct}{\sin \theta}$.

Figura 3.18: Intensitatea curentului măsurat de detector funcție de rădăcina pătrată a tensiunii de accelerare $U^{1/2}$ în experimentul Davidson și Germer.

3.5.2 Experimentul Thomson

Un alt tip de experiment este cel realizat de Thomson în care electronii sunt împrăștiați printr-o fantă subțire de material policristalin. Un fascicol de electroni monoenergetici este îndreptat către o foiță constituită din microcristale orientate haotic. După ce străbat această foiță electronii cad pe o placă fotografică. Din punct de vedere al fizicii clasice ar trebui să se obțină o placă voalată. Imaginea obținută constă dintr-o serie de cercuri concentrice. Cuantic, fenomenul are următoarea explicație:

Condiția de reflexie Bragg este satisfăcută pentru anumite orientări ale cristalelor, corespunzând unor unghiuri de incidență θ . Repartiția microcristalelor în plăcuță fiind haotică undele reflectate iau direcțiile generatoarelor unui con cu vârful în punctul în care fascicolul atinge cristalul (Fig.3.19).

$$\operatorname{tg} 2\theta = \frac{R}{L} \quad (3.125)$$

Considerând $L \gg R$ atunci $\operatorname{tg} 2\theta \simeq 2\theta$.

Punând condiția de difracție:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (3.126)$$

Deoarece unghiul θ este considerat foarte mic $\sin \theta \simeq \theta$ și din (3.126) și (3.125) rezultă:

Figura 3.19: Experimentul Thomson

$$2\theta = \frac{n\lambda}{d} = \frac{R}{L} \quad (3.127)$$

Atunci:

$$\frac{R}{\lambda} = \frac{nL}{d} \quad (3.128)$$

Ținând cont de expresia lungimii de undă în funcție de tensiunea de accelerare (3.120), din (3.128) se obține:

$$R\sqrt{U} = ct \quad (3.129)$$

Relația (3.129) poate fi foarte ușor verificată experimental; când tensiunea de accelerare crește, diametrele inelelor observate pe placa fotografică se micșorează.

Experimentele lui Thomson stau la baza construcției difractometrelor de electroni. Această metodă de difracție este preferabilă deoarece timpul de expunere pentru înregistrarea unei diagrame de difracție este scurt (de ordinul secundelor).

Capitolul 4

Mecanică cuantică

4.1 Unde și particule. Ideile fundamentale ale mecanicii cuantice

Newton a considerat că lumina are un caracter corpuscular și că este formată dintr-un jet de particule. În prima jumătate a secolului XIX a fost pus în evidență caracterul ondulatoriu al luminii, fapt ce a permis integrarea opticii în teoria electromagnetică. S-a arătat că viteza luminii depinde de constantele ε_0 și μ_0 , iar fenomenul de polarizare a fost interpretat ca o manifestare a caracterului vectorial și transversal al unde electromagnetice.

Din studiul radiației corpului negru, Planck a emis ipoteza cuantificării energiei, astfel că pentru o undă electromagnetică de frecvență ν singurele energii posibile sunt multipli de $h\nu$. Einstein a adoptat ipoteza că lumina este formată din corpusculi numiți fotoni care posedă energia $h\nu$. Astfel a fost explicat efectul fotoelectric și efectul Compton. Aceste rezultate conduc la concluzia că interacția unei unde electromagnetice cu materia se face prin procese elementare în care radiația pare a fi constituită din corpusculi.

4.1.1 Dualitatea undă-corpusul

Fenomenele tipice ondulatorii puse în evidență prin experiențele de interferență și difracție a electronilor sunt inexplicabile din punct de vedere corpuscular. Analizând binecunoscuta experiență Young vom ajunge la

Figura 4.1: Experimentul Young. I_1 este intensitatea luminoasă dată de fanta F_1 , I_2 este intensitatea luminoasă dată de fanta F_2 , iar I este intensitatea luminoasă dată de ambele fante

următoarea concluzie: interpretarea completă a fenomenului nu se poate obține considerând numai aspectul corpuscular sau numai aspectul ondulatoriu. Schema experienței este arătată în Fig.4.1.

Lumina emisă de sursa S cade pe fantele F_1 și F_2 după care lumina ajunge pe ecranul E . Dacă se obturează fanta F_2 pe ecran se obține o intensitate luminoasă $I_1(x)$. În același fel dacă se obturează fanta F_1 se obține intensitatea $I_2(x)$. Când fantele sunt deschise se observă pe ecran un sistem de franje de interferență. Se constată că intensitatea $I(x)$ nu corespunde sumei intensităților produse de F_1 și F_2 .

$$I(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \quad (4.1)$$

Din punct de vedere corpuscular se poate explica forma intensităților $I_1(x)$ și $I_2(x)$ prin interacția fotonilor cu marginile fantelor. Problema care se pune este aceea de a explica forma intensității $I(x)$ când ambele fante sunt deschise. O ipoteza ar să se considere interacția dintre fotonii ce trec prin fantele F_1 și F_2 . O astfel de ipoteză ne conduce la concluzia că dacă se diminuează intensitatea sursei S până ce pe ecran ajunge câte un singur foton, interacția dintre fotonii proveniți de la cele două fante dispare și deci ar trebui să dispară și figura de interferență.

Interpretarea rezultatului din punct de vedere al teoriei ondulatorii este simplă. Intensitatea luminoasă a unui punct pe ecran este proporțională cu pătratul modulului amplitudinii câmpului electric. Dacă

$E_1(x)$ și $E_2(x)$ reprezintă amplitudinile intensităților câmpului electric produs în punctul de coordonată x produs pe ecran de fantele F_1 și F_2 atunci:

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x) \quad (4.2)$$

Ținând cont de faptul că intensitatea luminoasă este proporțională cu modulul pătrat al amplitudinii câmpului electric rezultă:

$$I(x) \sim |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 \quad (4.3)$$

Cum $I_1(x) \sim |E_1(x)|^2$ și $I_2(x) \sim |E_2(x)|^2$ formula arată că $I(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$. Intensitatea $I(x)$ depinde de diferența de fază dintre E_1 și E_2 . Dacă se micșorează intensitatea sursei S , franjele de interferență obținute ar trebui să-și diminueze intensitatea.

Trebuie remarcat că dacă sursa S emite fotoni unul câte unul nici predicțiile teoriei ondulatorii, nici cele ale teoriei corpusculare nu sunt verificate în practică.

Astfel, în acest caz, dacă se acoperă ecranul cu o placă fotografică și se mărește suficient de mult timpul de expunere pentru a fi înregistrați un număr mare de fotoni, franjele de interferență nu dispar. Rezultatul experienței conduce la un paradox aparent care în cadrul teoriei corpusculare nu poate fi explicat. Deoarece interacția dintre fotoni este exclusă ei trebuie considerați în mod separat. Dar atunci nu se poate înțelege de ce fenomenele se schimbă când avem o singură fantă față de cazul când ambele sunt deschise. Astfel, interpretarea pur corpusculară a fenomenului nu poate explica apariția figurii de interferență.

Din contră, dacă placa fotografică este expusă un timp suficient de scurt atunci se constată că pe ea apar doar puncte de impact local. Acest lucru nu poate fi interpretat în cadrul unei teorii pur ondulatorii. Din punct de vedere corpuscular apariția punctelor de impact este datorată ciocnirii fotonilor cu placa fotografică.

Dacă înregistrarea punctelor de impact ale fotonilor cu placa fotografică este urmărită în timp se constată că acestea se repartizează într-o manieră aleatorie, iar când un număr suficient de mare de fotoni ajung pe ecran repartitia pare a avea un aspect continuu. Densitatea punctelor de impact poate fi legată de existența franjelor de interferență. Acolo unde densitatea punctelor de impact este mare se obțin maxime de interferență, iar acolo unde densitatea punctelor de impact este mică sau

chiar nulă se obțin minime de interferență. Putem spune că prin înregistrarea fotonilor pe ecran în timp, se reconstituie figura de interferență.

Trebuie remarcat că în cursul experimentului nu s-a încercat să se determine prin ce fantă trece fiecare foton ce ajunge pe ecran. Pentru a obține acest lucru vom plasa fotomultiplicatori în spatele fantelor F_1 și F_2 . Vom constata că dacă fotonii pleacă de la sursa S unul câte unul fiecare foton va atinge unul din detectori, adică un singur detector va da semnal. Evident detectorii vor absorbi fotonii care nu vor mai ajunge la ecran. Dacă unul din detectori este îndepărtat cel care va rămâne va înregistra un mare număr de fotoni. Pe ecran însă nu se va mai forma o figură de interferență deoarece una din fante este obturată.

Analiza precedentă arată că este imposibil de a explica fenomenele observate printr-o singură teorie fie corpusculară fie ondulatorie. Cele două aspecte par că se exclud reciproc. Pentru a surmonta dificultățile trebuie să revizuiem conceptele fizicii clasice și să admitem că experiența cotidiană nu mai este valabilă în domeniul microscopic. De exemplu una din caracteristicile esențiale a domeniului microscopic este aceea că efectuarea unei măsurători asupra unui sistem îl perturbă de o manieră fundamentală. În cazul domeniului macroscopic suntem obișnuiți cu ideea că putem face influența aparatului de măsură suficient de mică pentru a putea fi neglijată.

Dacă ne referim la experimentul anterior, un foton care trece printr-o fantă se comportă diferit dacă cealaltă fantă este închisă sau deschisă. În plus, dacă dorim să vedem pe unde trece un foton îl împiedicăm să ajungă la ecran. Putem spune că e imposibil să se observe figura de interferență și să stabilească în același timp prin ce fantă trece fotonul. Din acest motiv trebuie să renunțăm la ideea că fotonul trece printr-o fantă bine determinată. Pe de altă parte fotonii ce ajung pe ecran reconstituie în timp figura de difracție. Din acest motiv nu vom ști dinainte cu certitudine unde vor lovi fotonii ecranul.

Singurul lucru care poate fi spus este că un foton va atinge ecranul într-un punct cu o probabilitate care este proporțională cu intensitatea $I(x)$ adică proporțională cu $|E(x)|^2$. Aceasta duce la ideea că noțiunea de traiectorie nu are sens. În plus nu mai este valabilă nici ideea clasică conform căreia mișcarea unei particule este determinată de condițiile inițiale.

Putem introduce noțiunea de dualitate undă-corpusul:

1. Aspectele ondulatorii și corpusculare sunt inseparabile. În unele

cazuri avem o comportare ondulatorie, în altele corpusculară.

2. Previziunile asupra comportării unui foton se pot face numai probabilistic.

3. Informația asupra unui foton la momentul t este dată de unda $E(\vec{r}, t)$, soluție a ecuației Maxwell. Spunem că această undă caracterizează starea fotonului la momentul t . $E(\vec{r}, t)$ este interpretată ca o amplitudine de probabilitate pentru ca un foton să-și manifeste prezența în punctul \vec{r} la momentul t . Probabilitatea aceasta este proporțională cu $|E(\vec{r}, t)|^2$. Ecuațiile Maxwell fiind liniare și omogene principiul de superpoziție este valabil. Astfel, dacă \vec{E}_1 și \vec{E}_2 sunt cele două soluții ale ecuațiilor Maxwell atunci expresia

$$\vec{E} = \lambda_1 \vec{E}_1 + \lambda_2 \vec{E}_2 \quad (4.4)$$

unde λ_1 și λ_2 sunt constante este și ea soluție a acestor ecuații.

Ca o concluzie la cele discutate anterior trebuie să remarcăm că teoria permite doar calculul probabilității ca un eveniment să se producă.

Paralel cu descoperirea fotonilor, studiul spectrelor de emisie și absorbție ale atomilor pune în evidență un fapt pe care fizica clasică nu-l poate explica. Spectrele sunt formate din linii fine, adică atomii nu emit și nici nu absorb decât fotoni de frecvență bine determinată. Aceasta se explică considerând că energia este cuantificată. Bohr a formulat primele reguli de calcul ale cuantelor absorbite. În 1923 de Broglie a emis ipoteza că particulele materiale ca și fotonii pot avea un aspect ondulatoriu. Experimentele lui Davisson și Germer au venit să confirme aspectul ondulatoriu al materiei arătând că figurile de interferență se pot obține cu ajutorul electronilor. Pornind de la ipoteza lui de Broglie vom extinde asupra tuturor particulelor toate noțiunile introduse în cazul fotonilor.

4.1.2 Funcția de undă. Conceptul de stare

Având în vedere cele discutate mai sus putem trage următoarele concluzii:

1. Conceptul de traiectorie trebuie substituit cu cel de stare la momentul t . Starea cuantică a unui sistem este caracterizată de o funcție de stare $\Psi(\vec{r}, t)$ care conține toate informațiile posibile asupra particulei. Pentru o particulă mărimea $\Psi(\vec{r}, t)$ poartă numele și de funcție de undă.

2. $\Psi(\vec{r}, t)$ este interpretată ca o amplitudine de probabilitate de localizare. Remarcăm că $\Psi(\vec{r}, t)$ înlocuiește $\vec{E}(\vec{r}, t)$ din discuția anterioară. Astfel, probabilitatea ca o particulă dată să se găsească la momentul t într-un element de volum $dv = dx dy dz$ caracterizat de vectorul de poziție \vec{r} este proporțională cu elementul de volum dv și are valoarea $d\mathcal{P}(\vec{r}, t)$. Interpretând pe $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ca o densitate de probabilitate de localizare putem scrie:

$$d\mathcal{P}(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dv = P dv \quad (4.5)$$

Astfel, în experimentul prezentat cu ajutorul dispozitivului Young putem considera că Ψ_{F_1} este funcția de undă provenind din F_1 , Ψ_{F_2} este funcția de undă provenind din F_2 . Când ambele fante sunt deschise, funcția de undă este: $\Psi = \Psi_{F_1} + \Psi_{F_2}$, iar densitatea de probabilitate de localizare a fotonului este:

$$P \sim |\Psi_{F_1} + \Psi_{F_2}|^2 \quad (4.6)$$

În cazul că doar o singură fantă este deschisă densitățile de probabilitate de localizare sunt $P_1 \sim |\Psi_{F_1}|^2$ și $P_2 \sim |\Psi_{F_2}|^2$. Atunci:

$$P \neq P_1 + P_2 \quad (4.7)$$

Interpretarea dată modulului pătrat al funcției de stare conduce la concluzia că probabilitatea pentru a găsi particula în spațiu la momentul t este egală cu 1.

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dv = 1 \quad (4.8)$$

Relația 4.8 poartă numele de condiție de normare. Acest fapt impune anumite condiții care trebuie îndeplinite de $\Psi(\vec{r}, t)$:

- Funcția $\Psi(\vec{r}, t)$ trebuie să tindă la zero la distanțe mari.
- Funcția $\Psi(\vec{r}, t)$ nu trebuie să aibă singularități fiindcă integrala nu ar avea fără sens. Ea trebuie să fie o funcție continuă și derivabilă (să nu prezinte vârfuri).
- Funcția $\Psi(\vec{r}, t)$ trebuie să aibă o evoluție în timp astfel încât condiția de normare să fie îndeplinită la orice moment de timp.

Se poate remarca astfel diferența dintre modul de caracterizarea a stării clasice și a stării cuantice. Starea în cazul unei particule clasice este

caracterizată la momentul t de șase parametri: x, y, z, v_x, v_y, v_z . Starea cuantică a unei particule este determinată de o infinitate de parametri: valorile în diverse puncte a funcției $\Psi(\vec{r}, t)$. Noțiunii clasice de traiectorie îi este substituită noțiunea de funcție de undă. Existența acestei funcții de undă este expresia proprietăților ondulatorii. Spre deosebire de undele clasice (sonore de exemplu), funcția de undă este o mărime abstractă a cărei interpretare este de natură statistică.

Înainte de a discuta mai în detaliu despre conceptul cuantic de stare vom revedea încă o dată principalele caracteristici ale stării unei particule clasice:

1. Starea particulei la un moment dat este caracterizată de șase parametri așa cum am precizat mai înainte (trei de poziție și trei de viteză). Din cunoașterea stării rezultă toate proprietățile particulei (energie, impuls etc.).

2. Starea poate fi aflată prin măsurători simultane asupra poziției și impulsului.

3. Influența aparatelor de măsură poate fi făcută să fie extrem de mică, astfel încât o măsurătoare să nu influențeze starea particulei.

4. Variabilele de poziție și impuls pot fi înlocuite cu alte șase variabile (evident ca provenind din acestea).

5. Cunoașterea stării la un moment dat și a factorilor externi ce acționează asupra particulei determină cunoașterea în mod univoc a evoluției sale în timp.

Pentru a înțelege mai bine noțiunea de stare vom descrie în continuare încă două experimente.

Primul dintre ele se referă la difracția particulelor pe o fantă. Să considerăm că un flux de particule trece printr-o fantă extrem de îngustă pentru a putea fi pus în evidență caracterul ondulatoriu al particulelor. Deși o astfel de experiență nu a fost efectiv realizată, se poate prevedea rezultatul care se obține pe baza cunoașterii comportării microparticulelor în alte situații. S-a efectuat totuși un experiment cu electroni care este analogul celui de interferență cu biprisma Fresnel. Un fir metalic foarte subțire încărcat pozitiv este pus în fața unui fascicol de electroni care îl deviază din drumul lor. Pe un ecran sau pe o placă fotografică se obține o figură analoagă cu cea dată de lumina care străbate o biprismă Fresnel.

După trecerea prin fantă particulele ajung pe ecranul E (Fig.4.2). Pe acest ecran se obține o figură de difracție similară cu cea obținută în

Figura 4.2: Difracția unui fascicol de particule pe o fantă

cazul trecerii luminii (care poate fi considerată ca fiind formată dintr-un flux de fotoni).

Deoarece particulele trec prin fantă poziția acestora în momentul trecerii este cunoscută cu o precizie egală cu $\Delta y \simeq d$ unde d este deschiderea fantei. Pe ecran se constată că majoritatea particulelor sunt deviate în interiorul unghiului θ . Din teoria difracției se știe că:

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{d}$$

Pentru particulele materiale, conform ipotezei lui de Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (4.9)$$

O deviație $\theta \neq 0$ după trecerea particulei prin fantă implică faptul că $p_y \neq 0$. Intervalul în care poate varia componenta p_y corespunde devierii în cazul deschiderii θ și este dat de:

$$\Delta p_y \simeq p \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \sin \theta \quad (4.10)$$

Astfel se observă că:

$$\Delta y \Delta p_y = d \frac{h}{\lambda} \sin \theta \simeq h \quad (4.11)$$

Relația dintre nedeterminările Δy și Δp_y arată că poziția și impulsul particulelor nu pot fi măsurate simultan. Relația poartă numele de

relația de nedeterminare a lui Heisenberg. Cu cât deschiderea fantei este mai mică cu atât incertitudinea în determinarea impulsului este mai mare. Pentru a micșora incertitudinea în determinarea impulsului trebuie lărgită fanta. Aceasta însă implică o creștere în nedeterminarea poziției.

Trebuie remarcat că înainte de trecerea particulei prin fantă $p_y = 0$. După trecere, adică după localizarea particulei, particula dobândește un impuls paralel cu ecranul. Aceasta înseamnă că procesul de măsurare (în acest caz al poziției), afectează proprietățile microsistemului.

4.1.3 Principiul descompunerii spectrale

Vom considera o altă experiență simplă de optică în care intervine polarizarea luminii. Aceasta permite introducerea unor concepte fundamentale cu privire la măsurarea mărimilor fizice. O undă monocromatică plană a cărei direcție de polarizare este descrisă de vectorul unitar \vec{e}_p este trimisă pe un analizor (polarizor). Oz desemnează direcția de propagare a acestei unde. Analizorul transmite unda dacă este polarizată paralel cu axa Ox și o absoarbe dacă este polarizată paralel cu axa Oy (Fig. 4.3). Interpretarea clasică a acestei experiențe (descriere valabilă pentru unde luminoase) este următoarea: Unda polarizată este caracterizată de un câmp electric sub forma:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0 \vec{e}_p \exp [i(kz - \omega t)] \quad (4.12)$$

unde E_0 este amplitudinea, intensitatea luminoasă I fiind proporțională cu $|E_0|^2$. După trecerea prin analizorul A , se obține o undă polarizată după axa Ox:

$$\vec{E}'(\vec{r}, t) = E'_0 \vec{e}_x \exp [i(kz - \omega t)] \quad (4.13)$$

a cărei intensitate I' este proporțională cu $|E'_0|^2$ și este dată de legea lui Malus:

$$I' = I \cos^2 \theta \quad (4.14)$$

Să considerăm că facem ca intensitatea I să devină suficient de mică pentru ca fotonii să ajungă unul câte unul pe analizor (Plasăm detectorul după analizor). Nu vom înregistra o "fracție de fotoni": fotonul

Figura 4.3: Undă luminoasă care trece printr-un analizor (polarizor).

fie trece prin analizor fie este absorbit în totalitate. Nu putem preciza cu certitudine dacă fotonul ce ajunge pe analizor va fi absorbit sau va trece; nu putem cunoaște decât probabilitatea corespunzătoare ca el să fie absorbit sau lăsat să treacă.

Dacă pe analizor cade un număr mare N de fotoni, detectorul va înregistra un număr $N \cos^2 \theta$ de fotoni. Astfel, probabilitatea ca fotonul să treacă de analizor este egală cu $\cos^2 \theta$, iar probabilitatea ca fotonul să nu treacă de analizor este $1 - \cos^2 \theta = \sin^2 \theta$. Rezultă că:

1. Aparatul de măsură nu poate furniza decât anumite rezultate privilegiate pe care le vom numi *rezultate proprii*. Din experiența de mai sus rezultă că nu există decât două rezultate posibile: fotonul trece prin analizor sau este absorbit. Spunem că există o cuantificare a rezultatului de măsură în contradicție cu formula clasică în care I' poate varia continuu, când θ variază.

2. Fiecare rezultat corespunde unei stări particulare a sistemului, care face parte dintr-o mulțime de stări numite stări proprii. În cazul de mai sus există două stări proprii caracterizate prin vectorii de polarizare:

$$\begin{aligned}\vec{e}_p &= \vec{e}_x \\ \vec{e}_p &= \vec{e}_y\end{aligned}$$

Dacă $\vec{e}_p = \vec{e}_x$ avem certitudinea că fotonul va trece prin analizor; Dacă $\vec{e}_p = \vec{e}_y$ fotonul este absorbit.

Correspondența între rezultatele proprii și starea proprie este următoarea: dacă sistemul se găsește înainte de măsurare într-o stare proprie, rezultatul măsurătorii este determinat cu o probabilitate egală cu 1.

3. Dacă starea dinainte de măsurătoare este oarecare, nu putem prezice decât probabilitatea de obținere a rezultatelor proprii. Pentru a găsi această probabilitate descompunem starea sistemului (în cazul nostru starea fotonului) într-o combinație liniară a diverselor stări proprii. Astfel:

$$\vec{e}_p = \vec{e}_x \cos \theta + \vec{e}_y \sin \theta \quad (4.15)$$

Așa cum am discutat mai înainte $\cos^2 \theta$ reprezintă probabilitatea ca fotonul să treacă prin analizor iar $\sin^2 \theta$ reprezintă probabilitatea ca fotonul să fie absorbit ($\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$). Rezultă că probabilitatea de a obține un rezultat propriu este proporțională cu pătratul modului coeficientului atașat vectorului stării proprii corespunzătoare.

Această regulă poartă numele de principiul de descompunere spectrală.

Trebuie remarcat că descompunerea depinde de tipul aparatului de măsură deoarece se face utilizând starea proprie ce-i corespunde. În Fig.4.3 ambele axe Ox și Oy sunt fixate de analizor.

4. După trecerea prin analizor lumina este complet polarizată având vectorul de polarizare \vec{e}_x . Dacă dispunem după primul analizor un altul, A' având aceeași axă optică, toți fotonii ce trec prin analizorul A , vor trece prin A' . Aceasta se datorează faptului că după ce traversează analizorul A fotonul este într-o stare proprie caracterizată de vectorul de polarizare \vec{e}_x . Există o schimbare bruscă a stării particulei: după măsurare starea este definită prin vectorul $\vec{E}(\vec{r}, t)$ colinear cu vectorul \vec{e}_x . Astfel măsurarea perturbă sistemul microscopic într-un mod fundamental.

Principiul de descompunere spectrală se aplică și în cazul măsurării unei mărimi fizice oarecare A . Rezultatele formează un ansamblu de date proprii pe care-l notăm cu $\{a\}$. Fiecărui rezultat propriu îi este asociată o stare proprie caracterizată de o funcție proprie $\Psi_a(\vec{r})$.

Pentru o funcție de stare $\Psi(\vec{r}, t)$ probabilitatea \mathcal{P}_a de a obține la momentul t prin măsurare valoarea proprie a , se obține descompunând $\Psi(\vec{r}, t)$ după $\Psi_a(\vec{r})$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_a c_a \Psi_a(\vec{r}) \quad (4.16)$$

Generalizând cele discutate anterior rezultă:

$$\mathcal{P}_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2} \quad (4.17)$$

Pentru un sistem fizic există o serie de mărimi ce pot fi măsurate; ele poartă numele de observabile. Ele sunt mărimi ce apar și în cazul clasic și care sunt măsurate folosind aparate macroscopice. Starea sistemului se modifică în timpul măsurătorii. Răspunsul obținut la măsurarea unei variabile nu este univoc deoarece sistemul ascultă de legi statistice care sunt determinate de condițiile experienței.

Există mărimi pentru care găsim orice valoare posibilă (poziție, impuls) iar pentru altele (de exemplu energia unui electron într-un atom) numai anumite valori. Observabilele pentru care la măsurare obținem orice valoare posibilă poartă numele de măsurabile necuantificabile. Observabilele care la măsurare dau doar valori discrete poartă numele de mărimi cuantificabile.

În cazul clasic din cunoașterea poziției și impulsului rezultă cunoașterea tuturor celorlalte observabile. În cazul cuantic cunoașterea simultană a poziției și impulsului acestor mărimi nu e posibilă și de aceea nu rezultă și cunoașterea celorlalte observabile. Din acest motiv pentru a cunoaște starea sistemului trebuie cunoscută statistica tuturor observabilelor.

4.2 Aparatul matematic al mecanicii cuantice

4.2.1 Spațiul funcțiilor de undă

Structura spațiului funcțiilor de undă Interpretarea probabilistică a funcției de undă $\Psi(\vec{r}, t)$ a unei particule a fost dată în secțiunea precedentă. $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dv$ reprezintă probabilitatea ca la momentul t particula să se găsească în volumul dv centrat pe punctul determinat de vectorul de poziție \vec{r} . Probabilitatea de a găsi particula în tot spațiul impune condiția:

$$\iiint |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dv = 1 \quad (4.18)$$

Ansamblul funcțiilor de undă este inclus în clasa de funcții de modul pătrat integrabil. Aceste funcții trebuie să îndeplinească în plus și așa numitele condiții care rezultă din interpretarea funcției de undă. Astfel:

a) condiția de normare se poate realiza numai dacă funcția de undă este finită în tot spațiul, adică dacă este mărginită. Ea trebuie să tindă la zero atunci când $|\vec{r}| \rightarrow \infty$.

b) deoarece particula din punct de vedere fizic se poate afla într-un singur loc la un moment dat este necesar ca funcția de undă să fie o funcție univocă de \vec{r} .

c) funcțiile de undă trebuie să fie continue și derivabile, deoarece nu pot exista discontinuități în probabilitatea de a găsi particula într-un punct, iar variația acestora trebuie să fie lină.

d) deoarece semnificație fizică are doar pătratul modulului, funcțiile de undă sunt definite până la un factor de fază $\exp i\varphi$.

Vom nota cu \mathcal{F} ansamblul funcțiilor de undă.

În cazul general al unor sisteme complexe formate nu neapărat dintr-o particulă starea este caracterizată de o funcție de stare sau vector de stare (noțiune ce generalizează noțiunea de funcție de undă). Funcția de stare aparține unui spațiu abstract \mathcal{E} numit spațiul stărilor, care este de fapt un subspațiu Hilbert.

În continuare ne vom axa asupra studiului funcțiilor de undă Ψ din spațiul \mathcal{F} , multe din proprietățile obținute pentru acestea putându-se generaliza pentru funcțiile de stare.

Se demonstrează că \mathcal{F} satisface proprietățile unui spațiu vectorial.

Se definește pe această mulțime operația de adunare a două funcții de undă care stabilește că pentru orice două funcții de undă Ψ_1 și Ψ_2 , există suma $\Psi_1 + \Psi_2$, fiind îndeplinite proprietățile:

a) comutativitate:

$$\Psi_1 + \Psi_2 = \Psi_2 + \Psi_1$$

b) asociativitate:

$$(\Psi_1 + \Psi_2) + \Psi_3 = \Psi_1 + (\Psi_2 + \Psi_3)$$

c) există element neutru 0:

$$\Psi + 0 = \Psi$$

d) există element invers $-\Psi$, pentru fiecare funcție Ψ :

$$\Psi + (-\Psi) = 0$$

Se definește înmulțirea cu un scalar (care în general este un număr complex) și care stabilește că oricărei funcții de stare Ψ și oricărui scalar λ îi corespunde o altă funcție $\lambda\Psi$ cu proprietățile:

a) asociativitate:

$$(\lambda_1\lambda_2)\Psi = \lambda_1(\lambda_2\Psi)$$

b) prezența elementul unitate:

$$1\Psi = \Psi$$

c) distributivitatea în raport cu adunarea scalarilor:

$$(\lambda_1 + \lambda_2)\Psi = \lambda_1\Psi + \lambda_2\Psi$$

d) distributivitatea în raport cu adunarea funcțiilor de undă.

$$\lambda(\Psi_1 + \Psi_2) = \lambda\Psi_1 + \lambda\Psi_2$$

Produs scalar

Definiție Într-un spațiu vectorial tuturor perechilor de două elemente φ și Ψ luate în această ordine li se poate asocia un număr complex numit produs scalar:

$$(\varphi, \Psi) = \iiint \varphi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) dv \quad (4.19)$$

Proprietățile produsului scalar rezultă din definiția de mai sus:

$$(\varphi, \Psi) = (\Psi, \varphi)^* \quad (4.20)$$

Produsul scalar este liniar în al doilea termen:

$$(\varphi, \lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2) = \lambda_1(\varphi, \Psi_1) + \lambda_2(\varphi, \Psi_2) \quad (4.21)$$

Produsul scalar este antiliniar în primul termen:

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \Psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \Psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \Psi) \quad (4.22)$$

Definiție Funcțiile $\varphi(\vec{r})$ și $\Psi(\vec{r})$ sunt ortogonale dacă produsul lor scalar este nul $(\varphi, \Psi) = 0$

Definiție Mărimea $\sqrt{(\Psi, \Psi)}$ poartă numele de normă și se notează cu $\|\Psi\|$.

Din definiția produsului scalar rezultă că:

$$\sqrt{(\Psi, \Psi)} \geq 0$$

Egalitatea cu 0 are loc atunci când $\Psi = 0$.

Baza ortonormată în \mathcal{F}

Definiție Fie un ansamblu de funcții din \mathcal{F} , $u_i(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ reprezentat de un indice i ($i=1,2,\dots$). Ansamblul $\{u_i(\vec{r})\}$ este ortonormat dacă:

$$(u_i, u_j) = \int_{\infty} u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) dv = \delta_{ij} \quad (4.23)$$

unde δ_{ij} este simbolul lui Kronneker:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{pentru } i = j \\ 0, & \text{pentru } i \neq j \end{cases} \quad (4.24)$$

Definiție Sistemul de funcții ortonormat $\{u_i(\vec{r})\}$ este complet dacă singura funcție ortogonală pe sistemul ortonormat este funcția nulă.

Atunci, orice funcție de undă $\Psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ se poate descompune în mod unic după ansamblul de funcții $\{u_i(\vec{r})\}$:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \quad (4.25)$$

unde coeficienții c_i sunt numere complexe.

Un astfel de sistem poartă numele de bază ortonormată. Dacă sistemul complet de funcții ortonormate este format dintr-un număr infinit de funcții spunem că spațiul vectorial corespunzător este infinit dimensional.

Componentele unei funcții de undă în baza $\{u_i(\vec{r})\}$

Înmulțim relația 4.25 cu $u_j^*(\vec{r})$ și integrăm pe tot spațiu. Rezultă:

$$(u_j, \Psi) = \left(u_j, \sum_i c_i u_i \right) = \sum_i c_i (u_j, u_i) = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j \quad (4.26)$$

adică:

$$c_j = (u_j, \Psi) = \iiint u_j^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) dv \quad (4.27)$$

Spunem că ansamblul numerelor c_i reprezintă funcția $\Psi(\vec{r})$ în baza $\{u_i(\vec{r})\}$.

Expresia produsului scalar în funcție de componente

Fie $\varphi(\vec{r})$ și $\Psi(\vec{r})$ două funcții de undă care se pot dezvolta după funcțiile u_i astfel:

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r}) \quad (4.28)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r}) \quad (4.29)$$

Produsul celor două funcții de undă este:

$$(\varphi, \Psi) = \left(\sum_i b_i u_i, \sum_j c_j u_j \right) = \sum_{i,j} b_i^* c_j (u_i, u_j) = \sum_{i,j} b_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i \quad (4.30)$$

În particular norma funcției de undă este:

$$\|\Psi\| = (\Psi, \Psi) = \sum_i |c_i|^2 \quad (4.31)$$

Funcția Dirac

Definiție Funcția $\delta(x)$ a fost introdusă de Dirac în anul 1930 și reprezintă mai degrabă o trecere la limită. Pentru a înțelege funcția $\delta(x)$ vom considera funcția $\delta_\alpha(x)$ (Fig. 4.4) definită prin :

$$\delta_\alpha(x) = \begin{cases} 1/\alpha, & \text{pentru } -\frac{\alpha}{2} < x < \frac{\alpha}{2} \\ 0, & \text{pentru } |x| > \frac{\alpha}{2} \end{cases} \quad (4.32)$$

unde α este un număr pozitiv.

Calculăm integrala

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\alpha(x) f(x) dx$$

unde $f(x)$ este funcția definită într-un interval care-l conține pe $x = 0$. Dacă α este suficient de mic, variația funcției $f(x)$ pe intervalul de

Figura 4.4: Funcția $\delta_\alpha(x)$

integrare $[-\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}]$ este neglijabilă și $f(x)$ rămâne practic egală cu $f(0)$, astfel că:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\alpha(x) f(x) dx \simeq f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\alpha(x) dx = f(0) \quad (4.33)$$

Aproximația de mai sus este cu atât mai bună cu cât α este mai mic. Treceam la limită în (4.33) făcând $\alpha \rightarrow 0$ și definim funcția $\delta(x)$ prin relația:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (4.34)$$

Generalizând se poate defini $\delta(x - x_0)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0) \quad (4.35)$$

Proprietăți

Din cele discutate mai sus se pot sintetiza proprietățile funcției $\delta(x)$:

- a) $\delta(x) = 0$ pentru $x \neq 0$
- b) $\delta(0)$ are o valoare nemărginit de mare
- c) $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$
- d) Punând în (4.35) $f(x) \equiv 1$ rezultă:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) dx = 1 \quad (4.36)$$

$$\text{e) } \delta(-x) = \delta(x)$$

$$\text{f) } \delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$$

$$\text{g) } x\delta(x) = 0$$

Proprietățile enunțate la punctele e) , f) , g) se demonstrează prin multiplicarea ambilor termeni ai egalității printr-o funcție $f(x)$, după care se integrează; rezultă că rezultatele obținute sunt egale.

Teoremă *Orice sistem ortonormat complet de funcții (o bază ortonormată) generează o funcție $\delta(x)$.*

Fie $\{u_n(x)\}$ un sistem de funcții ce formează o bază ortonormată în spațiul funcțiilor de undă \mathcal{F} .

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x) u_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (4.37)$$

Deoarece o funcție de undă se poate exprima în funcție de componentele sistemului ortonormat:

$$\Psi(x') = \sum c_i u_i(x') \quad (4.38)$$

unde:

$$c_i = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i^*(x) \Psi(x) dx \quad (4.39)$$

Înlocuind (4.39) în (4.38):

$$\Psi(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\sum_i u_i^*(x) u_i(x') \right] \Psi(x) dx \quad (4.40)$$

rezultă că:

$$\sum_i u_i^*(x) u_i(x') = \delta(x - x') \quad (4.41)$$

Baze ortonormate continue

Definiție *Numim bază ortonormată continuă ansamblul de funcții $\{w_\alpha(\vec{r})\}$ descris prin parametrul α care variază continuu satisfăcând relațiile:*

$$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \iiint w_\alpha^*(\vec{r}) w_{\alpha'}(\vec{r}) dv = \delta(\alpha - \alpha') \quad (4.42)$$

$$\int w_{\alpha}^{*}(\vec{r}) w_{\alpha}(\vec{r}') d\alpha = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.43)$$

Proprietatea definită prin relația (4.42) este cea de ortonormare iar proprietatea definită prin relația (4.43) este cea de completitudine. Pentru funcțiile de undă definite pe axa Ox

$$\int_{-\infty}^{+\infty} w_{\alpha}^{*}(x) w_{\alpha}(x') d\alpha = \delta(x - x') \quad (4.44)$$

Menționăm cazul particular important în care sistemul complet de funcții îl constituie mulțimea funcțiilor Fourier:

$$f_k(x) = \frac{\exp(ikx)}{\sqrt{2\pi}} \quad (4.45)$$

Relația (4.44) se scrie în acest caz:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[ik(x - x')] dk = \delta(x - x') \quad (4.46)$$

Funcția δ definită în spațiul tridimensional Ea se notează simplu $\delta(\vec{r})$ și este definită printr-o relație analoagă relației (4.34):

$$\iiint \delta(\vec{r}) f(\vec{r}) dv = f(0) \quad (4.47)$$

Mai general:

$$\iiint f(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) dv = f(\vec{r}_0) \quad (4.48)$$

Ea se poate descompune în:

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (4.49)$$

Descompunerea în componente

Punem:

$$\Psi(\vec{r}) = \int \Psi(\vec{r}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}) dv' \quad (4.50)$$

Considerăm că $\delta(\vec{r}' - \vec{r})$ este exprimată de (4.43). Se obține:

$$\Psi(\vec{r}) = \iiint \Psi(\vec{r}') \left[\int w_{\alpha}^{*}(\vec{r}') w_{\alpha}(\vec{r}) d\alpha \right] dv' \quad (4.51)$$

Deoarece:

$$\Psi(\vec{r}) = \int c(\alpha) w_{\alpha}(\vec{r}) d\alpha \quad (4.52)$$

prin comparare cu relația (4.51) se obține:

$$c(\alpha) = \iiint w_{\alpha}^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') dv' \quad (4.53)$$

Expresia unui produs scalar în funcție de componente Fie două funcții de undă care sunt descompuse în baza ortonormată $w_{\alpha}(\vec{r})$:

$$\varphi(\vec{r}) = \int b(\alpha) w_{\alpha}(\vec{r}) d\alpha \quad (4.54)$$

$$\Psi(\vec{r}) = \int c(\alpha') w_{\alpha'}(\vec{r}) d\alpha' \quad (4.55)$$

Produsul lor scalar este:

$$(\varphi, \Psi) = \iiint \varphi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) dv$$

$$(\varphi, \Psi) = \iiint \left[\int b(\alpha) w_{\alpha}(\vec{r}) d\alpha \right] \left[\int c(\alpha') w_{\alpha'}(\vec{r}) d\alpha' \right] dv$$

$$(\varphi, \Psi) = \int \left\{ \left[\int b^*(\alpha) c(\alpha') d\alpha' \right] \left[\iiint w_{\alpha}(\vec{r}) w_{\alpha'}(\vec{r}) dv \right] \right\} d\alpha$$

Ultima integrală este:

$$\int w_{\alpha}(\vec{r}) w_{\alpha'}(\vec{r}) dv = \delta(\alpha - \alpha') \quad (4.56)$$

și astfel:

$$(\varphi, \Psi) = \int b^*(\alpha) c(\alpha) d\alpha \quad (4.57)$$

În particular:

$$(\Psi, \Psi) = \int |c(\alpha)|^2 d\alpha \quad (4.58)$$

4.2.2 Operatori

Definiție și proprietăți

Un operator dintr-un spațiu vectorial pune în corespondență un vector al spațiului cu un alt vector al spațiului.

$$\varphi \rightarrow \chi$$

$$\chi = A\varphi \quad (4.59)$$

Definiție Spunem că operatorul A este liniar dacă pentru orice numere complexe c_1 și c_2 :

$$A(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1A\varphi_1 + c_2A\varphi_2 \quad (4.60)$$

Într-un spațiu vectorial pot fi definiți operatorii:

a) operatorul unitate I :

$$I\varphi = \varphi \quad (4.61)$$

b) operatorul nul 0 :

$$0\varphi = 0 \quad (4.62)$$

Un operator liniar transformă vectorul nul în vector nul:

$$A0 = 0 \quad (4.63)$$

Operații cu operatori

Putem defini următoarele operații cu operatori:

a) Suma a doi operatori $C = A + B$

$$C\varphi = A\varphi + B\varphi \quad (4.64)$$

b) Înmulțirea unui operator cu un scalar (număr complex) λ , $C = \lambda A$

$$C\varphi = \lambda A\varphi = \lambda(A\varphi) \quad (4.65)$$

c) Înmulțirea a doi operatori $C = AB$

$$C(\varphi) = A(B\varphi) \quad (4.66)$$

Ordinea factorilor într-un produs de operatori este importantă. În general $AB \neq BA$.

Definiție *Comutatorul a doi operatori este:*

$$C = [A, B] = AB - BA \quad (4.67)$$

Proprietățile comutatorului:

$$[A, B] = -[B, A] \quad (4.68)$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C] \quad (4.69)$$

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \quad (4.70)$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (4.71)$$

Aceste proprietăți se demonstrează pornind direct de la definiția comutatorului.

Definiție *Un operator A este nesingular dacă există un alt operator B cu proprietatea că:*

$$AB = BA = I \quad (4.72)$$

Operatorul B se numește inversul operatorului A și se notează cu A^{-1} . Rezultă imediat că:

$$(A^{-1})^{-1} = A \quad (4.73)$$

Dacă operatorul A^{-1} nu există, operatorul A este singular.

Definiție *Operatorul A^+ este operatorul adjunct al unui operator A dacă:*

$$(\varphi, A\Psi) = (A^+\varphi, \Psi)$$

Teoremă *Operatorul adjunct al unui operator liniar este tot un operator liniar.*

Fie un operator liniar A și operatorul său adjunct A^+ . Notăm cu:

$$\begin{aligned} \chi_1 &= A^+\varphi_1 \\ \chi_2 &= A^+\varphi_2 \end{aligned}$$

care sunt definite de relațiile:

$$(\varphi_1, A\Psi) = (A^+\varphi_1, \Psi) = (\chi_1, \Psi)$$

$$(\varphi_2, A\Psi) = (A^+\varphi_2, \Psi) = (\chi_2, \Psi)$$

Notăm cu: $\varphi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$. Atunci:

$$(A^+\varphi, \Psi) = (\varphi, A\Psi) = (c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2, A\Psi) = c_1^*(\varphi_1, A\Psi) + c_2^*(\varphi_2, A\Psi)$$

$$(A^+\varphi, \Psi) = c_1^*(A^+\varphi_1, \Psi) + c_2^*(A^+\varphi_2, \Psi) = (c_1A^+\varphi_1, \Psi) + (c_2A^+\varphi_2, \Psi)$$

$$(A^+\varphi, \Psi) = (c_1A^+\varphi_1 + c_2A^+\varphi_2, \Psi)$$

Rezultă:

$$A^+\varphi = c_1A^+\varphi_1 + c_2A^+\varphi_2$$

Proprietăți ale operatorilor adjuncți

$$\begin{aligned} (A + B)^+ &= A^+ + B^+ \\ (\lambda A)^+ &= \lambda^* A^+ \\ (AB)^+ &= B^+ A^+ \end{aligned}$$

Aceste proprietăți se demonstrează pornind direct de la definiția operatorului adjuncț.

Definiție Operatorul A se numește hermitic sau autoadjuncț dacă $A = A^+$.

$$(\varphi, A\Psi) = (A\varphi, \Psi) = (A\Psi, \varphi)^* \quad (4.74)$$

Reprezentarea unui operator

Fiind dat un operator liniar și o bază $u_i(\vec{r})$ îi asociem o serie de numere

$$A_{ij} = (u_i, Au_j) \quad (4.75)$$

În cazul unei baze continue $w_\alpha(\vec{r})$ avem:

$$A_{\alpha\alpha'} = \iiint w_\alpha(\vec{r}) Aw_{\alpha'}(\vec{r}) dv \quad (4.76)$$

Numerele astfel definite sunt elementele unei matrice pătrate având o mulțime infinită de linii și coloane. Aceste numere caracterizează complet operatorul respectiv.

4.2.3 Ecuația cu valori și vectori proprii pentru un operator

Vectori proprii

Definiție Spunem că Ψ este un vector propriu operatorului liniar A dacă:

$$A\Psi = \lambda\Psi \quad (4.77)$$

unde λ este un număr complex.

Ecuația de mai sus poartă numele de ecuația cu valori proprii a operatorului liniar A . Această ecuație are în general soluții doar pentru anumite valori ale lui λ , numite valori proprii ale operatorului A .

Observăm că dacă Ψ este un vector propriu al lui A cu valoarea proprie λ , $\alpha\Psi$ unde α poate fi și un număr complex este și ea valoare proprie a lui A .

$$A(\alpha\Psi) = \alpha A\Psi = \alpha\lambda\Psi = \lambda(\alpha\Psi) \quad (4.78)$$

Valoarea proprie λ se numește nedegenerată dacă îi corespunde un vector propriu determinat până la un factor multiplicativ.

Dacă există mai mulți vectori proprii liniari independenți ai lui A pentru aceeași valoare proprie, spunem despre aceasta că este degenerată; ordinul sau gradul de degenerare este egal cu numărul de vectori proprii liniari independenți care-i sunt asociați.

Dacă λ are gradul de degenerare g , lui îi corespund g vectori proprii independenți $\Psi^{(i)}$:

$$A\Psi^{(i)} = \lambda\Psi^{(i)} \quad (4.79)$$

Atunci toți vectorii de forma:

$$\Psi = \sum_{i=1}^g c_i \Psi^{(i)} \quad (4.80)$$

sunt vectori proprii ai lui A :

$$A\Psi = \sum_{i=1}^g c_i A\Psi^{(i)} = \lambda \sum_{i=1}^g c_i \Psi^{(i)} = \lambda\Psi \quad (4.81)$$

În consecință, ansamblul vectorilor proprii ai lui A constituie un spațiu vectorial de dimensiune g (care poate fi și infinit) numit subspațiul propriu al valorii proprii λ .

Determinarea valorilor și vectorilor proprii

Vom face raționamentele într-un spațiu N dimensional și vom presupune că rezultatele obținute sunt adevărate și într-un spațiu infinit dimensional. Fie $\{u_i\}$ o bază în spațiul considerat.

Să considerăm ecuația cu vectori și valori proprii:

$$A\Psi = \lambda\Psi \quad (4.82)$$

Scriem Ψ în funcție de vectorii de bază:

$$\Psi = \sum_{i=1}^N c_i u_i \quad (4.83)$$

Se înlocuiește (4.83) în (4.82):

$$\begin{aligned} A \sum_{i=1}^N c_i u_i &= \lambda \sum_{i=1}^N c_i u_i \\ c_i \sum_{i=1}^N A u_i &= \lambda \sum_{i=1}^N c_i u_i \end{aligned}$$

Atunci:

$$\begin{aligned}
 c_i \sum_{i=1}^N (u_j, Au_i) &= \lambda \sum_{i=1}^N (u_j, c_i u_i) \\
 c_i \sum_{i=1}^N A_{ji} &= \lambda \sum_{i=1}^N c_i \delta_{ji} \\
 \sum_{i=1}^N (c_i A_{ji} - c_i \lambda \delta_{ji}) &= 0 \\
 \sum_{i=1}^N c_i (A_{ji} - \lambda \delta_{ji}) &= 0 \tag{4.84}
 \end{aligned}$$

În (4.84) $j = 1, 2, 3, \dots, N$

Atunci relațiile (4.84) formează un sistem omogen de N ecuații algebrice cu N necunoscute c_i ($i = 1, 2, \dots, N$). Pentru ca sistemul să admită o altă soluție decât soluția banală este necesar ca determinantul coeficienților săi să fie nul:

$$\Delta |A_{ji} - \lambda \delta_{ji}| = 0 \tag{4.85}$$

Ecuația de mai sus este numită ecuație caracteristică și permite determinarea tuturor valorilor proprii operatorului A . Putem explicita ecuația sub forma:

$$\begin{vmatrix}
 A_{11} - \lambda & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1N} \\
 A_{21} & A_{22} - \lambda & A_{23} & \dots & A_{2N} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} & \dots & A_{NN} - \lambda
 \end{vmatrix} = 0 \tag{4.86}$$

Această ecuație este de gradul N în λ și va avea N rădăcini reale sau imaginare, distincte sau confundate. Se poate demonstra că valorile proprii nu depind de baza aleasă în spațiul cu N dimensiuni.

Teoremă *Valorile proprii unui operator hermitic sunt reale.*

Considerând ecuația (4.82) cu vectori și valori proprii putem scrie:

$$(\Psi, A\Psi) = (\Psi, \lambda\Psi) = \lambda(\Psi, \Psi)$$

$$(\Psi, A\Psi) = (A^+\Psi, \Psi) = (\Psi, A^+\Psi)^* = (\Psi, A\Psi)^*$$

adică $(\Psi, A\Psi)$ este un număr real. Deoarece (Ψ, Ψ) este un număr real din relațiile de mai sus rezultă:

$$\lambda = \frac{(\Psi, A\Psi)}{(\Psi, \Psi)}$$

astfel că λ este un număr real.

Teoremă *Vectorii proprii ai unui operator hermitic, corespunzătorilor unor valori proprii diferite sunt ortogonali.*

Fie λ_1 și λ_2 două valori proprii distincte ale operatorului A :

$$\begin{aligned} A\Psi_1 &= \lambda_1\Psi_1 \\ A\Psi_2 &= \lambda_2\Psi_2 \end{aligned}$$

Atunci:

$$(\Psi_2, A\Psi_1) = \lambda_1(\Psi_2, \Psi_1) = (A^+\Psi_2, \Psi_1)$$

Dar $A^+ = A$.

$$(A\Psi_2, \Psi_1) = \lambda_1(\Psi_2, \Psi_1) \quad (4.87)$$

În plus:

$$(A\Psi_2, \Psi_1) = (\lambda_2\Psi_2, \Psi_1) = \lambda_2(\Psi_2, \Psi_1) \quad (4.88)$$

deoarece λ_2 este un număr real. Atunci din (4.87) și (4.88) rezultă:

$$0 = (\lambda_1 - \lambda_2)(\Psi_2, \Psi_1)$$

Deoarece $\lambda_1 \neq \lambda_2$ rezultă:

$$(\Psi_2, \Psi_1) = 0$$

adică cei doi vectori de stare sunt ortogonali.

4.3 Principiile mecanicii cuantice

4.3.1 Principiul descrierii stării unui sistem cuantic

Starea unui sistem este descrisă (în anumite cazuri) cu ajutorul unei funcții Ψ numită funcție de stare sau vector de stare dintr-un spațiu Hilbert care conține toată informația despre sistem. Aceasta este situația stărilor pure.

În cazul cel mai general starea sistemului este caracterizată de mai mulți vectori de stare $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_k$ și ponderile lor asociate $p_1, p_2, p_3, \dots, p_k$ ($\sum_{i=1}^k p_i = 1$). Probabilitatea ca sistemul să se afle într-o stare caracterizată de funcția de stare Ψ_i este egală cu ponderea corespunzătoare p_i . Acesta este cazul stărilor mixte.

Observații:

a) Noțiunea de funcție de stare sau vector de stare generalizează noțiunea de funcție de undă. Spațiul funcțiilor de stare este un spațiu Hilbert și poartă numele de spațiul stărilor.

b) Pentru o singură particulă funcția de stare este funcția de undă $\Psi(\vec{r}, t)$ cu proprietățile enunțate în secțiunea precedentă. Astfel, pătratul modulului funcției de undă este densitatea de probabilitate de localizare a particulei.

c) Pentru un sistem format din N particule funcția de stare este o funcție ce depinde de vectorii de poziție $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ ai particulelor și de timpul t . Ea este integrabilă de modul pătrat:

$$\int |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 dv_1 dv_2 \dots dv_N = 1 \quad (4.89)$$

Mărimea $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2$ este interpretată ca o densitate de probabilitate de localizare, în sensul că $P dv_1 \dots dv_n$ este probabilitatea de a găsi la momentul t particula 1 în elementul de volum dv_1 centrat pe vectorul de poziție \vec{r}_1 , particula 2 în elementul de volum dv_2 centrat pe vectorul de poziție \vec{r}_2 și așa mai departe.

4.3.2 Principiul descrierii mărimilor fizice

Mărimile fizice caracteristice unui sistem care pot fi măsurate sunt numite observabile.

Oricărei mărimi observabile A a unui sistem fizic i se asociază un operator hermitic care acționează în spațiul funcțiilor de stare a sistemului considerat. Operatorul hermitic respectiv trebuie să admită un sistem complet de vectori proprii.

Valorile proprii ale operatorului asociat observabilei reprezintă singurele valori pe care le poate avea observabila respectivă.

Pentru un sistem de particule, operatorii Q_k asociați coordonatelor generalizate q_k și operatorii P_k asociați impulsurilor p_k ($k = 1, 2, \dots, f$) satisfac relațiile de comutare:

$$[Q_i, Q_j] = 0 \quad (4.90)$$

$$[P_i, P_j] = 0 \quad (4.91)$$

$$[Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (4.92)$$

În cazul observabilelor care au un corespondent clasic (momentul cinetic, energia) operatorul corespunzător se obține înlocuind în expresia clasică coordonatele generalizate și impulsurile generalizate cu operatorii corespunzători. Pentru mărimile fizice (observabile) care nu au un corespondent clasic se utilizează alte modalități de construire a operatorilor respectivi.

Observații:

a) Interpretarea care se dă valorilor proprii unui operator este justificată de faptul că pentru operatorii hermitici valorile proprii sunt reale.

b) Relațiile dintre operatorii impuls și coordonate în mecanica cuantică au fost postulate pornindu-se de la analogia comutatorului cu parantezele Poisson din mecanica clasică.

Operatorii poziție și impuls pentru o particulă

Vom considera o particulă aflată într-un câmp de forțe ce derivă dintr-o energie potențială $V(x, y, z)$. Notăm cu X, Y, Z operatorii de poziție și cu P_x, P_y, P_z operatorii impulsului. Conform principiului descrierii mărimilor fizice între acești operatori există relațiile:

$$[X, Y] = [Y, X] = [X, Z] = 0 \quad (4.93)$$

$$[P_x, P_y] = [P_y, P_z] = [P_z, P_x] = 0 \quad (4.94)$$

$$[x, P_y] = [x, P_z] = [y, P_x] = [y, P_z] = [z, P_x] = [z, P_y] = 0 \quad (4.95)$$

$$[x, P_x] = [y, P_y] = [z, P_z] = i\hbar \quad (4.96)$$

Pentru o particulă funcția de stare este funcția de undă $\Psi(x, y, z)$. Alegem operatorii de poziție ca fiind operatori multiplicativi:

$$X = x, \quad Y = y, \quad Z = z \quad (4.97)$$

Atunci:

$$X\Psi(x, y, z) = x\Psi(x, y, z) \quad (4.98)$$

$$Y\Psi(x, y, z) = y\Psi(x, y, z) \quad (4.99)$$

$$Z\Psi(x, y, z) = z\Psi(x, y, z) \quad (4.100)$$

Ei îndeplinesc condițiile anterioare și sunt liniari și hermitici. Într-un caz mai general un operator multiplicativ care depinde doar de poziția particulei și care este definit de funcția reală $f(\vec{r})$ este hermitic:

$$(\varphi, f\Psi) = \int_{\infty} \varphi^* f\Psi dr^3 = \int (f\varphi)^* \Psi dv = (f\varphi, \Psi)$$

Operatorii atașați impulsurilor trebuie să satisfacă relațiile (4.93), (4.94), (4.95). Ei nu pot fi operatori multiplicativi. Pentru cei trei operatori se aleg formulele:

$$\begin{aligned} P_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ P_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ P_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.101)$$

Operatorii impuls satisfac relațiile (4.95). Vom demonstra doar una din aceste relații:

$$\begin{aligned}[X, P_x] \Psi &= (XP_x - P_xX) \Psi = x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) \\ [X, P_x] \Psi &= -i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar \Psi = i\hbar \Psi\end{aligned}$$

Pentru a demonstra hermiticitatea acestor operatori trebuie arătat că:

$$(\varphi, P_x \Psi) = (P_x \varphi, \Psi) \quad (4.102)$$

unde pentru simplificare vom considera funcțiile φ și Ψ care depind doar de variabila x . Atunci:

$$(\varphi, P_x \Psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial (\varphi^* \Psi)}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \right] dx$$

Deoarece funcțiile φ^* și Ψ tind la zero suficient de rapid când: $x \rightarrow \pm\infty$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial (\varphi^* \Psi)}{\partial x} dx = \varphi^* \Psi \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} = 0$$

și:

$$(\varphi, P_x \Psi) = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^* \Psi dx = (P_x \varphi, \Psi)$$

Valorile proprii și funcțiile proprii a impulsului

Ecuția cu funcții și valori proprii pentru componenta impulsului pe axa Ox este:

$$P_x u(x) = p_x u(x) \quad (4.103)$$

Ținând cont de definiția operatorului P_x se obține ecuația diferențială:

$$-i\hbar \frac{\partial u(x)}{\partial x} = p_x u(x) \quad (4.104)$$

cu soluția:

$$u(x) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right) \quad (4.105)$$

Astfel oricărei valori proprii p_x îi corespunde un vector propriu $u(x)$. Aceasta înseamnă că spectrul valorilor proprii operatorului este continuu. Funcțiile obținute nu sunt funcții de modul pătrat integrabile și nu aparțin spațiului stărilor. Asemenea funcții pot fi normate în sens general, iar constanta C trebuie aleasă în așa fel încât:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(p_x, x) u(p'_x, x) dx = \delta(p_x - p'_x) \quad (4.106)$$

Se obține:

$$C^* C \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar} (p_x - p'_x) x\right] dx = \delta(p_x - p'_x) \quad (4.107)$$

Se face schimbarea de variabilă: $\frac{x}{\hbar} = y$. Atunci:

$$C^* C \hbar \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(p'_x - p_x) y] dy = \delta(p_x - p'_x) \quad (4.108)$$

Deoarece:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(p'_x - p_x) y] dy = 2\pi \delta(p'_x - p_x)$$

se obține:

$$C^* C \hbar 2\pi \delta(p'_x - p_x) = \delta(p_x - p'_x)$$

Rezultă:

$$2\pi \hbar |C|^2 = 1$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \quad (4.109)$$

Trebuie remarcat că C este determinată până la un factor de fază pe care nu-l vom mai considera. Atunci:

$$u(p_x, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right) \quad (4.110)$$

Funcțiile proprii ale impulsului formează un sistem complet. Faptul că spectrul de valori proprii ale impulsului este continuu arată că la măsurarea impulsului pe o axă se poate obține orice valoare, adică impulsul nu este cuantificat. În mod analog se obțin:

$$u(p_y, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_y y\right) \quad (4.111)$$

$$u(p_z, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_z z\right) \quad (4.112)$$

Se poate astfel scrie sistemul complet de funcții proprii comune pentru operatorii impuls:

$$u(\vec{p}, \vec{r}) = u(p_x, x) u(p_y, y) u(p_z, z) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right)$$

unde \vec{p} este vectorul de componente p_x, p_y, p_z .

Observabile care comută

Date fiind două observabile \mathcal{A} și \mathcal{B} fie:

$$C = [A, B] = AB - BA$$

comutatorul operatorilor asociați. Dacă $C = 0$ observabilele se numesc *compatibile*, iar dacă $C \neq 0$, observabilele se numesc *incompatibile*.

Este foarte importantă următoarea teoremă:

Teoremă *Condiția necesară și suficientă ca două observabile A și B să commute este ca ele să admită un sistem complet de funcții proprii.*

Valorile proprii și funcțiile proprii a poziției

Ecuția cu valori și funcții proprii pentru operatorul poziție după axa Ox este:

$$X v(x) = \lambda v(x) \quad (4.113)$$

Ținând cont de definiția acestui operator rezultă:

$$xv(x) = \lambda v(x) \quad (4.114)$$

sau:

$$(x - \lambda)v(x) = 0 \quad (4.115)$$

Ecuția (4.115) admite soluții doar pentru λ real. Punând $\lambda = x_0$, $-\infty < x_0 < \infty$, se obține pentru $v(x)$:

$$v(x) = \begin{cases} 0, & x \neq x_0 \\ C, & x = x_0 \end{cases} \quad (4.116)$$

unde C este un număr complex.

Constanta C poate fi determinată în același mod ca și în cazul anterior, dintr-o condiție generală de normare.

$$\int_{-\infty}^{\infty} v(x_0, x)v(x'_0, x) dx = \delta(x_0 - x'_0) \quad (4.117)$$

Funcțiile proprii ale operatorului x care satisfac condițiile de ortonormare sunt:

$$v(x_0, x) = \delta(x - x_0) \quad (4.118)$$

Ca și în cazul impulsului aceste funcții proprii nu aparțin nici ele spațiului stărilor, dar ele formează un sistem complet.

Operatorii Y și Z admit funcții proprii de același tip:

$$v(y_0, y) = \delta(y - y_0) \quad (4.119)$$

$$v(z_0, z) = \delta(z - z_0) \quad (4.120)$$

Sistemul complet de funcții proprii comune pentru operatorii de poziție este:

$$v(\vec{r}_0, \vec{r}) = v(x_0, x)v(y_0, y)v(z_0, z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (4.121)$$

Operatorul energie

O particulă aflată într-un câmp conservativ de forțe are energia potențială $V(\vec{r})$. Energia totală a particulei este:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (4.122)$$

și ea se conservă.

În mecanica cuantică energiei îi corespunde operatorul energie, notat cu H . Pentru obținerea operatorului asociat energiei se înlocuiesc variabilele de poziție și impulsurile cu operatorii corespunzători:

$$\begin{aligned} x &\rightarrow X, & y &\rightarrow Y, & z &\rightarrow Z \\ p_x &\rightarrow P_x, & p_y &\rightarrow P_y, & p_z &\rightarrow P_z \end{aligned}$$

Rezultă că:

$$p_x^2 \rightarrow P_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

și:

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \rightarrow P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \Delta$$

Operatorul energie este:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$$

Operatorul este liniar și hermitic ca o consecință a modului în care este construit. Ecuația cu valori proprii asociată operatorului energie:

$$Hu(\vec{r}) = Eu(\vec{r}) \quad (4.123)$$

sau:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(\vec{r}) + V(\vec{r})u(\vec{r}) = Eu(\vec{r}) \quad (4.124)$$

este ecuația Schrödinger independentă de timp pentru o singură particulă.

4.3.3 Principiul interpretării statistice

Deoarece mulțimea valorilor proprii ale unui operator poate fi una discretă sau continuă vom considera separat cele două cazuri.

a) *Cazul unui spectru discret*

Dacă toate valorile proprii a_n ale operatorul A asociat observabilei A sunt nedegenerate, fiecăreia îi este asociat un vector propriu u_n :

$$Au_n = a_n u_n \quad (4.125)$$

Deoarece ansamblul vectorilor proprii, presupuși normați, constituie o bază în spațiul stărilor, funcția de stare se poate scrie ca:

$$\Psi = \sum_n c_n u_n \quad (4.126)$$

La o măsurare a variabilei A în starea descrisă de funcția Ψ , probabilitatea de a se obține o valoare a_n nedegenerată din spectrul discret are valoarea:

$$P(a_n) = |c_n|^2 = |(u_n, \Psi)|^2 \quad (4.127)$$

Dacă valorile proprii a_n sunt degenerate cu gradul de degenerare g_n , lor le corespund mai mulți vectori proprii $u_n^{(i)}$:

$$Au_n^{(i)} = a_n u_n^{(i)}; \quad i = 1, 2, \dots, g_n \quad (4.128)$$

Atunci:

$$\Psi = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^{(i)} u_n^{(i)} \quad (4.129)$$

La o măsurare a observabilei A în starea descrisă de funcția de stare Ψ normată, probabilitatea $P(a_n)$ de a obține valoarea a_n este

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^{(i)}|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |(u_n^{(i)}, \Psi)|^2 \quad (4.130)$$

b) *Cazul unui spectru continuu*

Presupunem că spectrul operatorului A este continuu și pentru simplificare vom presupune că este nedegenerat.

$$Av_\alpha = \alpha v_\alpha \quad (4.131)$$

unde α se consideră că variază în mod continuu.

Sistemul ortonormat, în sens generalizat, de vectori proprii v_α formează o bază continuă în spațiul funcțiilor de stare, astfel că o funcție de stare se exprimă:

$$\Psi = \int c_\alpha v_\alpha d\alpha \quad (4.132)$$

Astfel, la măsurarea unei observabile A asupra unui sistem aflat în starea Ψ normată, probabilitatea $dP(\alpha)$ de a obține rezultatele în intervalul $\alpha, \alpha + d\alpha$ este:

$$dP(\alpha) = |c(\alpha)|^2 d\alpha = |(v_\alpha, \Psi)|^2 d\alpha \quad (4.133)$$

Observații

a) Se poate verifica faptul că în fiecare caz, suma probabilităților este egală cu 1. Considerăm cazul unui spectru discret în care valorile proprii ale observabilei A sunt nedegenerate.

$$\begin{aligned} \sum P(a_n) &= \sum_n |c_n|^2 = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n c_n^* (u_n, \Psi) = \\ &= \sum_n (c_n u_n, \Psi) = \left(\sum_{n=1} c_n u_n, \Psi \right) = 1 \end{aligned}$$

b) Interpretarea statistică ne permite să afirmăm că dacă două funcții de stare diferă printr-un factor de fază constant ele reprezintă aceeași stare.

Să considerăm doi vectori Ψ și $\Psi' = e^{i\alpha}\Psi$.

$$(\Psi', \Psi') = (e^{i\alpha}\Psi, e^{i\alpha}\Psi) = e^{-i\alpha} e^{i\alpha} (\Psi, \Psi) = 1$$

$$|c'_n|^2 = |(u_n, \Psi')|^2 = |(u_n, e^{i\alpha}\Psi)|^2 = |(u_n, \Psi)|^2 = |c_n|^2$$

c) Fazele relative ale termenilor dintr-o combinație liniară au semnificație fizică. Presupunem:

$$\Psi = \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2 \quad (4.134)$$

unde λ_1 și λ_2 sunt numere complexe. Este clar că $e^{i\alpha_1} \Psi_1$ reprezintă aceeași stare fizică ca și Ψ_1 iar $e^{i\alpha_2} \Psi_2$ reprezintă aceeași stare fizică ca și Ψ_2 . Dar:

$$\varphi = \lambda_1 e^{i\alpha_1} \Psi_1 + \lambda_2 e^{i\alpha_2} \Psi_2 \quad (4.135)$$

nu descrie aceeași stare ca și Ψ .

Valoarea medie a unei observabile într-o stare dată Predicțiile furnizate de acest principiu sunt probabilistice. Pentru a le verifica este necesar să se facă un număr mare de măsurători în condiții identice, adică să se facă un mare număr de măsurători asupra unui mare număr de sisteme toate în aceleași stări cuantice. Dacă ipotezele sunt corecte, se constată că după un mare număr de experimente identice, proporția acelora care dau un anumit rezultat tinde către proporția calculată din teorie.

Valoarea medie a observabilei A (vom desemna în continuare prin observabilă nu numai operatorul asociat ci și mărimea fizică respectivă) în starea Ψ pe care o notăm cu $\langle A \rangle$ este definită ca valoarea medie a rezultatelor obținute prin efectuarea unui număr mare N de măsurători asupra observabilei A pe sisteme aflate în aceeași stare inițială Ψ .

Vom considera cazul unui operator ale cărui valori proprii sunt discrete și nedegenerate. Deoarece valoarea a_n se obține cu probabilitatea $P(a_n)$ valoarea medie obținută în cazul măsurării observabilei A este:

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \sum_n a_n |c_n|^2 \quad (4.136)$$

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n c_n c_n^* = \sum_n a_n c_n (\Psi, u_n) = \sum_n c_n (\Psi, a_n u_n) = \sum_n c_n (\Psi, A u_n) =$$

$$\langle A \rangle = \left(\Psi, \sum_n c_n A u_n \right) = \left(\Psi, A \sum_n c_n u_n \right) = (\Psi, A \Psi)$$

$$\langle A \rangle = (\Psi, A \Psi) \quad (4.137)$$

Presupunem că pentru un sistem aflat în starea Ψ valorile pe care le găsim la măsurarea lui A sunt cuprinse într-un interval de lărgime δA ce cuprinde pe $\langle A \rangle$. Cu cât δA este mai mic cu atât mai mult rezultatele se concentrează în jurul lui $\langle A \rangle$.

Problema care se pune este aceea a definirii lui δA . Considerăm pentru fiecare măsurătoare diferența dintre valoarea obținută și valoarea medie $\langle A \rangle$. Pentru a defini δA se poate încerca să se calculeze media acestor diferențe.

$$\langle A - \langle A \rangle \rangle = \langle A \rangle - \langle A \rangle = 0$$

Deoarece valoarea obținută este nulă pentru a evita acest lucru definim pe δA astfel:

$$(\delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (4.138)$$

Atunci:

$$\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$(\delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (4.139)$$

δA poartă numele de abatere pătratică medie:

$$\delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

4.3.4 Principiul evoluției temporale

Evoluția în timp a funcției de stare este descrisă de ecuația Schrödinger temporală:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi = \mathcal{H}(t) \Psi(t) \quad (4.140)$$

unde $\mathcal{H}(t)$ este operatorul hamiltonian. Când este posibil operatorul hamiltonian este construit pornind de la funcția lui Hamilton. Dacă sistemul evoluează în condiții externe independente de timp, operatorul Hamiltonian coincide cu operatorul energiei.

Observații asupra ecuației lui Schrödinger

a) Condiții inițiale

Ecuția lui Schrödinger este o ecuație cu derivate parțiale de ordinul întâi în timp. Aceasta înseamnă că fiind dată starea inițială $\Psi(t_0)$ se poate determina o funcție de stare $\Psi(t)$ la fiecare moment de timp ulterior. Proprietatea este analoagă cu cea din cazul clasic când cunoașterea condițiilor inițiale determină în mod univoc evoluția sistemului (principiul cauzalității).

b) Principiul superpoziției

Ecuția (4.140) este liniară și omogenă. O combinație liniară a mai multor soluții particulare este tot o soluție a ecuației Schrödinger.

Dacă Ψ_1 și Ψ_2 sunt soluții ale ecuației Schrödinger atunci și $\Psi = \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2$, unde λ_1 și λ_2 sunt numere complexe, este o soluție a ecuației Schrödinger.

c) Conservarea probabilității

a) Evoluția în timp a normei funcției de stare.

Hermiticitatea operatorului Hamilton \mathcal{H} implică faptul că norma vectorului de stare rămâne constantă în timp. Vom arăta că:

$$\frac{d(\Psi, \Psi)}{dt} = 0 \quad (4.141)$$

Efectuând derivata normei funcției de unda se obține:

$$\frac{d}{dt}(\Psi, \Psi) = \left(\frac{d}{dt} \Psi, \Psi \right) + \left(\Psi, \frac{d\Psi}{dt} \right) \quad (4.142)$$

Din ecuația (4.140) rezultă:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} \Psi \quad (4.143)$$

iar ecuația (4.143) devine:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\Psi, \Psi) &= \left(\frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} \Psi, \Psi \right) + \left(\Psi, \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} \Psi \right) \\ \frac{d}{dt}(\Psi, \Psi) &= -\frac{1}{i\hbar} (\mathcal{H} \Psi, \Psi) + \frac{1}{i\hbar} (\Psi, \mathcal{H} \Psi) = 0 \end{aligned}$$

deoarece:

$$(\Psi, \mathcal{H}\Psi) = (\mathcal{H}\Psi, \Psi)$$

\mathcal{H} fiind hermitic.

b) Densitatea curentului de probabilitate

Ne limităm la cazul unui sistem format dintr-o singură particulă. Considerăm că particula este descrisă de funcția de stare normată $\Psi(\vec{r}, t)$. Atunci densitatea de probabilitate de localizare este:

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (4.144)$$

Probabilitatea $d\mathcal{P}(r, t)$ de a găsi particula în intervalul infinitezimal dv centrat pe vectorul de poziție \vec{r} este:

$$dP(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) dv$$

Integrând pe tot spațiul:

$$\iiint \rho(\vec{r}, t) dv = 1 \quad (4.145)$$

Această relație poate fi interpretată ca fiind relația de conservare a probabilității. Situația este analoagă cu aceea din electromagnetism. Dacă într-un sistem fizic sarcina se repartizează în spațiu cu densitatea volumică $\rho(\vec{r}, t)$ sarcina totală (adică integrala lui $\rho(\vec{r}, t)$) se conservă în timp. În timp repartiția spațială a sarcinii poate varia datorită curenților.

Conservarea globală a sarcinii se bazează pe o lege de conservare locală: dacă sarcinile Q conținute într-un volum fix V variază în timp, suprafața S care limitează V este traversată de un curent electric. Legea de conservare a sarcinii se exprimă printr-o relație numită relație de continuitate:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (4.146)$$

unde $\vec{j}(\vec{r}, t)$ este densitatea de curent.

Vom demonstra că este posibil să găsim un vector $\vec{j}(\vec{r}, t)$ numit curent de probabilitate care să satisfacă o ecuație de tipul (4.146). Totul se petrece ca și cum am avea de-a face cu un "fluid de probabilitate" cu densitate $\rho(\vec{r}, t)$ și densitate de curent $\vec{j}(\vec{r}, t)$. Dacă probabilitatea cu care o particulă este găsită în volumul fix dv din jurul lui \vec{r} , variază în

timp, un curent de probabilitate traversează suprafața ce limitează acel volum.

Presupunem că particula se află într-un câmp potențial ce-i determină o energie potențială $V(\vec{r}, t)$. Hamiltonianul sistemului este:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\vec{r}, t) \quad (4.147)$$

Ecuția Schrödinger este:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (4.148)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) \quad (4.149)$$

Se înmulțesc, prima ecuație cu $\Psi^*(\vec{r}, t)$ iar cea de a doua cu $\Psi(\vec{r}, t)$ și se adună. Se obține:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi \Psi^*) &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*] \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi \Psi^*) + \frac{\hbar^2}{2m} [\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*] &= 0 \end{aligned} \quad (4.150)$$

Dar:

$$\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* = \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

Atunci:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(r, t) + \frac{\hbar}{2mi} \nabla (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = 0 \quad (4.151)$$

Astfel, putem defini curentul de probabilitate ca:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad (4.152)$$

Atunci, legea locală a conservării probabilității ia forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \nabla \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (4.153)$$

În cazul particular al mișcării unidimensionale densitatea și curentul de probabilitate vor depinde doar de o singură variabilă x . Dacă se ține cont că $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ relațiile (4.151) și (4.152) devin:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 + \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \quad (4.154)$$

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \quad (4.155)$$

Evoluția în timp a valorii medii a unei observabile

Fie A o observabilă. Dacă sistemul se află în starea caracterizată de funcția de stare care depinde explicit de timp $\Psi(t)$, valoarea medie a observabilei la momentul t este:

$$\langle A(t) \rangle = (\Psi(t), A(t) \Psi(t)) \quad (4.156)$$

Se observă că valoarea medie depinde de timp prin intermediul lui $\Psi(t)$ cât și datorită variației în mod explicit de timp a operatorului $A(t)$. În continuare vom presupune implicit această dependență pe care nu o vom mai pune în evidență în mod explicit. Derivând relația (4.156) în raport cu timpul:

$$\frac{d\langle A(t) \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} (\Psi, A\Psi) = \left(\frac{d}{dt} \Psi, A\Psi \right) + \left(\Psi, \frac{\partial A}{\partial t} \Psi \right) + \left(\Psi, A \frac{d\Psi}{dt} \right) \quad (4.157)$$

Deoarece:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H}(t) \Psi$$

relația (4.157) devine:

$$\frac{d}{dt} (\Psi, A\Psi) = -\frac{1}{i\hbar} (\mathcal{H}\Psi, A\Psi) + \frac{1}{i\hbar} (\Psi, A\mathcal{H}\Psi) + \left(\Psi, \frac{\partial A}{\partial t} \Psi \right)$$

$$\frac{d}{dt} (\Psi, A\Psi) = -\frac{1}{i\hbar} (\Psi, \mathcal{H}A\Psi) + \frac{1}{i\hbar} (\Psi, A\mathcal{H}\Psi) + \left(\Psi, \frac{\partial A}{\partial t} \Psi \right)$$

Obținem:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi, A\Psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi, (A\mathcal{H} - \mathcal{H}A) \Psi \rangle + \left\langle \Psi, \frac{\partial A}{\partial t} \Psi \right\rangle \quad (4.158)$$

adică:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, \mathcal{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (4.159)$$

Dacă operatorul nu depinde explicit de timp atunci $\left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle = 0$ și

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, \mathcal{H}] \rangle \quad (4.160)$$

Cazul sistemului conservativ

Fie un sistem fizic al cărui hamiltonian nu depinde explicit de timp. În acest caz operatorul hamiltonian coincide cu operatorul energiei. Spunem că sistemul este conservativ. În mecanica clasică consecința cea mai importantă a acestei situații este conservarea energiei. Spunem că energia totală este o constantă de mișcare. Să considerăm ecuația cu valori proprii pentru energie:

$$Hu_n = E_n u_n \quad (4.161)$$

Vom arăta că dacă se cunosc energiile E_n și funcțiile proprii corespunzătoare Ψ_n , ecuația Schrödinger dependentă de timp se rezolvă foarte ușor.

Deoarece u_n formează o bază în spațiul stărilor funcția de stare se poate scrie ca o dezvoltare după acestea:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) u_n \quad (4.162)$$

unde: $c_n(t) = (u_n, \Psi(t))$

Ecuația (4.140) devine:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_n c_n(t) u_n \right) = \mathcal{H} \sum_n c_n(t) u_n \quad (4.163)$$

adică:

$$i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) u_n = \sum_n c_n(t) E_n u_n \quad (4.164)$$

Se obțin ecuațiile:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) \quad (4.165)$$

Soluțiile acestor ecuații sunt:

$$c_n(t) = c_n(t_0) \exp \left[-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar} \right] \quad (4.166)$$

Soluția generală a ecuației Schrödinger este:

$$\Psi(t) = \sum_n u_n c_n(t_0) \exp \left[-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar} \right] \quad (4.167)$$

Stări staționare

Un caz particular important este acela în care operatorul hamiltonian \mathcal{H} , este independent de timp și concide cu operatorul energie H . Considerăm funcția:

$$\Psi(t) = u_m \exp \left[\frac{-iE_m t}{\hbar} \right] \quad (4.168)$$

unde u_m este o funcție proprie a operatorului energiei corespunzătoare valorii E_m .

Se verifică că la orice moment:

$$H\Psi(t) = E_m\Psi(t)$$

În plus funcția $\Psi(t)$ verifică și ecuația Schrödinger temporală:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H\Psi(t)$$

Aceasta înseamnă că funcția $\Psi(t)$ descrie starea unui sistem în care energia acestuia este E_m la orice moment. O astfel de stare se numește stare staționară.

Într-o stare staționară statistica unei observabile rămâne constantă în timp.

Fie observabila A care are valorile proprii a_n cărora le corespund vectorii proprii φ_n . Considerăm cazul când nu avem degenerare:

$$A\varphi_n = a_n\varphi_n \quad (4.169)$$

Statistica observabilei rezultă din descompunerea funcție de stare:

$$\Psi(t) = u_m \exp\left[-\frac{iE_m t}{\hbar}\right] = \sum_n c_n \varphi_n \quad (4.170)$$

Atunci:

$$c_n = (\varphi_n, \Psi(t)) = \left(\varphi_n, u_m \exp\left[-\frac{iE_m t}{\hbar}\right] \right) \quad (4.171)$$

Astfel

$$c_n = \exp\left[-\frac{iE_m t}{\hbar}\right] (\varphi_n, u_m) \quad (4.172)$$

Probabilitatea de a se obține rezultatul a_n este constantă:

$$|c_n|^2 = |(\varphi_n, u_m)|^2 \quad (4.173)$$

Denumirea de stare staționară provine de la faptul că într-o stare staționară statistica observabilelor este independentă de timp.

Constante de mișcare

Fie A o observabilă. Evoluția ei în timp este dată de ecuația:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} + [A, \mathcal{H}] \quad (4.174)$$

Prin definiție, numim constantă de mișcare observabila a cărei valoare medie este constantă în timp, adică:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = 0 \quad (4.175)$$

Pentru aceasta este necesar ca:

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = 0 \quad (4.176)$$

și:

$$[A, \mathcal{H}] = 0 \quad (4.177)$$

Din relația (4.177) rezultă că A și \mathcal{H} sunt compatibile astfel că admit un sistem comun de funcții proprii. Dacă sistemul se află într-o stare în care funcția de stare este funcție proprie comună pentru \mathcal{A} și \mathcal{H} sistemul va rămâne în starea respectivă și la un moment ulterior de timp. Dacă operatorul A nu depinde explicit de timp atunci condiția ca observabila respectivă să rămână constantă în timp este ca să fie îndeplinită condiția (4.177).

Relațiile de incertitudine ale lui Heisemberg

Fie două observabile A și B . $\langle A \rangle = (\Psi, A\Psi)$ este valoarea medie a lui A , iar $\langle B \rangle = (\Psi, B\Psi)$ este valoarea medie a lui B . Definim operatorii hermitici:

$$\Delta A = A - \langle A \rangle \quad (4.178)$$

$$\Delta B = B - \langle B \rangle \quad (4.179)$$

cu semnificația de "abatere de la medie".

Construim operatorul $C = \Delta A + i\lambda\Delta B$, liniar, dar care nu este hermitic. Adjunctul operatorului C este $C^+ = \Delta A - i\lambda\Delta B$. Calculăm valoarea medie:

$$\langle CC^+ \rangle = (\Psi, CC^+\Psi) = (C^+\Psi, C\Psi) = |C^+\Psi|^2 \geq 0 \quad (4.180)$$

Se ține cont de relațiile (4.178) și (4.179), și rezultă:

$$\langle CC^+ \rangle = \langle (\Delta A + i\lambda\Delta B)(\Delta A - i\lambda\Delta B) \rangle$$

$$\langle CC^+ \rangle = \langle (\Delta A)^2 \rangle + \lambda^2 \langle (\Delta B)^2 \rangle - i\lambda \langle \Delta A \Delta B - \Delta B \Delta A \rangle \quad (4.181)$$

$$\langle CC^+ \rangle = \langle (\Delta A)^2 \rangle + \lambda^2 \langle (\Delta B)^2 \rangle - i\lambda \langle [\Delta A, \Delta B] \rangle \quad (4.182)$$

Astfel, în relația (4.182) intervin abaterile pătratice medii ale lui A și B . Atunci:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (4.183)$$

$$\langle (\Delta B)^2 \rangle = \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 \quad (4.184)$$

De asemenea:

$$[\Delta A, \Delta B] = [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] = [A, B] \quad (4.185)$$

Din (4.180), (4.182) și (4.185) rezultă că:

$$f(\lambda) = \langle (\Delta A)^2 \rangle + \lambda^2 \langle (\Delta B)^2 \rangle - i\lambda \langle [A, B] \rangle \geq 0 \quad (4.186)$$

Deoarece $f(\lambda)$ este reală și pozitivă rezultă că $\langle [A, B] \rangle$ este un număr pur imaginar. Funcția are un minim pentru

$$\lambda_0 = \frac{i \langle [A, B] \rangle}{2 \langle (\Delta B)^2 \rangle} \quad (4.187)$$

Valoarea minimă a funcției $f(\lambda)$ este:

$$f(\lambda_0) = \langle (\Delta A)^2 \rangle + \frac{1 \langle [A, B] \rangle^2}{4 \langle (\Delta B)^2 \rangle} \quad (4.188)$$

Deoarece valoarea funcției este pozitivă atunci:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq -\frac{1}{4} \langle [A, B] \rangle^2 \quad (4.189)$$

Se notează cu δA și δB abaterile pătratice medii:

$$\delta A = \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle}$$

$$\delta B = \sqrt{\langle (\Delta B)^2 \rangle}$$

Dacă se ține cont că $[A, B]$ este pur imaginar rezultă:

$$\delta A \delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (4.190)$$

În particular pentru variabilele canonic conjugate, ca de exemplu (X, P_x) , se obține:

$$\langle [X, P_x] \rangle = i\hbar \quad (4.191)$$

Atunci:

$$\delta X \delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.192)$$

De multe ori această relație se scrie

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

iar în locul lui \hbar se folosește simplu constanta Planck h . Relațiile de tipul $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ și $\Delta x \Delta p \geq h$ au fost găsite inițial în urma sintezei bazei experimentale. În aceste relații, noțiunea de "incertitudine" nu este precizată. Dacă se definește "incertitudinea" ca "abaterea pătratică medie" se obțin relațiile (4.192).

Relații analoge se pot scrie și pentru componentele după axele Oy și Oz . Relația (4.192) arată că dacă comutatorul a două observabile nu este zero ele nu pot fi măsurate simultan cu o precizie foarte bună. Cunoașterea uneia din observabile determină o incertitudine mare în cunoașterea celei de-a doua observabile. În cazul particular considerat rezultă că poziția și impulsul unei particule nu pot fi măsurate simultan cu oricare precizie.

O altă relație care poate fi demonstrată este relația de incertitudine timp-energie.

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar \quad (4.193)$$

Dacă o particulă se află într-o stare cu energia E , Δt este "timpul mediu de viață" al particulei pentru această stare. ΔE este "lărgimea naturală a nivelului energetic".

4.3.5 Principiul preparării stării

Așa cum am discutat anterior, o măsurătoare realizată asupra unui sistem cuantic modifică starea acestuia. În urma măsurătorii sistemul ia valori bine determinate pentru observabila măsurată.

Se consideră cazul în care pentru A se obține o valoare proprie a_n . Starea sistemului imediat după această măsurătoare este dată de vectorul propriu u_n asociat lui a_n .

Observații:

a) Dacă în continuare se efectuează din nou o măsurare asupra lui A vom găsi același rezultat a_n iar starea sistemului este caracterizată de vectorul de stare u_n .

$$Au_n = a_n u_n$$

b) Principiul afirmă producerea unui salt al funcției de stare în urma unei măsurători, în contrast cu evoluția lină a vectorului de stare când asupra sistemului nu se acționează. Rezultatul este diferit față de situația întâlnită în cazul fizicii clasice, unde efectuarea unei măsurători se poate realiza în așa fel încât practic să nu se modifice starea sistemului.

c) Starea în care ajunge sistemul după o măsurătoare este bine determinată numai dacă valoarea a_n este o valoare proprie nedegenerată a observabilei A . Dacă starea este degenerată, principiul spune doar că vectorul de stare este un vector propriu al operatorului pentru valoarea proprie a_n .

d) Starea obținută în urma măsurătorii este determinată nu numai de starea anterioară măsurătorii ci și de interacția dintre sistem și aparatul de măsură. Situația este diferită de cea din fizica clasică unde rezultatele unei măsurători depind numai de proprietățile sistemului și permit determinarea stării.

4.4 Ecuația Schrödinger unidimensională

Problemele unidimensionale prezintă interes deoarece există numeroase cazuri unidimensionale, dar și deoarece altele mai complicate pot fi reduse la tipuri de probleme unidimensionale. Vom considera cazul în care particula de masă m se deplasează într-o regiune din spațiu în care forțele

ce acționează asupra ei derivă dintr-o energie potențială V . Ecuația Schrödinger temporală devine:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi \quad (4.194)$$

Dacă V nu depinde de timp soluția ecuației Schrödinger este de forma:

$$\Psi(x, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} u(x) \quad (4.195)$$

unde funcția $u(x)$ satisface ecuația cu valori și funcții proprii pentru energie (ecuația Schrödinger atemporală):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{du^2(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x) \quad (4.196)$$

Ecuația (4.196) se mai poate scrie sub forma:

$$\frac{du^2(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] u(x) = 0 \quad (4.197)$$

Deoarece aceasta este o ecuație diferențială liniară de ordinul doi, ea are două soluții liniar independente pentru orice energie E . Aceasta înseamnă că ordinul maxim de degenerare al energiei este doi.

Presupunem că expresia energiei potențiale are discontinuități doar de speța întâi și că este mărginită inferior. Soluția ecuației (4.197) trebuie să satisfacă condițiile:

a) Funcția $u(x)$ trebuie să fie mărginită pentru a putea fi îndeplinită condiția de normare:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x)|^2 dx = 1 \quad (4.198)$$

b) Considerând că $V(x)$ este finită în regiunile în care căutăm soluțiile ecuației Schrödinger, rezultă că și derivata a doua $\frac{du^2(x)}{dx^2}$ este finită. Funcția $u(x)$ precum și prima ei derivată trebuie să fie funcții continue.

Deoarece $V(x)$ și E sunt mărimi reale, dacă $u(x)$ este o soluție a ecuației Schrödinger atemporale atunci și conjugata $u^*(x)$ este o soluție a ecuației. Din acest motiv rezultă că partea reală cât și partea imaginară a lui $u(x)$ sunt soluții ale ecuației Schrödinger.

În cazul unidimensional, densitatea de probabilitate este:

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |u(x)|^2 \quad (4.199)$$

Densitatea curentului de probabilitate este:

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \quad (4.200)$$

Ținând cont de relația (4.195) rezultă expresia densității curentului de probabilitate:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(u^* \frac{du}{dx} - u \frac{du^*}{dx} \right) \quad (4.201)$$

În cazul în care energia potențială este o funcție pară $V(x) = V(-x)$, funcția proprie $\Psi(x)$ corespunzătoare unei valori proprii nedegenerate E a energiei, este fie pară fie impară. Fie $u(x)$ o soluție a ecuației (4.196). Schimbăm în această ecuație pe x cu $-x$ și ținem cont că $V(x) = V(-x)$. Funcția $u(-x)$ satisface ecuația:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(-x)}{dx^2} + V(x)u(-x) = Eu(-x) \quad (4.202)$$

Se observă că funcția $u(-x)$ satisface aceeași ecuație ca și $u(x)$. Dacă E este o valoare proprie nedegenerată a ecuației Schrödinger atunci între cele două funcții trebuie să existe relația:

$$u(x) = \lambda u(-x) \quad (4.203)$$

Astfel:

$$u(-x) = \lambda u(x) = \lambda^2 u(-x) \quad (4.204)$$

Rezultă:

$$\lambda = \pm 1$$

Soluția $u(x)$ fiind unică ea este fie o soluție pară $u(-x) = u(x)$ fie una impară $u(-x) = -u(x)$.

Dacă E este o valoare proprie degenerată, $u(x)$ nu are o paritate bine determinată. Totuși se pot construi două soluții liniar independente care sunt pară, respectiv impară:

$$u_+(x) = \frac{u(x) + u(-x)}{2}$$

$$u_-(x) = \frac{u(x) - u(-x)}{2}$$

Rezultă că pentru o energie potențială definită pe un interval simetric în jurul originii sau pe întreaga axă este suficient să se rezolve ecuația Schrödinger doar în regiunea pozitivă. Se ține cont că soluția impară se anulează în origine în timp ce în cazul soluției impare prima derivată a acesteia se anulează în origine.

4.4.1 Particulă liberă

În acest caz $V = 0$, și ecuația Schrödinger atemporală devine:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}Eu(x) = 0 \quad (4.205)$$

Notăm $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$. Atunci soluția acestei ecuații este:

$$u(x) = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx} \quad (4.206)$$

Pentru ca soluția să fie finită este necesar ca parametrul k să fie real (în caz contrar una din exponențiale va tinde la infinit când $x \rightarrow \infty$ și nu va mai fi îndeplinită condiția de mărginire. Atunci $k^2 > 0$ și $E > 0$. Se observă că pentru orice valoare a energiei există o soluție a ecuației $u(x) = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx}$ atemporală, adică spectrul energetic al particulei libere este continuu și se întinde de la 0 la $+\infty$. Fiecare valoare proprie a energiei este dublu degenerată deoarece există două funcții proprii liniar independente $u_1(x) = e^{ikx}$ și $u_2(x) = e^{-ikx}$. Acestea le corespund două soluții ale ecuației Schrödinger temporale:

$$\Psi_1(x, t) = A_1 \exp \left[i \left(kx - \frac{Et}{\hbar} \right) \right] = A_1 \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_x x - Et) \right] \quad (4.207)$$

$$\Psi_2(x, t) = A_2 \exp \left[i \left(-kx - \frac{Et}{\hbar} \right) \right] = A_2 \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (p_x x + Et) \right] \quad (4.208)$$

unde am considerat că:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{p_x}{\hbar} \quad (4.209)$$

Ele reprezintă două unde plane monocromatice de pulsații $\omega = \frac{E}{\hbar}$. Acestea sunt chiar unde de Broglie asociate particulei. Prima dintre ele corespunde unei unde (particule) care se deplasează în sensul pozitiv al axei, iar cea de-a doua unei unde (particule) care se deplasează în sensul negativ al axei.

Remarcăm că $u_1(x) = e^{ikx}$ corespunde unei (particulei) ce se deplasează în sensul pozitiv al axei, iar $u_2(x) = e^{-ikx}$ corespunde unei (particulei) ce se deplasează în sensul negativ al axei.

Trebuie observat că cele două funcții $u_1(x) = e^{ikx} = e^{\frac{ip_x x}{\hbar}}$ și $u_2(x) = e^{-ikx} = e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}}$ sunt funcții proprii ale impulsului:

$$P_x u_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} = -i\hbar \frac{ip_x}{\hbar} e^{\frac{ip_x x}{\hbar}} = p_x u_1$$

$$P_x u_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}} = -i\hbar \left(-\frac{ip_x}{\hbar} \right) e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}} = -p_x u_2$$

Densitatea de probabilitate corespunzătoare unei dată de ecuația (4.207) este:

$$P = |\Psi_1(x, t)|^2 = |A_1|^2 \quad (4.210)$$

Aceasta este independentă de timp și de poziție. Din acest motiv poziția particulei pe axa Ox rămâne complet nedeterminată. Această concluzie este în acord cu principiul de incertitudine Heisenberg, deoarece am considerat o particulă cu un impuls $p_x^2 = \sqrt{2mE}$ bine determinat ($\Delta p_x = 0$). În acest caz nedeterminarea în poziție este infinită $\Delta x = \infty$.

Densitatea curentului de probabilitate este:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(u^* \frac{du}{dx} - u \frac{du^*}{dx} \right) = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2 = v |A_1|^2 \quad (4.211)$$

Soluțiile de mai sus nu pot reprezenta o stare reală a particulei deoarece nu sunt integrabile în modul pătrat.

Se pot construi și alte soluții ale ecuației particulei libere. Astfel putem să considerăm o suprapunere de un număr finit de unde de Broglie:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^n A_j e^{\frac{i}{\hbar}(p_{xj}x - E_j t)} \quad (4.212)$$

Funcția de mai sus nu mai este atașată unei valori bine determinate a impulsului și nici a energiei. Funcția construită dintr-un număr finit de unde de Broglie este neintegrabilă în modul pătrat și reprezintă o stare ideală.

Pentru descrierea unei stări reale a particulei trebuie considerată o suprapunere continuă de unde de Broglie:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} dp \quad (4.213)$$

Această funcție este un pachet de unde de Broglie. Pachetul de unde este caracterizat de funcția $\varphi(p)$. Impulsul nu mai este bine determinat chiar dacă funcția $\varphi(p)$ poate avea valori diferite de zero într-un interval din jurul unei valori p_0 .

4.4.2 Groapa de potențial cu pereți infiniți

Să considerăm că particula se află într-o gropă de potențial cu pereți infiniți (Fig.4.5):

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{pentru } x < 0 \text{ și } x > a \\ 0 & \text{pentru } x \in [0, a] \end{cases} \quad (4.214)$$

Aceasta înseamnă că particula se poate deplasa liber între 0 și a dar nu poate depăși aceste limite oricât de mare ar fi energia sa. Cum particula se află doar în interiorul gropii de potențial, în exteriorul ei $\Psi(x, t) = 0$. Atunci și $u(x) = 0$ în afara gropii de potențial.

Deoarece funcția $u(x)$ trebuie să îndeplinească condiția de continuitate, rezultă că $u(0) = u(a) = 0$. Ecuația Schrödinger atemporală este pentru $x \in [0, a]$:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E u(x) = 0 \quad (4.215)$$

Notăm $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ și ecuația (4.215) devine:

Figura 4.5: Groapa de potențial cu pereți infiniți

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k^2 u(x) = 0 \quad (4.216)$$

Soluția generală a ecuației de mai sus este:

$$u(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (4.217)$$

Ea trebuie să îndeplinească condițiile de continuitate:

$$\lim_{\substack{x \rightarrow 0 \\ x < 0}} u(x) = \lim_{\substack{x \rightarrow 0 \\ x > 0}} u(x)$$

$$\lim_{\substack{x \rightarrow a \\ x < a}} u(x) = \lim_{\substack{x \rightarrow a \\ x > a}} u(x)$$

Rezultă:

$$B \cos 0 = 0 \quad (4.218)$$

$$A \sin ka = 0 \quad (4.219)$$

Din ecuația (4.218) rezultă $B = 0$, iar din (4.219)

$$ka = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} a = n\pi \quad ; \quad n = 1, 2, 3... \quad (4.220)$$

de unde:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3... \quad (4.221)$$

Se constată că valorile pe care le poate lua energia sunt cuantificate. Pentru $n = 1$ se obține cea mai mică valoare pentru energia pe care o poate avea particula. Starea care are energie minimă poartă numele de stare fundamentală.

Funcțiile proprii ale energiei:

$$u(x) = A \sin kx = A \sin \frac{n\pi}{a}x \quad (4.222)$$

pot fi normate:

$$\int_0^a |u(x)|^2 dx = 1 \quad (4.223)$$

Rezultă:

$$A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a}x dx = 1$$

De aici:

$$|A| = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (4.224)$$

Atunci, funcțiile proprii ale energiei până la un factor de fază sunt:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a}x \quad (4.225)$$

Astfel, stările staționare sunt caracterizate de funcțiile de undă:

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \right] \sin \frac{n\pi}{a}x \quad (4.226)$$

Figura 4.6: Treapta de potențial

4.4.3 Treapta de potențial

Fie o particulă de masă m care se mișcă în sensul axei Ox într-un câmp de forțe conservativ care derivă dintr-o energie potențială de forma (Fig.4.6):

$$V(x) \begin{cases} 0 & ; \quad x < 0 \\ V_0 & ; \quad x \geq 0 \end{cases} \quad (4.227)$$

Conform mecanicii clasice, particula va fi reflectată pe treapta de potențial dacă $E < V_0$ și va trece peste aceasta dacă $E > V_0$. Deoarece potențialul este independent de timp, mișcarea particulei de energie E este descrisă de funcții de forma:

$$\Psi(x, t) = u(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (4.228)$$

unde $u(x)$ este soluție a ecuației Schrödinger atemporale. Vom considera două cazuri:

1) Energia particulei este mai mică decât înălțimea treptei de potențial $E < V_0$.

Ecuția Schrödinger în cele două regiuni este:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}Eu(x) = 0 \quad \text{pentru} \quad x < 0 \quad (4.229)$$

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E]u(x) = 0 \quad \text{pentru} \quad x \geq 0 \quad (4.230)$$

Notând:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (4.231)$$

$$k_2 = \sqrt{\left[\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right]} \quad (4.232)$$

se obțin ecuațiile:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k_1^2 u(x) = 0 \quad \text{pentru } x < 0 \quad (4.233)$$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} - k_2^2 u(x) = 0 \quad \text{pentru } x \geq 0 \quad (4.234)$$

Soluția $u(x)$ a ecuației Schrödinger atemporale are două expresii pe cele două intervale:

$$u_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{pentru } x < 0 \quad (4.235)$$

$$u_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{pentru } x \geq 0 \quad (4.236)$$

Pentru ca funcția $u_2(x)$ să fie mărginită este necesar ca $C = 0$.
Rezultă:

$$u_2(x) = De^{-k_2x} \quad \text{pentru } x \geq 0 \quad (4.237)$$

Funcția $u(x)$ precum și prima sa derivată trebuie să fie continue în punctul $x = 0$:

$$u_1(0) = u_2(0) \quad (4.238)$$

$$\left. \frac{du_1(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{du_2(x)}{dx} \right|_{x=0} \quad (4.239)$$

Ținând cont de relațiile (4.235) și (4.237) se obține sistemul de ecuații:

$$A + B = D \quad (4.240)$$

$$A - B = i \frac{k_2}{k_1} D \quad (4.241)$$

Condițiile (4.239) și (4.239) sunt îndeplinite pentru toate valorile energiei E astfel că spectrul este continuu. Din (4.240) și (4.241) rezultă:

$$A = \frac{k_1 + ik_2}{2k_1} D \quad (4.242)$$

$$B = \frac{k_1 - ik_2}{2k_1} D \quad (4.243)$$

Densitatea de curent de probabilitate în regiunea $x < 0$ este:

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left[u_1^*(x) \frac{du_1(x)}{dx} - u_1(x) \frac{du_1^*(x)}{dx} \right] = \frac{\hbar}{m} k_1 [|A|^2 - |B|^2] \quad (4.244)$$

Revenind la funcția $u_1(x)$ dată de relația (4.235) se observă că primul termen Ae^{ik_1x} , în zona $x < 0$ corespunde unei unde plane incidente, iar al doilea termen Be^{-ik_1x} corespunde unei unde plane reflectate. Astfel, densitatea curentului de probabilitate poate fi descompusă în doi termeni:

a) densitatea curentului de probabilitate incident:

$$j_{inc} = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \quad (4.245)$$

b) densitatea curentului de probabilitate reflectat:

$$j_{ref} = \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \quad (4.246)$$

Coeficientul de reflexie, ținând cont de (4.245), (4.246), (4.242) și (4.243) este:

$$R = \frac{j_{ref}}{j_{inc}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad (4.247)$$

Densitatea de curent de probabilitate în regiunea $x > 0$ este:

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left[u_2^*(x) \frac{du_2(x)}{dx} - u_2(x) \frac{du_2^*(x)}{dx} \right] = 0 \quad (4.248)$$

Rezultă că are loc o reflexie totală pe treapta de potențial. Rezultatul este în concordanță cu cel obținut în mecanica clasică. Totuși în regiunea $x > 0$ există o probabilitate de localizare a particulei care scade exponențial cu distanța:

$$P(x) = |u_2|^2 = D^2 e^{-2k_2 x} \quad (4.249)$$

Fenomenul poartă numele de penetrare a treptei de potențial și este în contradicție cu predicțiile mecanicii clasice. Fenomenul este de natură pur cuantică.

2) Energia particulei este mai mare decât înălțimea treptei de potențial $E > V_0$

Ecuția Schrödinger în cele două regiuni este dată ca și în cazul anterior de expresiile (4.229) și (4.230). Notând:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (4.250)$$

$$k_2 = \sqrt{\left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \right]} \quad (4.251)$$

acestea devin:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k_1^2 u(x) = 0 \quad \text{pentru } x < 0 \quad (4.252)$$

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + k_2^2 u(x) = 0 \quad \text{pentru } x \geq 0 \quad (4.253)$$

Soluțiile ecuației în cele două regiuni sunt:

$$u_1 = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \quad \text{pentru } x < 0 \quad (4.254)$$

$$u_2 = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x} \quad \text{pentru } x \geq 0 \quad (4.255)$$

unde A, B, C, D sunt constante de integrare. Vom considera că particula vine din regiunea negativă a axei Ox . Din acest motiv în regiunea $x > 0$ există doar undă transmisă, astfel că $D = 0$.

Condițiile de continuitate sunt cele puse în cazul anterior: (4.238) și (4.239). Rezultă sistemul de ecuații:

$$A + B = 0 \quad (4.256)$$

$$k_1(A - B) = Ck_2 \quad (4.257)$$

Exprimăm constantele B și C în funcție de A .

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad (4.258)$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \quad (4.259)$$

Densitatea curentului de probabilitate în cele două regiuni este:

a) în regiunea $x < 0$

$$j_1 = \frac{\hbar k_1}{m} [|A|^2 - |B|^2] \quad (4.260)$$

b) în regiunea $x \geq 0$

$$j_2 = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \quad (4.261)$$

Dacă se ține cont de relațiile (4.258) și (4.259) rezultă că $j_1 = j_2$ adică densitatea curentului de probabilitate este aceeași de-a lungul întregii axe Ox. Ca și în cazul anterior se poate defini densitatea curentului de probabilitate incident:

$$j_{inc} = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \quad (4.262)$$

reflectat:

$$j_{ref} = \frac{\hbar k_2}{m} |B|^2 \quad (4.263)$$

și transmis:

$$j_{trans} = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \quad (4.264)$$

Coeficientul de reflexie este:

$$R = \frac{j_{ref}}{j_{inc}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{\left[1 - \left(1 - \frac{V_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2}{\left[1 + \left(1 - \frac{V_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2} \quad (4.265)$$

Coeficientul de transmisie este:

Figura 4.7: Bariera de potențial

$$T = \frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4 \left(1 - \frac{V_0}{E}\right)}{\left[1 + \left(1 - \frac{V_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2} \quad (4.266)$$

Se observă că:

$$R + T = 1 \quad (4.267)$$

Se constată că o particulă cu energie mai mare decât înălțimea treptei de potențial se poate reflecta ($R \neq 0$), transmisia ei fiind $T < 1$. Acest rezultat diferă de cel clasic, conform căruia o particulă având $E > V_0$ va trece sigur peste o treaptă de potențial.

Dacă particula vine dinspre treapta de potențial se găsește că noii coeficienți de reflexie și transmisie sunt egali cu cei găsiți în cazul anterior. Aceasta înseamnă că reflexia parțială nu este datorată unei creșteri în valoare a energiei potențiale în direcția mișcării ci este datorată saltului energiei potențiale.

4.4.4 Bariera de potențial

Vom considera mișcarea unei particule în cazul în care energia potențială are forma unei bariere dreptunghiulare (Fig. 4.7).

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pentru } x < 0 \\ V_0 & \text{pentru } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{pentru } x > a \end{cases} \quad (4.268)$$

Conform mecanicii clasice, o particulă de energie totală E , incidentă pe această barieră, va fi reflectată întotdeauna dacă $E < V_0$ și transmisă dacă $E > V_0$. În regiunile $x < 0$ și $x > a$ particula este liberă iar ecuația Schrödinger este:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E u(x) = 0 \quad (4.269)$$

Punând $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ soluțiile ecuației în cele două regiuni sunt:

$$u_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad \text{pentru } x < 0 \quad (4.270)$$

$$u_3(x) = C e^{ik_1 x} \quad \text{pentru } x > a \quad (4.271)$$

Soluția în regiunea $x > a$ nu conține undă reflectată deoarece am considerat că particula vine din regiunea negativă spre bariera de potențial.

Densitatea curentului de probabilitate în regiunea $x < 0$ este:

$$j_1 = j_{inc} - j_{refl} = \frac{\hbar k_1}{m} [|A|^2 - |B|^2] \quad (4.272)$$

și în regiunea cu $x > a$ este:

$$j_3 = \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2 \quad (4.273)$$

Considerăm cazul în care energia particulei este mai mică decât înălțimea barierei de potențial, adică $E < V_0$. Ecuația Schrödinger în intervalul $x \in (0, a)$ este:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E] u(x) = 0 \quad (4.274)$$

Notând cu:

$$k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad (4.275)$$

soluția ecuației în această regiune este:

$$u_2(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x} \quad (4.276)$$

Din condițiile de continuitate și derivabilitate puse în punctul $x = 0$

$$u_1(0) = u_2(0) \quad (4.277)$$

$$\left. \frac{du_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{du_2}{dx} \right|_{x=0} \quad (4.278)$$

rezultă ecuațiile:

$$A + B = F + G \quad (4.279)$$

$$ik_1(A - B) = k_2(F - G) \quad (4.280)$$

Din condițiile de continuitate și derivabilitate puse în punctul $x = a$:

$$u_2(a) = u_3(a) \quad (4.281)$$

$$\left. \frac{du_2}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{du_3}{dx} \right|_{x=a} \quad (4.282)$$

rezultă ecuațiile:

$$Fe^{k_2a} + Ge^{-k_2a} = Ce^{ik_1a} \quad (4.283)$$

$$k_2(Fe^{k_2a} - Ge^{-k_2a}) = iCk_1e^{ik_1a} \quad (4.284)$$

Din (4.279) și (4.280) se obține:

$$F = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) A + \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) B \quad (4.285)$$

$$G = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) A + \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) B \quad (4.286)$$

Din 4.283 și 4.284 rezultă:

$$F = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) Ce^{ik_1a} e^{-k_2a} \quad (4.287)$$

$$G = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) C e^{ik_1 a} e^{k_2 a} \quad (4.288)$$

Din (4.285) și (4.286) se obține:

$$\left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) C e^{ik_1 a} e^{-k_2 a} = \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) A + \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) B \quad (4.289)$$

Din (4.286) și (4.287) se obține:

$$\left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) C e^{ik_1 a} e^{k_2 a} = \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) A + \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) B \quad (4.290)$$

Coeficientul de transmisie este:

$$T = \frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (4.291)$$

Din ecuațiile (4.289) și (4.290) se va calcula raportul C/A :

$$\frac{C}{A} = \frac{4ik_1 k_2}{(k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - [(k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a}]} e^{-ik_1 a}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{4ik_1 k_2}{k_2^2 (e^{-k_2 a} - e^{k_2 a}) - k_1^2 (e^{-k_2 a} - e^{k_2 a}) + 2ik_1 k_2 (e^{-k_2 a} + e^{k_2 a})} e^{-ik_1 a}$$

Vom exprima acest raport cu ajutorul funcțiilor hiperbolice:

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{-(k_2^2 - k_1^2) \sinh k_2 a + 2ik_1 k_2 \cosh k_2 a} \quad (4.292)$$

Atunci, coeficientul de transmisie este:

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sinh^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2 \cosh^2 k_2 a}$$

Deoarece $1 + \sinh^2 k_2 a = \cosh^2 k_2 a$

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_2^2 + k_1^2)^2 \sinh^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} \quad (4.293)$$

Deoarece:

$$k_1^2 + k_2^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$k_1^2 k_2^2 = \frac{4m^2}{\hbar^4} E(V_0 - E)$$

coeficientul de transmisie pentru bariera de potențial devine:

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 k_2 a + 4E(V_0 - E)} \quad (4.294)$$

Coeficientul de reflexie este:

$$R = 1 - T = \frac{V_0^2 \sinh^2 k_2 a}{V_0^2 \sinh^2 k_2 a + 4E(V_0 - E)} \quad (4.295)$$

Ecuțiile de mai sus conduc la concluzia că o particulă are o anumită probabilitate de a "trece printr-o barieră". Din punct de vedere al mecanicii clasice, bariera de potențial este complet opacă. Efectul de penetrare a unei bariere de către o particulă este numit efect tunel. Pe baza acestui efect este explicată emisie α din nuclee precum și emisie autoelectronică.

În cazul când $E \ll V_0$

$$T \simeq \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 k_2 a + 4E(V_0 - E)} \simeq \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 k_2 a}$$

Când $k_2 a \gg 1$:

$$\sinh^2 k_2 a \simeq \frac{e^{2k_2 a}}{4} \gg 1$$

Coeficientul de transmisie devine:

Figura 4.8: Barieră de potențial de o formă oarecare

$$T \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2k_2 a} \ll 1 \quad (4.296)$$

Cazul unei bariere de potențial de o formă arbitrară

Considerăm o barieră de potențial ca în Fig.4.8.

Împărțim domeniul în intervale $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ astfel încât să considerăm trecerea particulei printr-o succesiune de bariere de potențial. Alegem Δx_i astfel încât:

$$\sqrt{\frac{2m(V_i - E)}{h^2}} \Delta x_i \gg 1 \quad (4.297)$$

Astfel, coeficientul de transmisie pentru bariera de lățime Δx_i poate fi aproximat cu:

$$T_i = 16 \frac{E(V_i - E)}{V_i^2} e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{8m(V_i(x) - E)} \Delta x_i}$$

Exponențiala este factorul predominant, astfel încât:

$$T_i \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \sqrt{8m(V_i(x) - E)} \Delta x_i\right) \quad (4.298)$$

Atunci

$$T = \prod_i T_i = \prod_i e^{-\frac{1}{\hbar} \sqrt{8m(V_i(x) - E)} \Delta x_i} = e^{-\frac{1}{\hbar} \sum_i \sqrt{8m(V_i(x) - E)} \Delta x_i}$$

Făcând ca numărul de intervale în care este împărțit domeniul barierei să tindă spre infinit în relația de mai sus suma se înlocuiește cu o integrală. Se obține:

$$T = T_0 \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{8m(V(x) - E)} dx \right) \quad (4.299)$$

unde T_0 este constantă.

4.5 Oscilatorul armonic liniar

Oscilatorul liniar este un sistem ideal care constă dintr-o particulă de masă m , de dimensiuni neglijabile, ce se poate deplasa sub influența unei forțe elastice dirijată după o axă:

$$F = -kx \quad (4.300)$$

unde k este constanta de elasticitate. Deoarece forțele elastice sunt conservative ele derivă dintr-o energie potențială de forma:

$$V(x) = \frac{kx^2}{2} \quad (4.301)$$

O astfel de energie potențială este foarte importantă deoarece poate fi utilizată în aproximarea energiilor potențiale în vecinătatea unei poziții de echilibru stabil. În poziția de echilibru stabil energia potențială a sistemului este minimă. Considerând poziția de echilibru ca fiind originea sistemului de coordonate se dezvoltă $V(x)$ în serie Taylor în jurul acestui punct:

$$V(x) = V(0) + x \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=0} + \frac{1}{2} x^2 \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=0} \quad (4.302)$$

Deoarece în $x = 0$ energia potențială are un minim, atunci $\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=0} = 0$. Alegând $V(0) = 0$ (prin aceasta se fixează nivelul de zero al energiei potențiale) atunci (4.302) devine:

$$V(x) = \frac{1}{2} x^2 \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=0} \quad (4.303)$$

adică energia potențială este de forma dată de (4.301).

Ecuția Schrödinger atemporală este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} u = Eu \quad (4.304)$$

Punând $k = m\omega^2$ ecuația (4.304) devine:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) u = 0 \quad (4.305)$$

Efectuăm schimbarea de variabilă:

$$\xi = \beta x \quad (4.306)$$

Ecuția (4.305) devine:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2 \beta^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2 \beta^4} \xi^2 \right) u = 0 \quad (4.307)$$

Punem condiția ca valoarea coeficientului lui ξ^2 să fie 1. Rezultă:

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (4.308)$$

Notăm:

$$\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2 \beta^2} = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (4.309)$$

Ecuția (4.307) devine:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) u = 0 \quad (4.310)$$

Pentru studierea comportării asimptotice (pentru valori mari ale variabilei x , și deci și a variabilei ξ), notăm $\xi^2 = v$. Astfel:

$$\frac{du}{d\xi} = \frac{du}{dv} \frac{dv}{d\xi} = 2\xi \frac{du}{dv} = 2\sqrt{v} \frac{du}{dv}$$

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} = 2 \frac{du}{dv} + 4v \frac{d^2 u}{dv^2}$$

Ecuția (4.310) devine:

$$4v \frac{d^2 u}{dv^2} + 2 \frac{du}{dv} + (\lambda - v)u = 0 \quad (4.311)$$

sau prin împărțire la v se obține:

$$4 \frac{d^2 u}{dv^2} + \frac{2}{v} \frac{du}{dv} + \left(\frac{\lambda}{v} - 1 \right) u = 0 \quad (4.312)$$

Vom considera această ecuație în regiunea asimptotică pentru x foarte mare. Atunci și variabila v este foarte mare astfel că vom neglija termenii ce-l conțin pe v la numitor. În această regiune, ecuația devine:

$$4 \frac{d^2 u}{dv^2} - u = 0 \quad (4.313)$$

Ecuația are soluția:

$$u(v) = Ae^{-\frac{v}{2}} + Be^{\frac{v}{2}}$$

Deoarece soluția trebuie să fie mărginită $B = 0$ și rezultă:

$$u = Ae^{-\frac{v}{2}} = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (4.314)$$

Din acest motiv pentru ecuația (4.312) vom căuta o soluție de tipul:

$$u(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi) \quad (4.315)$$

Atunci:

$$\frac{du}{d\xi} = -\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi) + e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{dH(\xi)}{d\xi}$$

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} = (\xi^2 - 1)e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi) - 2\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{dH(\xi)}{d\xi} + e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2}$$

Rezultă astfel ecuația pentru $H(\xi)$:

$$\frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + (\lambda - 1)H(\xi) = 0 \quad (4.316)$$

Deoarece energia potențială este o funcție simetrică $V(x) = V(-x)$, funcțiile proprii trebuie să aibă o paritate bine determinată. Vom discuta cele două cazuri separat.

Alegem pentru soluția pară $H(\xi)$ o serie care conține numai puteri pare ale lui ξ :

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^{2k} \quad (4.317)$$

Se înlocuiește (4.317) în (4.316) și se obține:

$$\sum_{k=0}^{\infty} 2k(2k-1)a_k \xi^{2(k-1)} - \sum_{k=0}^{\infty} 4ka_k \xi^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda-1)a_k \xi^{2k} = 0 \quad (4.318)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} [2(k+1)(2k+1)a_{k+1} - (4k+1-\lambda)a_k] \xi^{2k} = 0 \quad (4.319)$$

Ecuația este satisfăcută dacă coeficienții fiecărei puteri se anulează. Se obține astfel o relație de recurență între coeficienții seriei:

$$a_{k+1} = \frac{4k+1-\lambda}{2(k+1)(2k+1)} a_k \quad (4.320)$$

Dacă $a_0 \neq 0$, toți coeficienții pot fi determinați. Problema care se pune este aceea a convergenței seriei. Dacă seria are un număr infinit de termeni se observă că pentru valori mari ale lui k

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{4k+1-\lambda}{2(k+1)(2k+1)} \rightarrow \frac{1}{k+1} \quad (4.321)$$

Seria are în regiunea asimptotică o comportare asemănătoare cu cea a seriei care se obține prin dezvoltarea funcției $\exp \xi^2$:

$$e^{\xi^2} = 1 + \frac{\xi^2}{1!} + \frac{\xi^4}{2!} + \dots + \frac{\xi^{2k}}{k!} + \dots$$

deoarece raportul coeficienților puterilor $\xi^{2(k+1)}$ și ξ^{2k} este tot $1/(k+1)$.

Atunci, în domeniul asimptotic soluția ar fi de forma:

$$u(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} e^{\xi^2} = e^{\frac{\xi^2}{2}} \quad (4.322)$$

și nu ar mai îndeplini condiția de mărginire.

Din acest motiv este necesar ca la un moment dat unul din termenii seriei să devină nul. Aceasta face ca restul termenilor seriei să fie nuli. În acest fel seria se transformă într-un polinom. Fie N ordinul ultimului termen al seriei diferit de zero și $N + 1$ ordinul primului termen nul. Pentru aceasta este necesar ca:

$$4N + 1 - \lambda = 0$$

Rezultă:

$$\lambda = 4N + 1 \quad ; \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.323)$$

Astfel, fiecărei valori a lui N îi corespunde o valoare pară a funcției $H(\xi)$.

Pentru soluția impară se alege:

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k \xi^{2k+1} \quad (4.324)$$

care înlocuită în (4.316) dă:

$$\sum_{k=0}^{\infty} [2(k+1)(2k+3)b_{k+1} - (4k+3-\lambda)b_k] \xi^{2k+1} = 0 \quad (4.325)$$

Rezultă relația între coeficienți:

$$b_{k+1} = \frac{4k+3-\lambda}{2(k+1)(2k+3)} b_k \quad (4.326)$$

Ca și în cazul anterior pentru a fi realizată condiția de mărginire este nevoie ca seria să devină un polinom, adică de la un anumit grad încolo coeficienții să fie nuli. Considerând că pentru $k = N$ se obține ultimul termen diferit de zero, este necesar ca

$$\lambda = 4N + 3 \quad ; \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.327)$$

Pentru aceste valori ale lui λ soluția ecuației Schrödinger este impară. Din relațiile (4.323) și (4.327) rezultă că λ trebuie să fie de forma:

$$\lambda = 2n + 1 \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.328)$$

Paritatea soluției este dată de paritatea numărului n . Ținând cont de expresia lui λ dată de relația (4.309) se obțin următoarele valori permise pentru energia oscilatorului armonic:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (4.329)$$

Nivelele energetice sunt echidistante:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega \quad (4.330)$$

Chiar pentru $n = 0$ oscilatorul armonic liniar are o energie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ diferită de zero. Valoarea acestei energii a nivelului fundamental poartă denumirea de energie de zero a oscilatorului armonic liniar. Această energie este corelată direct cu principiul de nedeterminare Heisenberg. În mecanica clasică energia cea mai joasă ar fi zero care corespunde particulei aflată în origine. Acest lucru este imposibil conform relațiilor de nedeterminare Heisenberg.

Funcțiile proprii ale energiei sunt de forma:

$$u(\xi) = N_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (4.331)$$

unde $H_n(\xi)$ este un polinom de gradul n care satisface ecuația:

$$\frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + 2nH(\xi) = 0 \quad (4.332)$$

Polinoamele care satisfac ecuația (4.332) poartă numele de polinoame Hermite. Ele sunt definite până la o constantă multiplicativă arbitrară. Constanta se alege în așa fel încât cea mai mare putere ξ^{2n} ce apare în $H(\xi)$ să aibă coeficientul 2^n . Există mai multe moduri de a determina polinoamele Hermite.

a) Polinoamele Hermite sunt generate astfel:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n (e^{-\xi^2})}{d\xi^n} \quad (4.333)$$

Se obțin polinoamele:

$$H_0(\xi) = 1$$

$$H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$

$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

b) Polinoamele Hermite pot fi determinate pornind de la funcția generatoare:

$$S(s, \xi) = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n \quad (4.334)$$

Aceasta înseamnă că dacă funcția $\exp(-s^2 + 2s\xi)$ se dezvoltă în serie după puterile lui s , coeficienții puterilor lui s sunt $1/n!$ din polinoamele Hermite.

a) Pentru calculul diferitelor polinoame Hermite, se poate utiliza o formulă de recurență. Astfel:

$$H_{n+1}(\xi) = (-1)^{n+1} e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(e^{-\xi^2} \right) = -(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(e^{-\xi^2} \right)$$

$$\frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(e^{-\xi^2} \right) = \frac{d^n}{d\xi^n} \left(\frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2} \right) = -2 \frac{d^n}{d\xi^n} \left(\xi e^{-\xi^2} \right)$$

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:

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2} \right) - 2n(-1)^n \left[\frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} \left(e^{-\xi^2} \right) \right] e^{\xi^2}$$

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \quad (4.335)$$

Funcțiile proprii ale ecuației Schrödinger posedă proprietatea de ortogonalitate în intervalul $(-\infty, +\infty)$.

Pornind de la expresia funcțiilor proprii ale energiei dată de formula (4.331) unde $\xi = \beta x$ atunci:

$$u(x) = N_n e^{-\frac{\beta x^2}{2}} H_n(\beta x) \quad (4.336)$$

Condiția de normare este:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u_n(\beta x)|^2 dx = 1 \quad (4.337)$$

Aceasta înseamnă că:

$$\frac{|N_n|^2}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) d\xi = 1 \quad (4.338)$$

Considerăm două funcții generatoare ale polinoamelor Hermite:

$$S(s, \xi) = e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(\xi) \quad (4.339)$$

$$S(t, \xi) = e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^m}{m!} H_m(\xi) \quad (4.340)$$

Se înmulțesc relațiile (4.339) și (4.340) și se obține:

$$S(s, \xi)S(t, \xi) = e^{-s^2+2s\xi} e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{t^m}{m!} H_n(\xi) H_m(\xi) \quad (4.341)$$

Se înmulțește egalitatea cu $e^{-\xi^2}$ și se integrează între $-\infty$ și ∞ .

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} S(s, \xi)S(t, \xi) d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{t^m}{m!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi \quad (4.342)$$

Integrala din stânga este:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} S(s, \xi) S(t, \xi) d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2 + 2(s+t)\xi - (s+t)^2} e^{2st} d\xi$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} S(s, \xi) S(t, \xi) d\xi = e^{2st} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-s-t)^2} d(\xi-s-t) = e^{2st} \sqrt{\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} S(s, \xi) S(t, \xi) d\xi = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!}$$

Astfel:

$$\sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi \quad (4.343)$$

Rezultă:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi = 0$$

dacă $n \neq m$ și:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (4.344)$$

dacă $n = m$.

Din (4.338) și (4.344) rezultă:

$$N_n = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} \quad (4.345)$$

Vom realiza o comparație a comportării unui oscilator clasic cu energia E și a unui oscilator cuantic cu aceeași energie.

Un oscilator clasic are energia $E = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2}$ unde x_0 reprezintă amplitudinea mișcării. Oscilatorul clasic se deplasează doar între punctele x_0 și $-x_0$. Probabilitatea de a găsi o particulă între coordonatele x și $x + dx$ este egală cu raportul dintre timpul în care particula se află în acel interval și perioadă:

$$P(x) dx = \frac{2dx}{Tv} \quad (4.346)$$

Pentru a exprima această probabilitate vom ține cont că din ecuația de mișcare $x = x_0 \sin \omega t$ și din $v = x_0 \omega \cos \omega t$ rezultă:

$$\frac{x^2}{x_0^2} + \frac{v^2}{x_0^2 \omega^2} = 1 \quad (4.347)$$

Din această relație se află v care se introduce în (4.346) și rezultă:

$$P(x) dx = \frac{1}{\pi \sqrt{x_0^2 - x^2}} dx \quad (4.348)$$

Trecând la variabila $\xi = \beta x$ și ținând cont că:

$$P(x) dx = P(\xi) d\xi$$

densitatea de probabilitate de localizare în variabila ξ este:

$$P(\xi) = \frac{1}{\pi \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2}} \quad (4.349)$$

Pentru a putea reprezenta această densitate de probabilitate trebuie să vedem care este valoarea lui ξ_0 pentru diferitele energii pe care le poate avea oscilatorul cuantic (comparația trebuie făcută între oscilatori care au aceiași energie). Atunci:

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \frac{m \omega^2 x_0^2}{2} = \frac{m \omega^2 \xi_0^2}{2 \beta^2} = \frac{\hbar \omega \xi_0^2}{2}$$

de unde rezultă

$$\xi_0 = \sqrt{2n + 1} \quad (4.350)$$

În Fig. 4.9 sunt reprezentate densitățile de probabilitate funcție de poziția oscilatorului în cazul clasic și cuantic. Astfel, pentru cazul stării fundamentale densitatea de probabilitate cuantică este maximă în $x = 0$, în timp ce particula clasică are densitatea de probabilitate minimă. Pe măsură ce n crește acordul între densitățile de probabilitate clasică și cuantică se îmbunătățește.

Figura 4.9: Comparație între densitatea de probabilitate clasică și cuantică pentru diverse valori ale lui n ($n = 0$ cazul a, $n = 1$ cazul b, $n = 2$ cazul c, $n = 3$ cazul d)

4.6 Momentul cinetic

4.6.1 Momentul cinetic orbital

Să considerăm o particulă de masă m . Se notează cu \vec{p} impulsul ei și cu \vec{r} vectorul de poziție în raport cu originea fixă O . În mecanica clasică momentul cinetic se definește astfel:

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \quad (4.351)$$

În mecanica cuantică operatorul atașat momentului cinetic orbital se notează cu \vec{L} ; componentele sale se obțin înlocuind variabilele clasice x, y, z, p_x, p_y, p_z , cu operatorii atașați acestora. Se obține:

$$L_x = YP_z - ZP_y \rightarrow L_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (4.352)$$

$$L_y = ZP_x - XP_z \rightarrow L_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (4.353)$$

$$L_z = XP_y - YP_x \rightarrow L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (4.354)$$

Pe scurt putem nota:

$$\vec{L} = -i\hbar(\vec{r} \times \nabla) \quad (4.355)$$

Pătratul momentului cinetic $l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$ îi corespunde operatorul:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (4.356)$$

În cazul aplicațiilor este nevoie să exprimăm operatorul moment cinetic în coordonate sferice (r, θ, φ) :

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (4.357)$$

Rezultă:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (4.358)$$

$$\theta = \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \quad (4.359)$$

$$\varphi = \arctan \frac{y}{x} \quad (4.360)$$

Atunci:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Dar din (4.358), (4.359), (4.360) rezultă:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{x}{r} \quad (4.361)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{xz}{r^2 \sqrt{x^2 + y^2}} = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \quad (4.362)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \quad (4.363)$$

Atunci:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

În același mod se calculează și celelalte derivate parțiale $\partial/\partial y$ și $\partial/\partial z$.
Rezultă:

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (4.364)$$

$$L_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (4.365)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (4.366)$$

În plus operatorul pătratului momentului cinetic este:

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (4.367)$$

Se observă că operatorii L_x , L_y , L_z sunt operatori unghiulari, care nu acționează asupra coordonatei radiale. Prin urmare acești operatori comută cu orice operator care depinde de r :

$$[L_x, F(r)] = [L_y, F(r)] = [L_z, F(r)] = \left[\vec{L}, F(r) \right] = 0$$

Relațiile dintre componente

Vom arăta că operatorii atașați componentelor momentului cinetic nu comută între ei:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (4.368)$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad (4.369)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (4.370)$$

sau:

$$\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L} \quad (4.371)$$

Verificăm prima relație. Pentru aceasta vom ține cont de relațiile de comutare dintre operatorii de poziție, operatorii impuls și operatorii poziție și impuls. În plus ținem cont de identitățile:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

Astfel:

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z]$$

$$[L_x, L_y] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z]$$

Calculăm pe rând cei patru comutatori:

$$[yp_z, zp_x] = y[p_z, zp_x] + [y, zp_x]p_z = yz[p_z, p_x] + y[p_z, z]p_x = -i\hbar yp_x$$

$$[yp_z, xp_z] = y[p_z, xp_z] + [y, xp_z]p_z = yx[p_z, p_z] + y[p_z, x]p_z = 0$$

$$[zp_y, zp_x] = z[p_y, zp_x] + [z, zp_x]p_y = z[z, p_x]p_y + z[p_y, z]p_x = 0$$

$$[zp_y, xp_z] = z[p_y, xp_z] + [z, xp_z]p_y = x[z, p_z]p_y + [z, x]p_zp_y = i\hbar xp_y$$

Astfel:

$$[L_x, L_y] = i\hbar[xp_y - yp_x] = i\hbar L_z$$

În plus:

$$[L_x, L^2] = [L_y, L^2] = [L_z, L^2] = 0$$

Vom demonstra prima dintre aceste relații:

$$[L_x, L^2] = [L_x, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_x, L_x^2] + [L_x, L_y^2] + [L_x, L_z^2]$$

$$[L_x, L^2] = L_x[L_x, L_x] + [L_x, L_x]L_x + L_y[L_x, L_y] + [L_x, L_y]L_y + L_z[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_z$$

$$[L_x, L^2] = i\hbar L_y L_z + i\hbar L_z L_y - i\hbar L_z L_y - i\hbar L_y L_z = 0$$

În deducerea ultimelor relații nu s-a făcut apel la forma explicită a operatorilor L_x, L_y, L_z ci s-au folosit doar relațiile de comutare dintre aceștia.

Din relațiile anterioare rezultă că pot fi găsite funcțiile proprii comune ale lui L^2 și componentei L_z .

Valori și funcții proprii pentru L^2 și L_z

Problema cu valori proprii asociată operatorului L^2 este:

$$L^2 Y = \lambda \hbar^2 Y \quad (4.372)$$

S-a ales această formă deoarece în L^2 apare factorul \hbar^2 . Numărul λ este un număr real dimensional. Ecuația care trebuie rezolvată este:

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y - \lambda Y = 0 \quad (4.373)$$

Interesează doar soluțiile care satisfac condițiile de derivabilitate și mărginire. Condiția care operează efectiv este condiția de mărginire a soluțiilor în punctele $\theta = 0$ și $\theta = \pi$, puncte în care coeficienții ecuațiilor sunt singulari. Soluțiile există doar dacă $\lambda = l(l+1)$ cu $l = 0, 1, 2, \dots$ Funcțiile proprii sunt armonicele sferice.

Pentru $m \geq 0$:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = P_{lm}(\cos \theta)\Phi_m(\varphi) \quad (4.374)$$

Indicele m ia valori întregi: $m = 0, 1, 2, \dots, l$.

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (4.375)$$

Notând $w = \cos \theta$

$$P_{lm}(w) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{1}{2^l l!} (1-w^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dw^{l+m}} (w^2-1)^l \quad (4.376)$$

Funcțiile $P_{lm}(W)$ se numesc funcții Legendre asociate.

Pentru cazul în care $m \leq 0$ adică $m = -l, -l+1, \dots, -2, -1$ vom ține cont că:

$$Y_{e,-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{em}^*(\theta, \varphi) \quad (4.377)$$

Am preferat această construcție deoarece se evită apariția unor ambiguități în calculul funcțiilor sferice. Alte proprietăți ale funcțiilor sferice sunt:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi + 2\pi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$Y_{l0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (4.378)$$

unde $P_l(x)$ reprezintă Polinoamele Legendre. Ele pot fi calculate astfel:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (4.379)$$

Sunt valabile următoarele proprietăți de ortonormare:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_{m'}(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'} \quad (4.380)$$

$$\int_0^\pi P_{lm}(\cos \theta) P_{l'm}(\cos \theta) \sin(\theta) d\theta = \delta_{ll'} \quad (4.381)$$

Atunci:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (4.382)$$

Se observă că pentru fiecare valoare proprie $l(l+1)\hbar^2$ există un număr de $2l+1$ funcții proprii independente.

Funcțiile sferice sunt funcții ce formează un sistem ortonormat complet de funcții de variabile θ și φ . Orice funcție ce depinde de θ și φ poate fi dezvoltată în funcție de Y_{lm} .

Deoarece L^2 și L_y comută se constată că $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sunt funcții proprii și pentru L_z :

$$L_z Y_{lm} = -i\hbar \frac{\partial Y_{lm}}{\partial \varphi} = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.383)$$

În concluzie valorile proprii ale operatorului L^2 sunt:

$$l(l+1)\hbar^2 \quad (4.384)$$

unde l poartă denumirea de număr cuantic orbital iar valorile pe care le poate lua sunt numere întregi: $0, 1, 2, 3, \dots$. Aceasta semnifică faptul că mărimea momentului cinetic orbital este cuantificată iar valoarea lui este $\sqrt{l(l+1)}\hbar$.

Valorile proprii ale operatorului L_z sunt $m\hbar$ unde m poartă numele de număr cuantic magnetic și poate lua valorile întregi $0, \pm 1, \dots, \pm l$, adică pentru un l dat există $2l+1$ valori pentru acest număr cuantic. Aceasta semnifică faptul că pe lângă mărimea momentului cinetic este cuantificată și orientarea momentului cinetic (datorită cuantificării proiecției sale pe o axă).

Datorită relațiilor de comutare nu există funcții proprii comune pentru L_x și L_z pentru L_y și L_z . Rezultă că funcțiile proprii definite anterior nu sunt funcții proprii pentru L_x și L_y , dar există un set de funcții proprii comune pentru L^2 și L_z . Echivalența dintre toate direcțiile face posibil să considerăm că valorile proprii ale operatorilor L_x și L_y sunt tot $m\hbar$.

4.6.2 Teoria generală a momentului cinetic

Spunem că operatorul \vec{J} reprezintă un moment cinetic dacă:

a) operatorii J_x, J_y, J_z sunt operatori hermitici și sunt asociați cu observabile reale.

b) este adevărată relația:

$$\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar\vec{J} \quad (4.385)$$

Definind operatorul pătrat al momentului cinetic $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ este adevărată relația de comutare:

$$[J_z, J^2] = 0 \quad (4.386)$$

fapt ce arată că operatorii J_z și J^2 vor avea un set comun de funcții proprii pe care le vom nota cu $\Psi_{\lambda m}$:

$$J^2\Psi_{\lambda m} = \lambda\hbar^2\Psi_{\lambda m} \quad (4.387)$$

$$J_z\Psi_{\lambda m} = m\hbar\Psi_{\lambda m} \quad (4.388)$$

Valorile λ și m sunt legate între ele. Astfel:

$$J^2\Psi_{\lambda m} = J_x^2\Psi_{\lambda m} + J_y^2\Psi_{\lambda m} + J_z^2\Psi_{\lambda m}$$

Atunci:

$$(\Psi_{\lambda m}, J^2\Psi_{\lambda m}) = (\Psi_{\lambda m}, J_x^2\Psi_{\lambda m}) + (\Psi_{\lambda m}, J_y^2\Psi_{\lambda m}) + (\Psi_{\lambda m}, J_z^2\Psi_{\lambda m})$$

$$(\Psi_{\lambda m}, \lambda\hbar^2\Psi_{\lambda m}) = (J_x\Psi_{\lambda m}, J_x\Psi_{\lambda m}) + (J_y\Psi_{\lambda m}, J_y\Psi_{\lambda m}) + (J_z\Psi_{\lambda m}, J_z\Psi_{\lambda m})$$

și:

$$\lambda\hbar^2|\Psi_{\lambda m}|^2 \geq |J_z\Psi_{\lambda m}|^2 = m^2\hbar^2|\Psi_{\lambda m}|^2$$

Rezultă:

$$\lambda \geq m^2 \quad (4.389)$$

Definim operatorii:

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad (4.390)$$

$$J_- = J_x - iJ_y \quad (4.391)$$

unul fiind adjunctul celuilalt $J_+ = J_-^\dagger$, sau $J_- = J_+^\dagger$

Există o serie de relații pe care le satisfac acești operatori:

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+ \quad (4.392)$$

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_- \quad (4.393)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (4.394)$$

$$[J^2, J_\pm] = 0 \quad (4.395)$$

Vom demonstra relația (4.392):

$$[J_z, J_+] = [J_z, J_x + iJ_y] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + i(-i\hbar J_x)$$

$$[J_z, J_+] = J_x + iJ_y$$

Alte relații îndeplinite de acești operatori sunt:

$$J^2 - J_z^2 = J_+ J_- - \hbar J_z \quad (4.396)$$

$$J^2 - J_z^2 = J_- J_+ + \hbar J_z \quad (4.397)$$

Vom demonstra relația (4.396):

$$J^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2$$

$$J^2 - J_z^2 = J_x^2 - iJ_x J_y + iJ_x J_y + J_z^2 - iJ_y J_x + iJ_y J_x$$

$$J^2 - J_z^2 = J_x(J_x - iJ_y) + iJ_y(J_x - iJ_y) + i(J_xJ_y - J_yJ_x)$$

$$J^2 - J_z^2 = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) + i[J_x, J_y] = J_+J_- - \hbar J_z$$

Deoarece $[J_z, J_+] = \hbar J_+$, atunci:

$$J_zJ_+ - J_+J_z = \hbar J_+$$

și:

$$J_zJ_+ = J_+J_z + \hbar J_+$$

$$J_zJ_+\Psi_{\lambda m} = J_+J_z\Psi_{\lambda m} + \hbar J_+\Psi_{\lambda m} = J_+m\hbar\Psi_{\lambda m} + \hbar J_+\Psi_{\lambda m}$$

$$J_zJ_+\Psi_{\lambda m} = (m+1)\hbar J_+\Psi_{\lambda m} \quad (4.398)$$

Astfel, $J_+\Psi_{\lambda m}$ este o funcție proprie a operatorului J_z căreia îi corespunde valoarea proprie $(m+1)\hbar$. Din acest motiv operatorul poartă numele de operator de creștere. În mod analog se demonstrează că:

$$J_zJ_-\Psi_{\lambda m} = (m-1)\hbar J_-\Psi_{\lambda m} \quad (4.399)$$

Astfel, $J_-\Psi_{\lambda m}$ este o funcție proprie a operatorului J_z căreia îi corespunde valoarea proprie $(m-1)\hbar$. Din acest motiv operatorul poartă numele de operator de descreștere.

$$J^2J_{\pm}\Psi_{\lambda m} = J_{\pm}J^2\Psi_{\lambda m} = \lambda\hbar^2J_{\pm}\Psi_{\lambda m} \quad (4.400)$$

deoarece $[J^2, J_{\pm}] = 0$. Atunci, $J_{\pm}\Psi_{\lambda m}$ este o funcție proprie a lui J^2 corespunzătoare valorii proprii $\lambda\hbar^2$ și a operatorului J_z corespunzătoare valorii proprii $(m+1)\hbar$.

Relația $m^2 \leq \lambda$ arată că trebuie să existe o valoare maximă a lui m pe care o vom nota cu m_{\max} pentru care:

$$J_+\Psi_{\lambda m_{\max}} = 0 \quad (4.401)$$

Atunci $(m_{\max} + 1)^2 \geq 0$. Trebuie să existe și o valoare minimă a lui m notată cu m_{\min} pentru care:

$$J_- \Psi_{\lambda m_{\min}} = 0 \quad (4.402)$$

Atunci: $(m_{\min} - 1)^2 \geq 0$

Aplicăm operatorul J_- relației (4.401) și ținem cont de $J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$ care rezultă din (4.397):

$$J_- J_+ \Psi_{\lambda m_{\max}} = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) \Psi_{\lambda m_{\max}} = \hbar^2 (\lambda - m_{\max}^2 - m_{\max}) \Psi_{\lambda m_{\max}} = 0$$

Rezultă:

$$\lambda = m_{\max} (m_{\max} + 1) \quad (4.403)$$

Aplicând apoi operatorul J_+ relației (4.403) rezultă:

$$\lambda = m_{\min} (m_{\min} - 1) \quad (4.404)$$

Din relațiile (4.403) și (4.404) rezultă:

$$m_{\max} = -m_{\min}$$

Notăm cu $j = m_{\max}$ și $-j = m_{\min}$. Atunci valoarea lui λ se scrie:

$$\lambda = j(j + 1) \quad (4.405)$$

Dacă operatorul J^2 admite valorile proprii $j(j + 1) \hbar^2$ atunci operatorul J_z admite mai multe valori proprii care încep de la valoarea $-j\hbar$ și ajung la valoarea $j\hbar$ din \hbar în \hbar . Acest lucru este posibil numai dacă j este un număr întreg sau semiîntreg. Pentru un j fixat numărul m poate lua $2j + 1$ valori:

$$-j, -j + 1, -j + 2, \dots, j - 2, j - 1, j$$

În continuare vom discuta modul în care acționează operatorii de creștere și de descreștere. Deoarece:

$$J^2 J_- \Psi_{jm} = j(j + 1) \hbar^2 J_- \Psi_{jm}$$

și $J_- \Psi_{\lambda m} \neq 0$ este o funcție proprie operatorului J_z corespunzătoare valorii proprii $(m - 1) \hbar$ atunci putem scrie:

$$J_- \Psi_{jm} = \alpha_{jm} \hbar \Psi_{j(m-1)} \quad (4.406)$$

Astfel:

$$(J_- \Psi_{jm}, J_- \Psi_{jm}) = (\alpha_{jm}^* \hbar \Psi_{j(m-1)}, \alpha_{jm} \hbar \Psi_{j(m-1)}) = |\alpha_{jm}|^2 \hbar^2$$

$$(\Psi_{jm}, J_+ J_- \Psi_{jm}) = (\Psi_{jm}, (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) \Psi_{jm}) = |j(j+1 - m^2 + m)|^2 \hbar^2$$

Rezultă:

$$j(j+1) - m^2 + m = |\alpha_{jm}|^2$$

Atunci:

$$\alpha_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \quad (4.407)$$

Putem scrie:

$$J_- \Psi_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar \Psi_{j(m-1)} \quad (4.408)$$

Pentru a determina și modul de acțiune al operatorului J_+ , vom aplica acest operator egalității (4.408):

$$J_+ J_- \Psi_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar J_+ \Psi_{j(m-1)}$$

$$(J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) \Psi_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar J_+ \Psi_{j(m-1)}$$

$$(j+m)(j-m+1) \hbar^2 \Psi_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar J_+ \Psi_{j(m-1)}$$

$$J_+ \Psi_{j(m-1)} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar \Psi_{jm}$$

Se înlocuiește m cu $m+1$ și se obține:

$$J_+ \Psi_{jm} = \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \hbar \Psi_{j(m+1)} \quad (4.409)$$

4.7 Mișcarea în câmp central de forțe

O particulă se află într-un câmp central de forțe dacă particula are o energie potențială care nu depinde decât de distanța dintre particulă și centrul de forță. Pentru aceasta operatorul energiei este de forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \quad (4.410)$$

Din acest motiv problema are simetrie sferică astfel că operatorul Laplace se scrie în coordonate sferice:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (4.411)$$

sau dacă se ține cont de definiția operatorului pătrat al momentului cinetic:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (4.412)$$

Ecuția cu funcții și valori proprii pentru energie este:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi(\vec{r})}{\partial r} \right) - \frac{L^2 \Psi(\vec{r})}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (4.413)$$

Ținem cont că operatorii L^2 și L_z nu acționează asupra variabilei radiale r . Se observă că:

$$\begin{aligned} [H, L^2] &= 0 \\ [H, L_z] &= 0 \\ [L^2, L_z] &= 0 \end{aligned}$$

Prin urmare, este posibil să se găsească funcțiile proprii comune ale operatorilor H , L^2 și L_z . Deoarece funcțiile proprii comune ale operatorilor L^2 și L_z sunt funcțiile sferice $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ soluțiile ecuației Schrödinger sunt de forma:

$$\Psi(\vec{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.414)$$

Deoarece:

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.415)$$

din ecuația (4.413) se obține:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (4.416)$$

Pentru a o rezolva efectiv, trebuie cunoscută forma lui $V(r)$. Vom face câteva considerații asupra formei potențialului $V(r)$.

Considerăm că la o distanță foarte mare interacția nu se mai simte, astfel că dacă particula se îndepărtează de centrul de forță, forța de interacție devine nulă și putem considera că energia potențială este zero. Aceasta reprezintă de fapt alegerea nivelului de zero al energiei potențiale:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0 \quad (4.417)$$

În vecinătatea centrului de forță ($r \rightarrow 0$) vom considera că:

$$V(r) = -\frac{a}{r^\alpha}, \quad \alpha < 2, \quad (a > 0) \quad (4.418)$$

Fie o particulă care se află într-o mică regiune din jurul centrului de forță $r = 0$ (de rază r_0). Nedeterminarea în valorile coordonatelor este r_0 . În consecință, nedeterminarea în valoarea impulsului este de ordinul $\frac{\hbar}{r_0}$. Atunci, valoarea medie a energiei cinetice în această stare este de ordinul $\frac{\hbar^2}{mr_0^2}$. Valoarea medie a energiei potențiale este $-\frac{a}{r^\alpha}$.

Presupunem $\alpha > 2$. Suma $\frac{\hbar^2}{mr_0^2} - \frac{a}{r_0^\alpha}$ care reprezintă energia medie ia valori negative, care în modul pot fi arbitrar de mari (energia tinde la minus infinit) când $r \rightarrow 0$. Aceasta înseamnă că și valorile proprii ale operatorului energie pot fi arbitrar de mari. Mișcarea unei particule ce corespunde unei valori $|E|$ arbitrar de mari este localizată într-o mică regiune a spațiului din jurul originii. Particula cade în centrul de forță adică în punctul $r = 0$. Dacă $\alpha < 2$ energia nu poate lua valori negative arbitrar de mari. Spectrul discret conține valori negative dar finite ale energiei. În acest caz nu este posibilă căderea particulei în centrul de forță.

Pentru a studia ecuația radială vom face următoarea substituție:

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (4.419)$$

Ecuația (4.416) devine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V(r)u(r) + \frac{l(l-1)u(r)}{r^2} = Eu(r) \quad (4.420)$$

sau:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u(r) = 0 \quad (4.421)$$

Ecuația de mai sus este identică ca formă cu ecuația Schrödinger unidimensională, cu următoarele precizări:

a) rolul energiei potențiale este jucat de expresia:

$$V_{ef}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (4.422)$$

numită energie potențială efectivă. Ultimul termen poartă numele de termen centrifugal.

b) variabila r ia numai valori pozitive.

c) Pentru ca funcția radială $R(r)$ să fie finită în origine se impune condiția ca $u(r)$ să tindă la zero când $r \rightarrow 0$.

Vom examina în continuare soluțiile în vecinătatea originii și la infinit.

În origine $V_{ef}(r)$ are un pol de ordin doi când $l \neq 0$. Excepție face cazul când $l = 0$. Soluția în vecinătatea originii este de forma:

$$u(r) = r^t \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k, \quad a_0 \neq 0 \quad (4.423)$$

Condiția ca $u(r) = 0$ când $r \rightarrow 0$ este îndeplinită dacă $t > 0$.

În vecinătatea originii, deoarece termenul centrifugal este predominant, ecuația ia forma aproximativă:

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0 \quad (4.424)$$

Din același motiv vom considera în vecinătatea originii ca soluție termenul cel mai mare (predominat) din (4.423), adică pe r^l . Înlocuind pe u cu r^l în (4.424) se obține ecuația:

$$t(t-1) - l(l+1) = 0 \quad (4.425)$$

Ea admite ca soluții:

$$\begin{cases} t_1 = l + 1 \\ t_2 = -l \end{cases}$$

Soluția acceptabilă este $t_1 = l + 1$, deoarece cealaltă soluție face ca u să tindă la infinit în apropierea originii. Astfel, funcția radială este de forma:

$$R(r) = r^l \quad (4.426)$$

Când r este foarte mare, forma aproximativă a ecuației este:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}u = 0 \quad (4.427)$$

Există două cazuri:

a) Energia pozitivă : $E > 0$. Notând cu $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ soluția ecuației (4.427) este de forma

$$u(r) = C_1 e^{-ik_1 r} + C_2 e^{ik_1 r} \quad (4.428)$$

Funcția radială este:

$$R(r) = \frac{C_1}{r} e^{-ik_1 r} + \frac{C_2}{r} e^{ik_1 r} \quad (4.429)$$

și reprezintă o suprapunere de unde progresive și regresive. Soluția este mărginită oricare ar fi constantele C_1 și C_2 .

b) Energia este negativă $E < 0$. Notăm cu $k_2^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$. Soluția ecuației (4.428) este:

$$u(r) = D_1 e^{-k_2 r} + D_2 e^{k_2 r} \quad (4.430)$$

Pentru ca soluția să fie mărginită este necesar ca la distanțe foarte mari $D_2 = 0$.

Deoarece E și l sunt fixați, există o singură soluție a ecuației radiale. Soluția generală a ecuației radiale $R(r) = u(r)/r$ conține funcția $u(r)$ de forma 4.430 cu precizarea că mărimile D_1 și D_2 nu sunt constante,

ci funcții care depind de E și l . Fiind mărginită în origine rezultă că și forma asimptotică a soluției este bine precizată. Rezultă că pentru fiecare soluție mărginită în origine raportul $\frac{D_2}{D_1}$ la distanță mare este bine determinat de E și l .

a) $E < 0$

$$\frac{D_2}{D_1} = f(E, l)$$

În general $f \neq 0$, adică soluția mărginită în origine, nu este automat mărginită și la distanțe mari. Dacă $f \neq 0$, energia E corespunzătoare nu este valoare proprie. Valorile proprii ale energiei sunt cele pentru care $f(E, l) = 0$.

Ecuția $f(E, l) = 0$ admite un număr finit de soluții $E_{l_1}, E_{l_2}, \dots, E_{l_k}$. Totalitatea rădăcinilor ecuației $f(E, l) = 0$ corespunde domeniului de valori ale lui $l(0, 1, 2, 3, \dots)$ și formează o mulțime discretă.

b) $E > 0$

În acest caz, ambele soluții particulare sunt finite și nu trebuie să se facă nici o ipoteză suplimentară cu privire la valorile pe care le admite E (energia poate lua orice valoare și spectrul este continuu).

Din comportarea asimptotică a soluției, se vede că în cazul $E > 0$ integrala:

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{El}^2 dr$$

este divergentă. Soluțiile ecuației Schrödinger pentru $E > 0$ nu descriu stări reale ale particulei, ci stări idealizate. Totuși, din suprapuneri de astfel de funcții, se pot construi funcțiile care să descrie stările reale ale particulei.

4.7.1 Stări staționare pentru particula în câmp coulombian

Se consideră un atom hidrogenoid, cu un nucleu cu sarcina Ze și un electron cu sarcina $-e$. Energia potențială a sistemului este:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (4.431)$$

Deoarece atomul se consideră stabil este necesar ca energia totală a sistemului să fie negativă. Din acest motiv vom nota:

$$E = -|E| \quad (4.432)$$

Ecuția (4.421) devine:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[-|E| + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2 2m_e} \right] u(r) = 0 \quad (4.433)$$

Se face schimbarea de variabilă:

$$\rho = 2kr \quad (4.434)$$

și ecuația (4.434) devine:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[-\frac{m_e|E|}{2\hbar^2k^2} + \frac{Ze^2m_e}{4\pi\epsilon_0\rho\hbar^2k} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = 0 \quad (4.435)$$

Constanta k trebuie să fie în așa fel aleasă astfel încât forma ecuației să fie cât mai simplă. Fie:

$$\frac{m_e|E|}{2\hbar^2k^2} = \frac{1}{4}$$

astfel încât forma lui k este:

$$k = \frac{\sqrt{2m_e|E|}}{\hbar} \quad (4.436)$$

Se notează:

$$\lambda = \frac{Ze^2m_e}{4\pi\epsilon_0\hbar^2k} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{m_e}{2|E|}} \quad (4.437)$$

Ecuția (4.435) devine:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = 0 \quad (4.438)$$

Forma ecuației în zona asimptotică (ρ este foarte mare) este:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{1}{4}u = 0 \quad (4.439)$$

Soluția ecuației este de forma:

$$u_a = D_1 e^{-\frac{1}{2}\rho} + D_2 e^{\frac{1}{2}\rho} \quad (4.440)$$

În cazul soluției generale, D_1 și D_2 sunt funcții de ρ . Pentru ca soluția să fie mărginită, este nevoie ca $D_2 = 0$.

$$u_a \sim e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad (4.441)$$

Din acest motiv, vom considera o soluție de forma

$$u = f e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad (4.442)$$

Se obține ecuația pentru f :

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} - \frac{df}{d\rho} + \left[\frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] f = 0 \quad (4.443)$$

Pe baza a ce s-a discutat anterior este nevoie ca

$$f \sim \rho^{l+1}, \quad \rho > 0 \quad (4.444)$$

Atunci:

$$f(\rho) = \rho^{l+1} g(\rho) \quad (4.445)$$

Ecuația satisfăcută de g este:

$$\rho \frac{d^2 g}{d\rho^2} + [2l + 2 - \rho] \frac{dg}{d\rho} + [\lambda - l - 1]g = 0 \quad (4.446)$$

Alegem funcția g de forma:

$$g(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k, \quad C_0 \neq 0 \quad (4.447)$$

care se înlocuiește în (4.446):

$$\sum_{k=0}^{\infty} [k(k-1)C_k \rho^{k-1} + (2l+2-\rho)kC_k \rho^{k-1} + (\lambda-l-1)C_k \rho^k] = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{[k(k+1) + 2(l+1)(k+1)] C_{k+1} + (\lambda - l - 1 - k) C_k\} \rho^k = 0 \quad (4.448)$$

Se obține o relație între coeficienții sumei:

$$C_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \lambda}{(k + 1)(k + 2l + 2)} C_k \quad (4.449)$$

Pentru k suficient de mare raportul dintre doi coeficienți succesivi este:

$$\frac{C_{k+1}}{C_k} \sim \frac{1}{k + 1} \quad (4.450)$$

Acest raport este același cu al coeficienților sumei:

$$e^\rho = 1 + \frac{1}{1!}\rho + \frac{1}{2!}\rho^2 + \dots + \frac{1}{k!}\rho^k + \frac{1}{(k+1)!}\rho^{k+1} + \dots$$

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 funcția $g(\rho)$:

$$n_r + l + 1 - \lambda = 0 \quad (4.451)$$

Numărul cuantic $n_r = 0, 1, 2, \dots$ poartă numele de număr cuantic radial:

$$\lambda = n_r + l + 1$$

Introducem notația $\lambda = n$, unde n poartă numele de număr cuantic principal. Deoarece $n_r = 0, 1, 2, \dots$ și $l = 0, 1, 2, \dots$ atunci n ia valorile $1, 2, 3, \dots$

Din relația $n = n_r + l + 1$ obținem:

$$l = n - n_r - 1$$

adică:

$$l \leq n - 1 \quad (4.452)$$

Astfel, când n este fixat, l poate lua valorile $0, 1, 2, \dots, n - 1$. Odată ce parametrul λ este fixat și valorile proprii ale energiei sunt determinate:

$$\frac{Ze^2}{4\varepsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{m_e}{2|E|}} = n \quad (4.453)$$

Rezultă:

$$E_n = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.454)$$

Nivelele energetice obținute prin rezolvarea ecuației Schrödinger sunt cele găsite cu ajutorul modelului Bohr. Formula nivelelor Bohr este numai un rezultat aproximativ al teoriei cuantice. Pentru ca predicțiile teoretice în cazul atomului de hidrogen să coincidă cu observațiile experimentale trebuie luate în considerare următoarele:

a) masa nucleului trebuie considerată finită, deși este mult mai mare decât masa electronului. Din acest motiv în relația (4.454) masa m_e a electronului trebuie înlocuită cu masa redusă $\frac{m_e M}{m_e + M}$.

b) spectrul de energie este afectat de efectele relativiste în comportarea electronului (structură fină). Aceste efecte sunt legate de existența spinului și a momentului magnetic propriu al electronului.

c) Prezența momentului magnetic nuclear determină o nouă despicare a nivelelor de structură fină, nivelele având astfel o structură hiperfină.

O caracteristică a energiei nivelelor obținute este că acestea depind doar de numărul cuantic principal n și prin urmare sunt degenerate în raport cu numerele cuantice l și m . Astfel, pentru fiecare valoare a lui n numărul cuantic orbital poate lua valorile $0, 1, 2, \dots, n - 1$. Pentru fiecare valoare a lui l , numărul cuantic m poate lua $2l + 1$ valori. Prin urmare degenerarea totală este:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2 \quad (4.455)$$

Degenerarea în raport cu m există pentru orice potențial central. Degenerarea în raport cu l este specifică câmpului coulumbian.

O altă exemplificare este oferită de spectrul atomilor alcalini. Aceste metale (Li, Na, K, Rb și Cs) au un singur electron de valență care poate fi ușor înlăturat. Aceasta sugerează faptul că atomii alcalini pot fi considerați ca și atomi hidrogenoizi, în condițiile în care electronul de valență se găsește într-un potențial datorat restului atomului (nucleul și cei $Z - 1$ electroni). La distanțe mari acest potențial este practic un potențial central coulumbian (proporțional cu $1/r$). La distanțe mici potențialul deviază de la comportarea coulumbiană deoarece sarcina negativă a celor $Z - 1$ electroni este distribuită spațial în jurul nucleului, ecranându-l.

Considerând că într-o sferă de rază r avem N electroni, atunci sarcina efectivă a nucleului și a electronilor interni sferei de rază r este:

$$eZ^* = eZ - eN(r) \quad (4.456)$$

Atunci:

$$V(r) = -e \int \frac{Z^*(r)}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = -\frac{eZ^*}{4\pi\epsilon_0} f\left(\frac{1}{r}\right) \quad (4.457)$$

Funcția $f\left(\frac{1}{r}\right)$ se dezvoltă în serie și se rețin primii doi termeni astfel că (4.458) devine:

$$V(r) = -\frac{e^2 Z^*}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{A}{r^2} \quad (4.458)$$

unde Z^* și A sunt două constante.

Dacă în ecuația radială se introduce noul potențial putem face ca noua ecuație să fie identică cu prima punând:

$$l'(l' + 1) = l(l + 1) - \frac{2m_e}{\hbar^2} A \quad (4.459)$$

Valorile proprii ale energiei vor fi:

$$E_{nl} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{e^2 Z^* m_e}{(n_r + l' + 1)} \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \quad (4.460)$$

unde $l' = l + \sigma(l)$

Atunci:

$$E = \frac{1}{h^2} \frac{m_e Z^{*2} \varphi_0^4}{[n + \sigma(l)]^2} \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \quad (4.461)$$

Se constată că degenerarea după l se ridică și se obțin n subnivele distincte.

4.7.2 Funcțiile proprii pentru atomul de hidrogen

Relația (4.446) poate fi identificată cu ecuația:

$$\frac{d^2g}{dz^2} + \left(\frac{c}{z} - 1\right) \frac{dg}{dz} - \frac{a}{z}g = 0 \quad (4.462)$$

dacă se pune $z = \rho$, $a = l + 1 - \lambda$, $c = 2(l + 1)$

Coefficienții ecuației (4.462) au poli de ordinul întâi. Soluțiile ecuației se pot exprima prin serii de puteri ale variabilei z , care conțin cel mult un număr finit de puteri negative.

$$g = z^\beta \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^{k+\beta} \quad (4.463)$$

Înlocuind (4.463) în relația (4.462) se obține:

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k (\beta + k) (\beta + k - 1 + c) z^{k+\beta-2} = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (\beta + k + a) z^{k+\beta-1}$$

sau

$$\begin{aligned} & c_0 \beta (\beta - 1 + c) z^{\beta-2} + \sum_{k=0}^{\infty} c_{k+1} (\beta + k + 1) (\beta + k + c) z^{k+\beta-1} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} c_k (\beta + k + a) z^{k+\beta-1} \end{aligned} \quad (4.464)$$

Pentru ca această egalitate să fie adevărată este necesar ca:

$$\beta (\beta - 1 + c) = 0 \quad (4.465)$$

$$c_{k+1} (\beta + k + 1) (\beta + k + c) = c_k (\beta + k + a) \quad (4.466)$$

Din (4.465) rezultă că $\beta = 0$, sau $\beta = 1 - c$. Există două soluții liniar independente ale ecuației corespunzătoare celor două valori ale lui β :

$$g_1(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k \quad (4.467)$$

$$g_2(z) = z^{1-c} \sum_{k=0}^{\infty} c'_k z^k \quad (4.468)$$

Cele două soluții sunt liniar independente dacă c este diferit de un întreg. Dacă $c = 1$ cele două soluții coincid.

În cazul $\beta = 0$ raportul coeficienților este:

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} = \frac{k+a}{(k+1)(k+c)} = \frac{a+k}{c+k} \frac{1}{k+1} \quad (4.469)$$

Alegând $c_0 = 1$ atunci:

$$c_1 = \frac{a}{c}$$

$$c_2 = c_1 \frac{a+1}{c+1} \frac{1}{2} = \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{1}{2!}$$

$$c_3 = \frac{a(a+1)(a+2)}{c(c+1)(c+2)} \frac{1}{3!}$$

$$c_k = \frac{a(a+1)(a+2)\dots(a+k-1)}{c(c+1)(c+2)\dots(c+k-1)} \frac{1}{k!}$$

Relația (4.468) devine:

$$g_1(z) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a(a+1)(a+2)\dots(a+k-1)}{c(c+1)(c+2)\dots(c+k-1)} \frac{1}{k!} z^k = {}_1F_1(a, c, z) \quad (4.470)$$

${}_1F_1(a, c, z)$ poartă numele de funcția hipergeometrică degenerată.

În cazul $\beta = 1 - c$ raportul coeficienților seriei este:

$$\frac{c'_{k+1}}{c'_k} = \frac{(1-c+k+a)}{(2-c+k+)} \left(\frac{1}{k+1} \right) \quad (4.471)$$

Comparând (4.471) cu (4.469) relația (4.471) se obține din (4.469) dacă se fac înlocuirile:

$$\begin{aligned} a &\rightarrow a + 1 - c \\ c &\rightarrow 2 - c \end{aligned}$$

Considerând $c'_0 = 1$ se obține:

$$g_2(z) = z^{1-\beta} {}_1F_1(a + 1 - c, 2 - c, z)$$

Dacă c este întreg doar una din soluțiile g_1 și g_2 are sens. Dacă c nu este întreg soluția generală este:

$$g(z) = A_1 z^{1-\beta} F_1(a, c, z) + A_2 z^{1-\beta} {}_1F_1(a + 1 - c, 2 - c, z) \quad (4.472)$$

Pentru $a = -N$ (N - întreg) funcția se reduce la un polinom de gradul N . Se observă din (4.469) că pentru $k = N$, $c_{k+1} = 0$ iar restul coeficienților seriei sunt nuli.

Astfel, o soluție a ecuației (4.435) este:

$$g(\rho) = {}_1F_1(l + 1 - \lambda, 2l + 2, \rho) \quad (4.473)$$

Pentru ca soluția să fie acceptabilă din punct de vedere fizic este necesar ca funcția obținută să se reducă la un polinom. Așa cum am discutat mai sus este necesar ca:

$$l + 1 - \lambda = n_r \quad (4.474)$$

atunci:

$$\lambda = -n_r + l + 1 = n \quad (4.475)$$

În acest caz funcția hipergeometrică degenerată se reduce la un polinom:

$$g(\rho) = 1 + \sum_{k=1}^{n-l-1} \frac{(k+l-n)(k-1+l-n)\dots(1+l-n)}{(k+2l+1)(k-1+2l+1)\dots(2+2l)k!} \rho^k \quad (4.476)$$

Funcțiile radiale au expresiile:

$$R_{nl} = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l {}_1F_1(l + 1 - n, 2l + 2, \rho) \quad (4.477)$$

O altă modalitate de a exprima soluțiile ecuației (4.446) este aceea în care intervin polinoamele Laguerre asociate. Vom defini pentru început polinoamele Laguerre:

$$L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q} (e^q e^{-\rho}) \quad (4.478)$$

Ele pot fi obținute pornind de la funcția generatoare:

$$U(\rho, s) = \frac{\exp[-\rho s / (l - s)]}{l - s} = \sum_{q=1}^{\infty} \frac{L_q(\rho)}{q!} s^q \quad s < 1 \quad (4.479)$$

Ecuația satisfăcută de aceste polinoame este:

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (1 - \rho) \frac{d}{d\rho} + q \right] L_q(\rho) = 0 \quad (4.480)$$

Polinoamele Laguerre asociate $L_q^p(\rho)$ se definesc prin relația:

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho) \quad (4.481)$$

Ecuația satisfăcută de aceste polinoame este :

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (p + 1 - \rho) \frac{d}{d\rho} + (q - p) \right] L_q^p(\rho) = 0 \quad (4.482)$$

Se observă că până la o constantă multiplicativă soluția $g(\rho)$ a ecuației (când $\lambda = n$) este $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$.

Expresia analitică a acestor polinoame este:

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} (-1)^{k+1} \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!} \rho^k \quad (4.483)$$

Comparând expresia polinoamelor asociate cu soluția (4.470) rezultă relația:

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \frac{[(n+l)!]^2}{(n-l-1)!(2l+1)!} {}_1F_1(l+1-n, 2l+2, \rho) \quad (4.484)$$

Funcțiile proprii ale energiei au forma:

$$u(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4.485)$$

Ele trebuie să îndeplinească condiția de normare:

$$\iiint |u|^2 dv = 1 \quad (4.486)$$

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) r^2 \sin \theta d\theta d\varphi dr = 1 \quad (4.487)$$

Dacă se ține cont de relația care exprimă condiția de normare a funcțiilor sferice și dacă partea radială a soluțiilor este exprimată cu ajutorul funcției hipergeometrice degenerate rezultă constanta de normare:

$$N_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \left(\frac{2Z}{nr_0}\right)^3} \quad (4.488)$$

unde:

$$r_0 = \frac{\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)}{m_e e^2} = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (4.489)$$

reprezintă raza primei orbite Bhor.

Putem exprima funcțiile radiale în funcție și de polinoamele Laguerre asociate:

$$R_{nl} = \left\{ \left(\frac{2Z}{nr_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad (4.490)$$

Deoarece probabilitatea ca electronul să se afle într-o regiune a spațiului astfel ca $r \in (r, r+dr)$, $\theta \in (\theta, \theta+d\theta)$, $\varphi \in (\varphi, \varphi+d\varphi)$ este:

$$dP(r, \theta, \varphi) = R_{nl}^2(r) |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta d\theta d\varphi dr \quad (4.491)$$

Prin integrare după θ și φ se poate determina probabilitatea ca particula să se afle într-o regiune a spațiului unde $r \in (r, r+dr)$. Astfel, ținându-se cont de proprietatea de normare a funcțiilor sferice se obține:

$$dP(r) = R_{nl}^2(r) r^2 dr \quad (4.492)$$

Figura 4.10: Funcțiile radiale: a) R_{10} , c) R_{20} , e) R_{21} , precum și funcțiile de distribuție de probabilitate: b) $r^2 R_{10}^2$, d) $r^2 R_{20}^2$, f) $r^2 R_{21}^2$ pentru atomul de hidrogen

Expresiile primelor funcții radiale ale atomilor hidrogenoizi sunt:

$$R_{10} = 2 \left(\frac{Z}{r_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{r_0} \right) \quad (4.493)$$

$$R_{20} = 2 \left(\frac{Z}{2r_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2r_0} \right) \exp \left(-\frac{Zr}{2r_0} \right) \quad (4.494)$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2r_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{r_0} \right) \exp \left(-\frac{Zr}{2r_0} \right) \quad (4.495)$$

$$R_{30} = \left(\frac{Z}{3r_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2Zr}{3r_0} + \frac{2Z^2r^2}{27r_0^2} \right) \exp \left(-\frac{Zr}{3r_0} \right) \quad (4.496)$$

$$R_{31} = \frac{4\sqrt{2}}{9} \left(\frac{Z}{3r_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{6r_0} \right) \left(\frac{Zr}{r_0} \right) \exp \left(-\frac{Zr}{3r_0} \right) \quad (4.497)$$

$$R_{32} = \frac{4}{27\sqrt{10}} \left(\frac{Z}{3r_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{r_0} \right)^2 \exp \left(-\frac{Zr}{3r_0} \right) \quad (4.498)$$

Reprezentarea unor funcții radiale și a distribuțiilor de probabilitate corespunzătoare pentru atomul de hidrogen sunt date în Fig.4.10.

4.8 Spinul electronului

4.8.1 Momentul magnetic orbital al electronului

Existența unei sarcini electrice în mișcare este echivalentă cu un curent electric. Atunci, mișcarea unui electron pe o orbită închisă este echivalentă cu o buclă de curent. Unei bucle de curent de arie A i se poate asocia un moment magnetic:

$$\vec{\mu} = I\vec{A} \quad (4.499)$$

unde \vec{A} este un vector al unei mărimi care este egală cu suprafața spirei iar direcția lui este perpendiculară pe suprafața acesteia.

Astfel, un electron care se deplasează cu viteza \vec{v} pe o orbită circulară este echivalent cu un curent de intensitate I :

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r} \quad (4.500)$$

unde:

$$T = \frac{2\pi r}{v} \quad (4.501)$$

este perioada de rotație a electronului pe orbita circulară respectivă. Acest electron determină apariția unui moment magnetic:

$$\mu = I\pi r^2 = \frac{ev}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{e}{2m_e}m_e v r = \frac{e}{2m_e}L \quad (4.502)$$

unde $L = m_e v r$ este momentul cinetic orbital al electronului. Relația (4.502) se poate scrie și cu vectorial:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} \quad (4.503)$$

deoarece curentul este în sens invers mișcării electronului (electronul este încărcat negativ). Relația (4.503) se mai poate scrie:

$$\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{2m_e}\frac{\vec{L}}{\hbar} = -\mu_B\frac{\vec{L}}{\hbar} \quad (4.504)$$

unde mărimea $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ are dimensiunea unui moment magnetic. μ_B poartă numele de magnetonul Bohr.

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \text{ Am}^2 \quad (4.505)$$

Relația (4.504) o considerăm valabilă și în cadrul mecanicii cuantice prin înlocuirea lui $\vec{\mu}$ și \vec{L} cu operatorii hermitici corespunzători.

Deoarece operatorul moment cinetic are valorile proprii $\sqrt{l(l+1)}\hbar$, valorile proprii ale operatorului moment magnetic sunt:

$$\frac{e\hbar}{2m_e}\sqrt{l(l+1)} \quad (4.506)$$

Componenta μ_z a momentului magnetic este:

$$\mu_z = \mu_B\frac{L_z}{\hbar} \quad (4.507)$$

În mod analog, relația din mecanica cuantică este valabilă dacă se înlocuiesc observabilele μ_z și L_z cu operatorii corespunzători. Deoarece valorile proprii ale lui L_z sunt: $m_z\hbar : 0, \pm\hbar, \pm2\hbar, \dots \pm l\hbar$ atunci valorile proprii ale lui μ_z sunt $m_z\mu_B$. Din acest motiv m_z poartă numele de număr cuantic magnetic.

Definim raportul giromagnetic orbital ca raportul dintre μ_z și L_z

$$\gamma_l = \frac{\mu_z}{L_z} = \frac{e}{2m_e} = \frac{\mu_B}{\hbar} \quad (4.508)$$

Se observă că $\mu_B = \gamma\hbar$

4.8.2 Experimente care au ilustrat spinul electronului

Ipoteza spinului electronului a apărut în urma experimentelor referitoare la comportarea atomilor. Astfel, în 1896 Zeeman a descoperit că în câmp magnetic liniile spectrale se descompun în două sau trei componente. Trebuie remarcat că ecuația Schrödinger prevede o descompunere într-un număr impar de componente. Experiențele făcute arată că majoritatea liniilor spectrale se descompun într-un număr par de componente, prezentând astfel un efect Zeeman anomal.

Experiența Stern - Gerlach

Inițial experiența a urmărit punerea în evidență a momentului magnetic orbital al atomilor și măsurarea acestuia. Dispozitivul experimental este prezentat în Fig. 4.11.

El constă dintr-un cuptor 1 în care se evaporă un metal ușor fuzibil (argint). Atomii trec printr-un sistem de diafragme 2, iar apoi ajung între polii unui electromagnet 3 care au o formă specială, astfel încât să fie asigurat un gradient puternic al inducției magnetice, chiar pe distanțe foarte mici, comparabile cu dimensiunile liniare ale atomilor.

Asupra unui atom cu momentul magnetic $\vec{\mu}$ acționează pe direcția Oz din partea câmpului magnetic o forță \vec{F} dată de relația:

$$F = \frac{\partial \vec{B}}{\partial z} \vec{\mu} = \frac{\partial B}{\partial z} \mu \cos \theta \quad (4.509)$$

Figura 4.11: Dispozitivul experimental utilizat în experimentul Stern- Gerlach.
1. cuptor, 2. diafragme, 3, 4. polii magnetului, 5. ecran de observație

unde $\frac{\partial B}{\partial z}$ este gradientul câmpului magnetic iar θ este unghiul dintre \vec{B} și $\vec{\mu}$.

Deviația atomilor z_1 pe un ecran este proporțională cu forța F , adică:

$$z_1 = kF = k \frac{\partial B}{\partial z} \mu \cos \theta \quad (4.510)$$

Datorită agitației termice momentele magnetice pot avea toate direcțiile posibile și $\cos \theta$ variază practic între $(-1, 1)$. La trecerea printre polii electromagnetului atomii ajunși pe ecranul de observație ar trebui să se dispună simetric față de regiunea de deflexie zero sub forma unei benzi de lățime $2z_1$ (Fig. 4.12 a).

Experiența a arătat că dispunerea nu are loc sub forma unei benzi ci doar sub forma a două linii înguste așezate simetric față de direcția fascicolului incident (cazul metalelor alcaline; Fig.4.12 b).

Interpretarea rezultatelor nu se poate face considerând că desplicarea fascicolului atomic apare datorită interacției dintre momentul magnetic orbital $\vec{\mu}$ și \vec{B} .

Chiar admitând o cuantificare a proiecției momentului magnetic pe axa Oz ar trebui să se observe un număr impar de linii deoarece pentru un l dat, m_z poate lua $2l + 1$ valori distincte.

Mai mult, se observă că pentru atomii aflați în starea fundamentală $\mu = 0$ apare desplicarea fascicolului în două componente. Din mărimea

Figura 4.12: a) banda de lațime $2z_1$ care ar apare conform teoriei clasice b) linii observate în experimentul Stern-Gerlach

deviației rezultă (pentru atomi monovalenți) un moment magnetic egal cu μ_B .

Astfel, ipoteza că acest moment magnetic ar fi un moment magnetic orbital cade. Nici ipoteza că acest moment ar aparține restului atomului nu se confirmă deoarece ionii de argint cărora le lipsește electronul de valență nu prezintă nici un fel de separare în câmp magnetic.

Rezultă că singura ipoteză este aceea că acest moment magnetic al atomului de argint este datorat electronului de valență, momentul magnetic fiind un moment propriu. Existența unui moment magnetic impune și existența unui moment cinetic propriu S (care a fost numit spin).

Experiența Einstein - de Hass

Efectul care stă la baza experimentului este un efect magneto-mecanic. O bară feromagnetică este suspendată de un fir de cuarț (Fig. 4.13). Ea se află în interiorul unei bobine. Pe firul de cuarț este prinsă o oglindă pe care cade o rază de lumină provenită de la sursa S . Raza reflectată cade pe o riglă gradată, mișcarea razei pe aceasta punând în evidență mișcarea firului. Prin bobină se trece un curent suficient de puternic pentru ca proba să se magnetizeze la saturație. Dacă se inversează sensul curentului prin bobină, adică dacă se inversează sensul câmpului magnetic, se constată că are loc o rotire a cilindrului.

Această comportare poate fi explicată dacă se consideră că fiecare electron prezintă un moment magnetic propriu, precum și un moment

Figura 4.13: Schema de principiu a experimentului Einstein de Hass: 1) bobină
2) bară feromagnetică 3) oglindă

cinetic propriu. Între acestea se presupune o relație analoagă celei din cazul momentului magnetic orbital și momentului cinetic orbital:

$$\gamma_S = \frac{\mu_s}{S_z} = g_S \frac{e}{2m_e} \quad (4.511)$$

unde g_S este un factor necunoscut. În cazul mișcării orbitale un astfel de factor este $g_l = 1$.

Prin inversarea câmpului magnetic, momentul magnetic al electronului se schimbă de la valoarea μ_s la valoarea $-\mu_s$ și deci variază cu $2\mu_s$. Această variație conduce la o variație a proiecției momentului cinetic propriu pe axa Oz și anume:

$$\Delta S_z = \frac{2m_e}{e} \frac{1}{g_S} 2\mu_s \quad (4.512)$$

Relația rămâne valabilă și între variația componentei pe axa Oz a momentului cinetic rezultat și variația momentului magnetic total.

Deoarece bara magnetică conține un număr mare de electroni, o relație asemănătoare se stabilește între momentul cinetic propriu rezultat și momentul magnetic determinat de totalitatea electronilor din bară. Momentul cinetic total al barei este o mărime conservativă, adică trebuie să rămână constant tot timpul experimentului. Aceasta impune ca bara să capete un moment cinetic de rotație $I\omega$, unde I este momentul

de inerție al barei, iar ω este viteza unghiulară. Rezultă:

$$I\omega = \frac{2m_e}{g_S e} 2\mu_T \quad (4.513)$$

unde μ_T este momentul magnetic total al cilindrului.

Din datele experimentale se obține $g_S = 2$. Atunci:

$$\gamma_S = 2 \frac{e}{2m_e} = 2\gamma_e \quad (4.514)$$

Aceasta reprezintă anomalia giromagnetică a spinului. Dacă se ține cont că $\mu_S = \mu_B$, $g_S = 2$ și de relația (4.511) rezultă că proiecția momentului cinetic propriu pe axa Oz este $S_z = \hbar/2$.

4.8.3 Ipoteza spinului

Rezultă că faptele experimentale nu pot fi explicate decât prin considerarea unei ipoteze formulată în 1925 de Uhlenbeck și Goudsmith. Ea constă din următoarele afirmații:

a) Electronul posedă un moment cinetic propriu \vec{S} (moment cinetic de spin) cu componentele S_x, S_y, S_z .

b) Pentru a descrie spinul se introduce un spațiu liniar nou în care să acționeze operatorii de spin. Operatorii de spin verifică relațiile de comutare a oricărui moment cinetic.

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad (4.515)$$

$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x \quad (4.516)$$

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y \quad (4.517)$$

c) Operatorii S_x, S_y, S_z comută cu operatorii coordonatelor și ai impulsurilor.

d) Valorile proprii ale operatorului S_z sunt $\pm \frac{\hbar}{2}$, adică proiecția spinului pe axa Oz ia numai valorile $\pm \frac{\hbar}{2}$.

e) Mărimea momentului cinetic de spin este cuantificată și poate lua numai valorile:

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (4.518)$$

unde $s = \frac{1}{2}$ este un număr cuantic de spin.

f) Momentului cinetic de spin îi corespunde un moment magnetic de spin:

$$|\mu_S| = \sqrt{s(s+1)}e\frac{\hbar}{m_e} \quad (4.519)$$

Proiecția μ_{sz} a momentului magnetic poate să ia valorile:

$$\mu_{sz} = \frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_B \quad (4.520)$$

$$\mu_{sz} = -\frac{e\hbar}{2m_e} = -\mu_B \quad (4.521)$$

Se observă că raportul giromagnetic de spin este:

$$\gamma_S = \frac{|\mu_{sz}|}{|S_z|} = \frac{\mu_B}{\hbar/2} = 2\frac{e}{2m_e} = 2\gamma_l \quad (4.522)$$

Rezultatul este confirmat de experimentul Einstein - de Hass și poartă numele de anomalia giromagnetică a spinului. Se poate considera că:

$$\vec{\mu}_S = -\gamma_S \vec{S} = -g_S \frac{e}{2m_e} \vec{S} \quad (4.523)$$

Semnul minus apare deoarece $\vec{\mu}_S$ sunt orientate în sensuri contrare, sarcina electronului fiind negativă.

4.8.4 Teoria lui Pauli a spinului

Pentru mecanica cuantică nerelativistă existența spinului este o ipoteză impusă de experiență, care poate fi înglobată în formalismul general.

Vom arăta că spațiul spinului este bidimensional. Din ipoteza spinului rezultă că valorile proprii pentru oricare din operatorii S_x, S_y, S_z sunt $\pm\hbar/2$. Fie operatorul S_z . La fiecare din cele două valori proprii corespunde un vector propriu (aici facem ipoteza că valorile proprii sunt nedegenerate). În acest fel S_z are vectori proprii care formează un sistem complet, adică orice vector din spațiul spinului se poate dezvolta după aceștia.

În locul operatorului \vec{S} s-a introdus operatorul $\vec{\sigma}$, definit prin:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (4.524)$$

Operatorii σ_x , σ_y , σ_z se numesc operatori Pauli. Relația de definiție arată că acești operatori sunt hermitici și au ca valori proprii numerele $+1$, și -1 . Atunci relațiile de comutare se scriu:

$$[\vec{\sigma} \times \vec{\sigma}] = 2i\vec{\sigma} \quad (4.525)$$

sau în detaliu:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad (4.526)$$

$$[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x \quad (4.527)$$

$$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \quad (4.528)$$

Vom considera pentru operatorii Pauli o reprezentare matriceală. Din relațiile de comutare rezultă matricile lui Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.529)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.530)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.531)$$

Funcțiile proprii vor fi de forma:

$$f = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (4.532)$$

Vom considera ecuația cu vectorii și valorile proprii pentru σ_x .

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Atunci:

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\alpha \\ \lambda\beta \end{pmatrix}$$

astfel că:

$$\begin{cases} \beta - \lambda\alpha = 0 \\ \lambda\beta - \alpha = 0 \end{cases} \quad (4.533)$$

Pentru ca sistemul să aibă soluții:

$$\begin{vmatrix} 1 & -\lambda \\ \lambda & -1 \end{vmatrix} = 0 \implies -1 + \lambda^2 = 0; \lambda = \pm 1$$

Rezultă că:

$$\begin{aligned} \lambda &= 1, \alpha = \beta \\ \lambda &= -1, \alpha = -\beta \end{aligned}$$

Vectorii proprii sunt de forma:

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{pentru } \lambda = 1 \quad (4.534)$$

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{pentru } \lambda = -1 \quad (4.535)$$

Mărimea constantei α se poate determina din condiția de normare.
Rezultă $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

În același mod putem obține pentru σ_y vectorii proprii și valorile proprii.

Astfel, pentru σ_y se obține:

$$\lambda = 1 \text{ și } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (4.536)$$

$$\lambda = -1 \text{ și } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (4.537)$$

Pentru σ_z se obține:

$$\lambda = 1 \text{ și } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.538)$$

$$\lambda = -1 \text{ și } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.539)$$

Matricea

$$\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.540)$$

este legată de operatorul S^2 prin relația:

$$S^2 = \frac{1}{4}\hbar^2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.541)$$

Rezultă că operatorul S^2 are o singură valoare proprie $\frac{3}{4}\hbar^2$, deoarece matricea $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ este matricea unitate.

În acest spațiu putem alege ca bază vectorii proprii ai lui S_z .

4.8.5 Spinori

Spațiul stărilor pentru o particulă fără spin este spațiul funcțiilor de undă. În cazul unei particule cu spin, dacă se face abstracție de mișcarea acesteia, starea ei este descrisă cu ajutorul unor vectori din spațiul bidimensional al spinului. Atunci, în cazul unei particule cu spin, funcția de undă a unei particule va fi descrisă de niște vectori dintr-un spațiu, care este produsul direct dintre spațiul funcțiilor de undă și spațiul spinului. Vectorii din acest spațiu ce caracterizează starea particulei poartă denumirea de **spinori**.

Putem scrie că vectorul care include dependența de poziție și cea de spin este:

$$\Psi_s = \Psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (4.542)$$

Condiția de normare se scrie:

$$(\Psi_s, \Psi_s) = \int_{\infty} (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2) dv = 1 \quad (4.543)$$

Relația de mai sus definește și produsul scalar în spațiul spinorilor. Relația de mai sus trebuie înțeleasă în sensul că dacă $m_s = \frac{1}{2}$, $\Psi_s = \Psi_1$, iar dacă $m_s = -\frac{1}{2}$, $\Psi_s = \Psi_2$; atunci expresia $\Psi_1^* \Psi_1 dv$ poate fi interpretată ca probabilitatea ca electronul să aibă proiecția spinului pe axa Oz egală

cu $\frac{\hbar}{2}$ și să se afle în volumul dv , iar $\Psi_2^* \Psi_2 dv$ poate fi interpretată ca probabilitatea ca electronul să aibă proiecția spinului pe axa Oz egală cu $-\frac{\hbar}{2}$ și ca acesta să se afle în volumul dv . În general, putem spune că o astfel de funcție de undă depinde de patru variabile (x, y, z, s_z) .

$$\Psi_s = \Psi_s(x, y, z, s_z) \quad (4.544)$$

4.9 Sisteme de particule identice

În mod curent, sistemele fizice sunt formate din mai multe particule: nucleul este o aglomerare de protoni și neutroni, atomul este format din nucleu și electroni, moleculele din atomi. Proprietățile acestor sisteme pot fi înțelese numai pe baza mecanicii cuantice cu condiția ca în cazul sistemelor ce conțin particule identice să se impună o restricție suplimentară funcțiilor de stare - principiul indiscernabilității - care ține seama de imposibilitatea de a distinge microparticulele identice.

Fie un sistem din N particule identice. Funcțiile de undă vor depinde de coordonatele x_i, y_i, z_i și coordonatele de spin σ_i . Introducem notația:

$$\Psi = \Psi(x_1, y_1, z_1, \sigma_1, \dots, x_N, y_N, z_N, \sigma_N, t) = \Psi(1, 2, \dots, N, t) \quad (4.545)$$

Cu u_i vom nota energia particulei i într-un câmp exterior iar cu $w(j, k)$ energia ce apare datorită interacției dintre două particule. Atunci hamiltonianul sistemului este:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + u_i(t) \right] + \sum_{j \neq k}^N \sum_{k=1}^N w(i, j) \quad (4.546)$$

Trebuie observat că:

a) În cazul clasic putem distinge particulele identice prin interacțiile ce le au.

b) În cazul cuantic acest lucru nu este posibil din cauza suprapunerii zonelor de localizare, fapt ce conduce la imposibilitatea de a distinge aceste particule. Acest fapt face ca o eventuală numerotare a particulelor la momentul inițial să se piardă în timp.

Indiscernabilitatea particulelor se manifestă prin faptul că mărimile observabile pentru un sistem de particule identice sunt mărimi simetrice la permutarea particulelor sistemului. În particular hamiltonianul

sistemului trebuie să fie simetric la interschimbarea a două particule. Starea unui sistem nu se schimbă prin comutarea a două particule.

Astfel, fiecărei transpoziții îi asociem un operator P_{ij} în spațiul stărilor unui sistem de particule identice, denumit operator de transpoziție.

$$P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \quad (4.547)$$

În plus, ținând cont de expresia hamiltonianului:

$$P_{ij}H(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = H(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \quad (4.548)$$

adică operatorul hamiltonian rămâne neschimbat. Mai mult, operatorii simetrici în coordonate și spin comută cu operatorul transpoziție.

Punem condiția ca starea sistemului să nu fie afectată de o transpoziție particulară.

$$P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \lambda_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \quad (4.549)$$

$$P_{ij}[P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N)] = \lambda_{ij}P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N)$$

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \lambda_{ij}^2\Psi(1, 2, \dots, N) \quad (4.550)$$

Atunci:

$$\lambda_{ij} = \pm 1$$

Rezultă că schimbând două particule între ele avem două tipuri de funcții de stare:

Când $\lambda_{ij} = 1$ atunci:

$$\begin{aligned} P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) &= \Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \\ &= \Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \end{aligned} \quad (4.551)$$

Funcțiile care îndeplinesc această condiție poartă numele de funcții simetrice la transpoziția P_{ij} .

Când $\lambda_{ij} = -1$ atunci:

$$\begin{aligned} P_{ij}\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) &= \Psi(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \quad (4.552) \\ &= -\Psi(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \end{aligned}$$

Funcțiile care îndeplinesc această condiție poartă numele de funcții antisimetrice la transpoziția P_{ij} .

Definim operatorul permutare P operatorul care schimbă particula 1 cu particula $a1$, particula 2 cu particula $a2$, ...particula N cu particula aN . Dacă există N particule există $N!$ permutări distincte. O permutare este pară dacă numărul de transpoziții ce conduce la acea permutare este par și este impară dacă numărul de transpoziții ce conduce la acea permutare este impar. Funcțiile proprii ale lui H nu sunt în general funcții proprii pentru toți cei $N!$ operatori de permutare. Există două stări deosebite ale căror funcții de stare pot fi funcții proprii ale lui H și ale operatorilor de permutare. Acestea sunt stările total simetrice și total antisimetrice.

O funcție de stare este total simetrică dacă pentru orice operator permutare:

$$P\Psi_S = \Psi_S \quad (4.553)$$

O funcție de stare este total antisimetrică dacă:

$$P\Psi_A = \begin{cases} +\Psi_A & \text{pentru o permutare pară} \\ -\Psi_A & \text{pentru o permutare impară} \end{cases} \quad (4.554)$$

4.9.1 Postulatul de simetrizare

Starea unui sistem format din particule identice este descrisă de:

a) funcții de stare complet simetrice în coordonate specifice particulelor cu spini întregi numite bozoni (mezoni, fotoni).

b) funcții de stare complet antisimetrice specifice particulelor cu spin semiîntreg numite fermioni (electroni, neutroni, protoni).

4.9.2 Construirea funcțiilor de undă total simetrice sau antisimetrice

Fie două particule identice. Notăm cu $\Psi(1, 2)$ o funcție proprie a lui H nesimetrizabilă, ce corespunde valorii proprii E . Atunci se pot construi

funcțiile proprii simetrice și antisimetrice:

$$\Psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(1, 2) + \Psi(2, 1)] \quad (4.555)$$

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(1, 2) - \Psi(2, 1)] \quad (4.556)$$

În concordanță cu discuția anterioară funcția de undă este simetrică în cazul unui sistem de doi bozoni și antisimetrică în cazul unui sistem format din doi fermioni.

Un caz special este acela în care hamiltonianul H al unui sistem de N particule identice este suma a N hamiltonieni uniparticulă h_i .

$$H = \sum_{i=1}^N h_i \quad (4.557)$$

$$h_i u_\lambda(i) = E_\lambda u_\lambda(i) \quad (4.558)$$

O soluție a ecuației Schrödinger:

$$H\Psi(1, 2, \dots, n) = E\Psi(1, 2, \dots, N) \quad (4.559)$$

este de forma:

$$\Psi(1, 2, \dots, n) = u_\alpha(1)u_\beta(2)\dots u_\nu(N) \quad (4.560)$$

unde $\alpha, \beta, \dots, \nu$ sunt un set de numere cuantice ce caracterizează stările individuale uniparticulă.

În cazul unui sistem de două particule energia totală E este suma energiilor individuale.

$$E = E_\alpha + E_\beta \quad (4.561)$$

Funcțiile de undă simetrică și antisimetrică sunt:

$$\Psi_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_\alpha(1)u_\beta(2) + u_\alpha(2)u_\beta(1)] \quad (4.562)$$

$$\Psi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_\alpha(1)u_\beta(2) - u_\alpha(2)u_\beta(1)] \quad (4.563)$$

În cazul a N particule funcția de undă simetrică este:

$$\Psi_S(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P u_{\alpha}(1)u_{\beta}(2)\dots u_{\nu}(N) \quad (4.564)$$

unde sumarea se face pe totalitatea permutărilor posibile.

Funcția de undă antisimetrică se poate scrie sub forma unui determinant numit determinantul Slater.

$$\Psi_A(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{\alpha}(1) & \dots & u_{\nu}(1) \\ u_{\alpha}(2) & \dots & u_{\nu}(2) \\ \vdots & & \vdots \\ u_{\alpha}(N) & \dots & u_{\nu}(N) \end{vmatrix} \quad (4.565)$$

Schimbarea a două particule înseamnă permutarea a două linii, fapt ce duce la o schimbare de semn.

4.9.3 Principiul de excluziune al lui Pauli

Dacă în determinantul Slater două seturi de numere cuantice α și β sunt identice, înseamnă că două coloane sunt identice și funcția se anulează.

În consecință o stare cuantică individuală poate fi ocupată doar de un singur fermion. Această afirmație exprimă principiul de excluziune al lui Pauli.

Acest principiu a fost aplicat în scopul determinării modului în care sunt populate nivelele energetice în atomi. Dacă facem abstracție de spin, o stare cuantică determinată de numerele cuantice n, l, m poate fi populată de doi electroni. Dacă se ia în considerare spinul, starea poate fi caracterizată de numerele cuantice n, l, m, m_s și poate fi ocupată de un singur electron.

4.10 Teoria perturbațiilor

Ca și în mecanica clasică în mecanica cuantică marea majoritate a problemelor nu pot fi rezolvate exact. Rezultă că metodele de aproximare prezintă un mare interes. Metodele de aproximare pot fi împărțite în două categorii după cum hamiltonianul sistemului depinde sau nu de timp.

4.10.1 Teoria perturbațiilor independente de timp

Vom discuta cazul în care asupra sistemului acționează o mică perturbație. Vom prezenta teoria perturbației Rayleigh - Schrödinger care analizează modul în care nivelele energetice ale sistemului se modifică sub acțiunea perturbației.

Presupunem că Hamiltonianul sistemului este împărțit în două părți:

$$H = H_0 + H' \quad (4.566)$$

unde H_0 este hamiltonianul sistemului neperturbat iar H' reprezintă perturbația. Pentru rezolvarea problemei se introduce operatorul:

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda H' \quad (4.567)$$

unde λ este un parametru real. La finalul calculelor se pune $\lambda = 1$ și se obțin rezultatele corespunzătoare operatorului inițial. Când $\lambda = 0$ operatorul se reduce la operatorul neperturbat.

Mai mult, considerăm că problema cu funcții și valori proprii în cazul hamiltonianului neperturbat este rezolvată:

$$H_0 \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(0)} \quad (4.568)$$

Cazul sistemului nedegenerat

Vom considera problema cu valori și funcții proprii pentru operatorul $H_0 + \lambda H'$:

$$(H_0 + \lambda H') \Psi_k = E_k \Psi_k \quad (4.569)$$

Ideea de bază în acest caz este că funcția de stare Ψ_k și energia E_k se pot dezvolta în serie de puteri în funcție de λ :

$$\Psi_k = \Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \lambda^2 \Psi_k^{(2)} + \dots \quad (4.570)$$

$$E_k = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots \quad (4.571)$$

Înlocuind relațiile (4.570) și (4.571) în (4.569) se obține:

$$(H_0 + \lambda H') \left(\Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \dots \right) = \left(E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \dots \right) \left(\Psi_k^{(0)} + \lambda \Psi_k^{(1)} + \dots \right)$$

Identificând coeficienții aceluiași puteri ale lui λ se obține:

$$H_0 \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(0)} \quad (4.572)$$

$$H_0 \Psi_k^{(1)} + H' \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(1)} + E_k^{(1)} \Psi_k^{(0)} \quad (4.573)$$

$$H_0 \Psi_k^{(2)} + H' \Psi_k^{(1)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(2)} + E_k^{(1)} \Psi_k^{(1)} + E_k^{(2)} \Psi_k^{(0)} \quad (4.574)$$

Ecuția (4.572) reprezintă aproximația de ordin zero, ecuația (4.573) corecția de ordin 1, iar ecuația (4.574) corecția de ordin 2. Ecuția care dă corecția de ordin zero a fost presupusă ca fiind rezolvată. Ecuția (4.573) se scrie:

$$\left(H_0 - E_k^{(0)} \right) \Psi_k^{(1)} + \left(H' - E_k^{(1)} \right) \Psi_k^{(0)} = 0 \quad (4.575)$$

Se efectuează produsul scalar:

$$\left(\Psi_k^{(0)}, \left(H_0 - E_k^{(0)} \right) \Psi_k^{(1)} \right) + \left(\Psi_k^{(0)}, \left(H' - E_k^{(1)} \right) \Psi_k^{(0)} \right) = 0 \quad (4.576)$$

sau:

$$\left(\Psi_k^{(0)}, H_0 \Psi_k^{(1)} \right) - \left(\Psi_k^{(0)}, E_k^{(0)} \Psi_k^{(1)} \right) + \left(\Psi_k^{(0)}, H' \Psi_k^{(0)} \right) - \left(\Psi_k^{(0)}, E_k^{(1)} \Psi_k^{(0)} \right) = 0$$

$$\left(H_0 \Psi_k^{(0)}, \Psi_k^{(1)} \right) - E_k^{(0)} \left(\Psi_k^{(0)}, \Psi_k^{(1)} \right) + \left(\Psi_k^{(0)}, H' \Psi_k^{(0)} \right) - E_k^{(1)} \left(\Psi_k^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) = 0$$

Deoarece $H_0 \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \Psi_k^{(0)}$ și $\left(\Psi_k^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) = 1$ atunci:

$$E_k^{(1)} = \left(\Psi_k^{(0)}, H' \Psi_k^{(0)} \right) \quad (4.577)$$

În mod analog se poate calcula și corecția de ordin doi la energie:

$$E_k^{(2)} = \left(\Psi_k^{(0)}, \left(H' - E_k^{(1)} \right) \Psi_k^{(0)} \right) \quad (4.578)$$

Deoarece funcțiile $\Psi_k^{(0)}$ formează un sistem complet de funcții proprii atunci:

$$\Psi_k^{(1)} = \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \Psi_m^{(0)} \quad (4.579)$$

Înlocuind în (4.573) se obține

$$H_0 \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \Psi_m^{(0)} + H' \Psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \Psi_m^{(0)} + E_k^{(1)} \Psi_k^{(0)} \quad (4.580)$$

sau:

$$\left(H_0 - E_k^{(0)} \right) \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \Psi_m^{(0)} + \left(H' - E_k^{(1)} \right) \Psi_k^{(0)} = 0 \quad (4.581)$$

Rezultă:

$$\left(\Psi_l^{(0)}, \left(H_0 - E_k^{(0)} \right) \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \Psi_m^{(0)} \right) + \left(\Psi_l^{(0)}, \left(H' - E_k^{(1)} \right) \Psi_k^{(0)} \right) = 0 \quad (4.582)$$

$$\left(\Psi_l^{(0)}, \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \right) \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \Psi_m^{(0)} \right) + \left(\Psi_l^{(0)}, H' \Psi_k^{(0)} \right) - E_k^{(1)} \left(\Psi_l^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) = 0$$

Deoarece $\left(\Psi_l^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) = \delta_{lk}$ atunci:

$$\left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} \right) \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \left(\Psi_l^{(0)}, \Psi_m^{(0)} \right) + \left(H'_{lk} - E_k^{(1)} \delta_{lk} \right) = 0 \quad (4.583)$$

unde $H'_{lk} = \left(\Psi_l^{(0)}, H' \Psi_k^{(0)} \right)$

$$\left(E_l^{(0)} - E_k^{(0)} \right) a_{kl} + \left(H'_{lk} - E_l^{(1)} \delta_{lk} \right) = 0 \quad (4.584)$$

Pentru $k \neq l$

$$a_{kl} = \frac{H'_{lk}}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} \quad (4.585)$$

Se observă că a_{kk} rămâne nedeterminat. Pentru determinarea acestui coeficient se pune condiția de normare pentru funcția $\Psi_k = \Psi_k^{(0)} + \lambda\Psi_k^{(1)}$:

$$(\Psi_k, \Psi_k) = \left(\Psi_k^{(0)} + \lambda\Psi_k^{(1)}, \Psi_k^{(0)} + \lambda\Psi_k^{(1)} \right) = 1 \quad (4.586)$$

Ținând cont de expresia funcției $\Psi_k^{(1)}$ atunci:

$$\left(\Psi_k^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) + \lambda a_{km} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\Psi_k^{(0)}, \Psi_m^{(0)} \right) + \lambda a_{mk}^* \sum_{m=1}^{\infty} \left(\Psi_m^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) = 1 \quad (4.587)$$

Deoarece am considerat parametrul λ foarte mic atunci termenii care conțin pătratul acestuia se neglijează.

$$1 + \lambda (a_{kk} + a_{kk}^*) = 1 + 2\lambda \operatorname{Re} a_{kk} = 1 \quad (4.588)$$

Relația este îndeplinită pentru $a_{kk} = 0$.

Cazul sistemului degenerat

Dacă o stare este degenerată, unei valori a energiei $E_k^{(0)}$ îi corespund n funcții independente $\Psi_{k\alpha}^{(0)}$ cu $\alpha = 1, 2, \dots, n$.

Considerăm funcția de undă a stării perturbate:

$$\Psi_{k\alpha} = \sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} \Psi_{k\alpha}^{(0)} + \lambda \Psi_{k\alpha}^{(1)} \quad (4.589)$$

Energia stării este:

$$E_k = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \dots \quad (4.590)$$

Înlocuind în relația (4.569) se obține:

$$(H_0 + \lambda H') \left(\sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} \Psi_{k\alpha}^{(0)} + \lambda \Psi_{k\alpha}^{(1)} \right) = \left(E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} \right) \left(\sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} \Psi_{k\alpha}^{(0)} + \lambda \Psi_{k\alpha}^{(1)} \right)$$

Ca și în cazul anterior pentru perturbația de ordin unu se obține:

$$\left(H_0 - E_k^{(0)} \right) \Psi_{k\alpha}^{(1)} + \sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} \left(H' - E_k^{(1)} \right) \Psi_{k\alpha}^{(0)} = 0 \quad (4.591)$$

Alegem corecția la funcția de undă ca fiind:

$$\Psi_{k\alpha}^{(1)} = \sum_{s,\gamma} c_{k\alpha,s\gamma} \Psi_{s\gamma}^{(0)} \quad (4.592)$$

Se înlocuiește (4.592) în (4.591). Atunci:

$$\sum_{s,\gamma} \left(H_0 - E_k^{(0)} \right) c_{k\alpha,s\gamma} \Psi_{s\gamma}^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} \left(H' - E_k^{(1)} \right) \Psi_{k\alpha}^{(0)} = 0 \quad (4.593)$$

Se înmulțește la stânga cu $\Psi_{k\beta}^{(0)}$ efectuându-se produsul scalar. Atunci:

$$\begin{aligned} & \sum_{s,\gamma} c_{k\alpha,s\gamma} \left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, H_0 \Psi_{s\gamma}^{(0)} \right) - \sum_{s\gamma} E_k^{(0)} c_{k\alpha,s\gamma} \left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, \Psi_{s\gamma}^{(0)} \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} \left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, H' \Psi_{k\alpha}^{(0)} \right) - E_k^{(1)} \sum_{\alpha=1}^n \left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, \Psi_{k\alpha}^{(0)} \right) \end{aligned} \quad (4.594)$$

sau:

$$\begin{aligned} & \sum_{s,\gamma} c_{k\alpha,s\gamma} \left(E_s^{(0)} - E_k^{(0)} \right) \left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, \Psi_{s\gamma}^{(0)} \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} H_{k\beta,k\alpha} - E_k^{(1)} \sum_{\alpha=1}^n \left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, \Psi_{k\alpha}^{(0)} \right) \end{aligned} \quad (4.595)$$

unde

$$H_{k\beta,k\alpha} = \left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, H' \Psi_{k\alpha}^{(0)} \right) \quad (4.596)$$

Dacă $s \neq k$, $\left(\Psi_{k\beta}^{(0)}, \Psi_{s\gamma}^{(0)} \right) = 0$ iar dacă $s = k$, $E_s^{(0)} - E_k^{(0)} = 0$ astfel că primul membru al ecuației de mai sus este nul. Rezultă:

$$\sum_{\alpha=1}^n a_{k\alpha} \left(H_{k\beta,k\alpha} - E_k^{(1)} \delta_{\beta\alpha} \right) = 0 \quad (4.597)$$

Relațiile (4.597) sunt valabile pentru $\beta = 1, 2, \dots, n$. Se obține un sistem de ecuații pe care-l vom scrie desfășurat:

$$\begin{aligned}
a_{k1} \left(H_{k1,k1} - E_k^{(1)} \right) + a_{k2} H_{k1,k2} + \dots + a_{kn} H_{k1,kn} &= 0 \\
a_{k1} H_{k2,k1} + a_{k2} \left(H_{k2,k2} - E_k^{(1)} \right) + \dots + a_{kn} H_{k2,kn} &= 0 \\
a_{k1} H_{kn,k1} + a_{k2} H_{kn,k2} + \dots + a_{kn} \left(H_{kn,kn} - E_k^{(1)} \right) &= 0
\end{aligned}$$

Acesta este un sistem omogen de n ecuații cu n necunoscute. Pentru ca acest sistem să fie compatibil este necesar ca determinantul său să fie nul. Rezultă:

$$\begin{vmatrix}
H_{k1,k1} - E_k^{(1)} & H_{k1,k2} & \dots & H_{k1,kn} \\
H_{k2,k1} & H_{k2,k2} - E_k^{(1)} & \dots & H_{k2,kn} \\
\dots & \dots & \dots & \dots \\
H_{kn,k1} & H_{kn,k2} & \dots & H_{kn,kn} - E_k^{(1)}
\end{vmatrix} = 0 \quad (4.598)$$

Se obține astfel o ecuație de gradul n în $E_k^{(1)}$. Rădăcinile ecuației le vom nota cu $E_{k\alpha}^{(1)}$ unde $\alpha = 1, 2, 3, \dots, n$. Dacă există toate cele n soluții perturbația ridică complet degenerarea, în caz contrar degenerarea este ridicată parțial. Energiile subnivelelor devin:

$$E_{k\alpha} = E_k^{(0)} + E_{k\alpha}^{(1)} \quad (4.599)$$

4.10.2 Metoda perturbațiilor dependente de timp

În cazul unor sisteme supuse unor perturbații dependente de timp energia nu mai este o constantă a mișcării și din acest motiv hamiltonianul sistemului este dependent de timp iar ecuația de mișcare nu poate fi rezolvată exact.

Vom considera că perturbația în timp a hamiltonianului este mică în comparație cu partea staționară a acestuia. Fie un sistem al cărui hamiltonian dependent de timp este:

$$H(t) = H_0 + H'(t) \quad (4.600)$$

unde H_0 este independent de timp și pentru care se presupune că funcțiile proprii Ψ_k^0 și valorile proprii $E_k^{(0)}$ sunt cunoscute. Aceasta este echivalent

cu a cunoaște stările staționare sistemului și funcțiile de stare corespunzătoare. Ecuația Schrödinger temporală pentru cazul hamiltonianului neperturbat este:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H_0 \Psi(t) \quad (4.601)$$

O soluție generală a acestei ecuații este:

$$\Psi^{(0)}(t) = \sum_k a_k^{(0)} \Psi_k(t) = \sum_k a_k^{(0)} \Psi_k^{(0)} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] \quad (4.602)$$

Considerând că ecuația de mai sus este funcția de stare a sistemului dat putem interpreta pe $|a_k^{(0)}|^2$ ca fiind probabilitatea sistemului să se afle în starea k . Deoarece funcția $\Psi^{(0)}(t)$ se presupune normată la unitate, atunci:

$$\sum_k |a_k^{(0)}|^2 = 1 \quad (4.603)$$

În cazul că hamiltonianul este dependent de timp nu există soluții staționare ale ecuației Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H \Psi(t) \quad (4.604)$$

și energia nu se conservă, astfel că nu vom căuta corecții ale nivelelor de energie. În schimb se poate determina în mod aproximativ funcția de undă perturbată Ψ în funcție de funcțiile neperturbate $\Psi_k^{(0)}(t)$. Pentru aceasta vom folosi metoda variației constantelor. Deoarece $\Psi_k^{(0)}(t)$ formează un set complet de funcții atunci funcția Ψ se poate scrie ca:

$$\Psi = \sum_k a_k(t) \Psi_k(t) = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] \quad (4.605)$$

Ca și în cazul anterior vom considera ecuația Schrödinger pentru un hamiltonian de forma:

$$H(t) = H_0 + \lambda H'(t) \quad (4.606)$$

unde λ este considerat un parametru foarte mic. Atunci, ecuația (4.604) devine:

$$\begin{aligned} & i\hbar \sum_k \left[\frac{da_k(t)}{dt} - \frac{iE_k}{\hbar} a_k(t) \right] \Psi_k^{(0)} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] \\ &= \sum_k [H_0 + \lambda H'(t)] a_k(t) \Psi_k^{(0)} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (4.607)$$

Dacă se ține cont de ecuația neperturbată, rezultă:

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \Psi_k^{(0)} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] = \lambda \sum_k H' a_k \Psi_k^{(0)} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] \quad (4.608)$$

unde a_k depind de timp.

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) e^{-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar}} = \lambda \sum_k a_k \left(\Psi_n^{(0)}, H' \Psi_k^{(0)} \right) e^{-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar}}$$

Notăm cu:

$$H'_{nk} = \left(\Psi_n^{(0)}, H' \Psi_k^{(0)} \right) \quad (4.609)$$

Cum $\left(\Psi_n^{(0)}, \Psi_k^{(0)} \right) = \delta_{nk}$, atunci:

$$\begin{aligned} & i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \delta_{nk} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] = \lambda \sum_k a_k H'_{nk} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] \\ & i\hbar \frac{da_n}{dt} \exp \left[-\frac{iE_n^{(0)}t}{\hbar} \right] = \lambda \sum_k a_k H'_{nk} \exp \left[-\frac{iE_k^{(0)}t}{\hbar} \right] \\ & i\hbar \frac{da_n}{dt} = \lambda \sum_k a_k H'_{nk} \exp \left[\frac{i \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) t}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (4.610)$$

Dacă se notează cu:

$$\omega_{nk} = \frac{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})}{\hbar} \quad (4.611)$$

ecuația devine:

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \lambda \sum_k a_k H'_{nk} \exp(i\omega_{nk}t) \quad (4.612)$$

Pentru toate valorile lui n mărimea $\frac{da_n}{dt}$ depinde de toate stările prin intermediul elementului de matrice H'_{nk} . Din acest motiv vom considera dezvoltarea în serie a lui $a_k(t)$:

$$a_k(t) = a_k^{(0)} + \lambda a_k^{(1)} + \lambda^2 a_k^{(2)} + \dots = \sum_s \lambda^s a_k^{(s)}(t) \quad (4.613)$$

Introducând (4.613) în ecuația (4.612) se obține:

$$i\hbar \sum_s \lambda^s \frac{da_n^{(s)}}{dt} = \lambda \sum_k \sum_s \lambda^s a_k^{(s)} H'_{nk} \exp(i\omega_{nk}t) \quad (4.614)$$

Prin egalarea coeficienților lui λ se obțin ecuațiile:

$$\frac{da_n^{(0)}}{dt} = 0 \quad (4.615)$$

$$i\hbar \frac{da_n^{(1)}}{dt} = \sum_k a_k^{(0)} H'_{nk} \exp(i\omega_{nk}t) \quad (4.616)$$

.....

$$i\hbar \frac{da_n^{(s)}}{dt} = \sum_k a_k^{(0)} H'_{nk} \exp(i\omega_{nk}t) \quad (4.617)$$

Din ecuațiile (4.615) rezultă că mărimile $a_n^{(0)}$ sunt constante. Celelalte mărimi se determină în funcție de acestea.

Considerăm că inițial sistemul se află într-o stare staționară neper-turbată cu energia E_i caracterizată de funcția de stare $\Psi_i^{(0)}$. Atunci $a_k^{(0)} = \delta_{ki}$. În acest caz ecuația (4.615) devine:

$$\frac{da_n^{(1)}}{dt} = (i\hbar)^{-1} H'_{ni} \exp(i\omega_{ni}t) \quad (4.618)$$

Atunci:

$$a_n^{(1)} = (i\hbar)^{-1} \int_0^\tau H'_{ni} \exp(i\omega_{ni}t) dt \quad (4.619)$$

Astfel, în aproximația de ordinul întâi funcția de stare corespunde unei suprapuneri de stări. Mărimea $|a_n^{(1)}|^2$ reprezintă probabilitatea ca sistemul să se afle în starea n . Putem interpreta modulul pătrat al coeficientului $a_n^{(1)}$ ca fiind probabilitatea ca sistemul să facă o tranziție din starea i în starea n .

$$P_{i \rightarrow n} = |a_n^{(1)}|^2 \quad (4.620)$$

Dacă perturbația este constantă în timp atunci termenul H'_{ni} este constant și iese de sub semnul integralei. Rezultă:

$$a_n^{(1)} = \frac{H'_{ni}}{i\hbar} \int_0^\tau \exp(i\omega_{ni}t) dt = \frac{H'_{ni}}{i\hbar} \frac{\exp(i\omega_{ni}\tau) - 1}{i\omega_{ni}} \quad (4.621)$$

Atunci:

$$P_{i \rightarrow n} = \frac{4 |H'_{ni}|^2 \sin^2 \frac{\omega_{ni}\tau}{2}}{\hbar^2 \omega_{ni}^2} \quad (4.622)$$

Această probabilitate mai poate fi exprimată astfel:

$$P_{i \rightarrow n} = \frac{2}{\hbar^2} |H'_{ni}|^2 f(\tau, \omega_{ni}) \quad (4.623)$$

unde:

$$f(\tau, \omega) = \frac{2 \sin^2(\omega\tau/2)}{\omega^2} \quad (4.624)$$

Se observă că $f(\tau, 0) = \tau^2/2$. Pentru un τ fixat funcția prezintă un maxim pentru $\omega \rightarrow 0$ și are lărgimea la semînățime aproximativ egală cu $2\pi/\tau$. Punând $x = \omega\tau/2$ se observă că:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau, \omega) d\omega = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi\tau \quad (4.625)$$

Vor fi favorizate acele tranziții pentru care $\Delta\omega = 2\pi/\tau$, adică pentru care energia se găsește în intervalul $\Delta E = 2\pi\hbar/\tau$.

Tranziția spre un grup de stări. Regula de aur a mecanicii cuantice

În loc să se considere o tranziție către o stare finală n ne interesează tranziția către un grup de stări f a căror energie se află în intervalul $(E_n - \Delta E, E_n + \Delta E)$ centrat pe valoarea E_n . Acest lucru se întâmplă atunci când au loc tranziții în spectrul continuu de energii.

Vom nota cu $\rho(E_n)$ densitatea de nivele energetice pe scara energiei, astfel că $\rho(E_n)dE_n$ reprezintă numărul de stări finale într-un interval energetic dE_n centrat pe energia E_n . Vom presupune în continuare că perturbația este constantă în intervalul de timp $(0, \tau)$.

Probabilitatea de tranziție în aproximația de ordin unu către grupul de stări finale a căror energie este în intervalul $(E_n - \Delta E, E_n + \Delta E)$ se obține multiplicând probabilitatea $P_{i \rightarrow n}$ cu $\rho(E_n)dE_n$ și apoi integrând în raport cu energia E_n .

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2}{\hbar^2} \int_{E_n - \Delta E}^{E_n + \Delta E} |H'_{ni}|^2 f(\tau, \omega_{ni}) \rho(E_n) dE_n \quad (4.626)$$

unde:

$$\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar} \quad (4.627)$$

Dacă presupunem că ΔE este suficient de mic atunci H'_{ni} și $\rho(E_n)$ pe intervalul energetic considerat sunt aproximativ constante. Atunci:

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2}{\hbar^2} |H'_{ni}|^2 \rho(E_n) \int_{E_n - \Delta E}^{E_n + \Delta E} f(\tau, \omega_{ni}) dE_n \quad (4.628)$$

Putem presupune că durata perturbației este suficient de lungă astfel că $\Delta E \gg 2\pi\hbar/\tau$ integrala din (4.628) putând fi extinsă de la $-\infty$ la $+\infty$.
Rezultă:

$$\int_{E_n - \Delta E}^{E_n + \Delta E} f(\tau, \omega_{ni}) dE_n \simeq \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} f(\tau, \omega_{ni}) d\omega_{ni} = \hbar \pi \tau \quad (4.629)$$

și relația (4.628) devine:

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ni}|^2 \rho(E_n) \tau \quad (4.630)$$

Se poate defini probabilitatea de tranziție în unitatea de timp

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{P_{i \rightarrow f}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ni}|^2 \rho(E_n) \quad (4.631)$$

Formula a fost obținută pentru prima dată de Dirac iar apoi a fost denumită de Fermi "Regula de aur a mecanicii cuantice". Deși a fost stabilită în cazul unei perturbații constante în timp ea poate fi generalizată și în alte cazuri având o aplicabilitate extrem de mare în fizica atomică și nucleară (împrăștiere elastică, interacție cu radiația electromagnetică).

Capitolul 5

Fizică atomică

5.1 Introducere

5.1.1 Spinul fotonului

Problema momentului cinetic al fotonului va fi discutată din punct de vedere clasic și cuantic. Tratatul problemelor din acest capitol va fi mai degrabă una calitativă.

Să adoptăm pentru început un punct de vedere clasic. Vom presupune că o sarcină electrică e se află pe o orbită de rază r în jurul unei sarcini egale dar de semn contrar considerată fixă. Un exemplu este cazul atomului de hidrogen. În mișcarea circulară energia totală este egală cu suma dintre energia cinetică și energia potențială:

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (5.1)$$

adică jumătate din energia potențială a sarcinii care se află în mișcare de rotație. Mișcarea circulară este o mișcare accelerată astfel că din punct de vedere al fizicii clasice sarcina e trebuie să emită unde electromagnetice. Din acest motiv sarcina nu-si poate păstra traiectoria circulară staționară ci trebuie să se apropie de nucleu. Presupunem că în cursul unei rotații complete modificarea razei traiectoriei este mult mai mică decât r . Putem astfel considera mișcarea particulei ca fiind una circulară cu o rază care se micșorează în mod continuu. Variația energiei și variația razei traiectoriei

sunt legate prin relația:

$$dE = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r^2} dr \quad (5.2)$$

Momentul cinetic al particulei este $L = mr^2\omega$ unde m este masa particulei, iar ω este pulsația. Dar pentru o mișcare circulară forța de atracție electrostatică este egală cu forța centrifugă (într-un sistem de referință legat de particula care se rotește).

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m\omega^2 r \quad (5.3)$$

De aici rezultă pulsația:

$$\omega = \frac{e}{(4\pi\epsilon_0 mr^3)^{1/2}} \quad (5.4)$$

astfel că:

$$L = e \left(\frac{mr}{4\pi\epsilon_0} \right)^{1/2} \quad (5.5)$$

Atunci:

$$dL = \frac{e}{2} \left(\frac{m}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^{1/2} dr \quad (5.6)$$

iar din 5.2 și 5.6:

$$\frac{dE}{dL} = \frac{e}{(4\pi\epsilon_0 mr^3)^{1/2}} = \omega \quad (5.7)$$

Rezultă că atunci când sarcina execută o mișcare circulară energia și momentul cinetic se micșorează astfel încât variațiile lor sunt legate prin relația (5.7).

În sistemul format din substanță și radiație, energia totală și momentul cinetic total se conservă. Astfel, substanța și radiația pot schimba energie și moment cinetic. Când raza r variază cu dr radiația preia energia $-dE$ și momentul cinetic $-dL$.

Structura radiației este determinată de procesele care se petrec în emițător. Din momentul în care radiația părăsește emițătorul, toate legăturile sunt rupte, astfel că emițătorul și radiația se comportă ca sisteme independente. Pentru radiație raportul dintre energie și momentul

Figura 5.1: Unde plane polarizate circular determinate de o mulțime de dipoli care se rotesc într-un plan

său cinetic este o proprietate intrinsecă. Rezultă că pentru radiația care poartă energia E_{rad} și momentul cinetic L_{rad} este valabilă relația:

$$\frac{E_{rad}}{L_{rad}} = \omega = \frac{2\pi c}{\lambda} \quad (5.8)$$

deoarece raportul dintre mărimea energiei și mărimea momentului cinetic primit este tot timpul constant și egal cu ω .

În cazul considerat mai sus structura radiației emise și intensitatea sa sunt complicate ele depinzând de direcția de emisie. Pe o direcție perpendiculară pe planul traiectoriei circulare a sarcinii e , radiația prezintă o polarizare circulară, în planul traiectoriei radiația este polarizată liniar iar pe alte direcții radiația este polarizată eliptic.

Din acest motiv vom utiliza în continuare pentru discuție un emițător care să emită unde plane. Aceasta se petrece dacă se consideră un plan infinit plasat în vid pe care sunt repartizați uniform dipoli electrici paraleli cu acest plan și care se rotesc în jurul centrului lor cu aceeași viteză unghiulară având aceeași fază inițială. Acest plan emite două unde plane care se propagă în direcții opuse, undele fiind polarizate circular. Relația (5.8) se verifică pentru fiecare din cele două unde. Sensul de rotație al vectorilor \vec{E} și \vec{H} trebuie să coincidă cu sensul de rotație al dipolului \vec{p} pentru ambele unde. Conform acestui sens momentul cinetic al celor două unde are direcția perpendiculară pe planul dipolilor și are sensul de la stânga la dreapta (Fig. 5.1).

Sensul de rotație al dipolilor determină sensul momentului cinetic al dipolilor. Sensul momentului cinetic al undelor este același ca și al

dipolilor deoarece radiația emisă de aceștia preia în afară de energie și moment cinetic.

Cele două unde se îndepărtează de sursă în așa fel încât vectorii Poynting ai celor două unde sunt îndreptați înspre exterior. Se observă că vectorul \vec{S} al undei care se propagă spre dreapta este orientat în sensul lui \vec{L} , iar vectorul \vec{S} al undei care se propagă spre stânga este în sens contrar lui \vec{L} . Unda care se propagă spre dreapta este polarizată circular stânga, iar unda care se propagă spre stânga este polarizată circular dreapta. Trebuie să remarcăm că dispunerea vectorilor \vec{E} și \vec{H} determină în mod univoc direcția vectorului Poynting dar nu permite să decidem dacă polarizarea este circulară dreapta sau stânga.

Se ajunge astfel la următorul rezultat: Toate undele electromagnetice plane cu frecvența ω , polarizate circular, transportă un moment cinetic legat de energia undei prin relația (5.8). Dacă unda este polarizată circular stânga \vec{L}_{rad} este orientat în sensul propagării undei iar dacă unda este polarizată circular dreapta sensul vectorului \vec{L}_{rad} este în sens invers sensului de propagare al undei.

Cazul undelor polarizate liniar se reduce la cel al undelor polarizate circular, deoarece unda se poate descompune în două unde circulare, una polarizată dreapta și alta polarizată stânga.

Din punct de vedere cuantic emisia unei radiații electromagnetice de către o particulă care se deplasează pe o traiectorie circulară în jurul alteia de semn contrar și considerată fixă constă în emisia unui foton urmată simultan de modificarea bruscă a energiei și razei traiectoriei particulei ce se rotește. În cele ce urmează vom considera că probabilitatea de emisie a doi fotoni simultan este foarte mică.

Atunci când electronul trece dintr-o stare staționară în altă stare staționară procesul este acompaniat de emisia unui foton de energie $\hbar\omega$. Proiecția momentului cinetic al atomului pe o direcție dată (axa Oz) datorat mișcării orbitale a electronului nu poate lua decât anumite valori și anume $m\hbar$. Presupunem că în cursul acestei emisii proiecția momentului cinetic orbital variază cu \hbar . Aceasta înseamnă că în emisia unui foton atomul pierde energia $\hbar\omega$ și momentul cinetic \hbar . Conform legilor de conservare a energiei și momentului cinetic, energia și momentul cinetic pierdute de atom le regăsim în radiație.

Momentul cinetic preluat de foton are în principiu două componente și anume o componentă orbitală și una intrinsecă care poartă numele de

spin. Presupunem că fotonul emis de un atom nu posedă nici un moment cinetic orbital. Pentru a furniza o justificare a acestei afirmații este de remarcat că lungimea de undă a fotonului emis de atom (10^{-7} m) este mult mai mare decât dimensiunile atomului (10^{-10} m). Dar fotonul nu poate fi localizat precis într-o regiune din spațiu ale cărei dimensiuni liniare sunt mai mici decât dimensiunile acestei lungimi de undă. Pe de altă parte cum dimensiunile atomului sunt mult mai mici decât lungimea de undă λ , atomul emite practic fotonul "central" astfel că acesta nu va avea practic nici un moment cinetic orbital, ci numai un moment cinetic propriu. Pentru ca fotonul să aibă un moment cinetic orbital ar trebui ca emisia să fie "oblică" adică să aibă loc dintr-o regiune periferică a atomului aflată față de centrul acestuia la o distanță de ordinul lungimii de undă λ . La această distanță modulul pătrat al funcției de undă a electronului care determină probabilitatea ca acesta să fie în acea regiune este extrem de mică. Atunci și probabilitatea de emisie a unui foton din această regiune este extrem de mică.

Momentul cinetic intern al fotonului (care este o caracteristică intrinsecă a acestuia), ca și în cazul electronului poartă numele de spin. Proiecția pe direcția Oz a momentului cinetic al spinului are valoarea absolută egală cu \hbar tocmai pentru a fi îndeplinită legea de conservare a momentului cinetic. Dacă facem raportul dintre energia fotonului emis și proiecția momentului său cinetic pe direcția Oz se obține valoarea ω :

$$\frac{E}{L_z} = \frac{\hbar\omega}{\hbar} = \omega$$

Atunci, ca în cazul oricărui moment cinetic spinului fotonului i se poate atașa un operator \vec{S}_i astfel că valorile proprii ale pătratului acestuia vor fi de forma $s(s+1)\hbar^2$, unde s poartă numele de număr cuantic de spin. Operatorul proiecției pe direcția Oz, S_z poate avea valorile proprii $m_s\hbar$ unde $m_s = -s, \dots, s$. Cum am văzut că valoarea maximă a proiecției spinului fotonului pe axa Oz este \hbar rezultă că $s = 1$ iar pătratul momentului spinului fotonului are valoarea $2\hbar^2$. Referitor la alegerea axei Oz pe care considerăm proiecția momentului cinetic vom observa că fotonul este o particulă care este în mișcare cu viteza c . Atunci axa Oz o vom considera ca fiind direcția de mișcare a fotonului. Deoarece $s = 1$ există pentru spin $2s + 1 = 3$ orientări. În primul caz proiecția momentului cinetic de spin este orientată în sensul mișcării $m_s = 1$, a doua în sens contrar $m_s = -1$ și a treia direcție pentru care proiecția spinului este nulă. În

fapt cele trei posibilități nu se realizează, experiența ducând la această concluzie. Transversalitatea undelor electromagnetice implică faptul că pentru a realiza orice tip de polarizare este suficient să suprapunem două unde și nu trei. Conform principiului superpoziției, ne așteptăm ca și în teoria cuantică o stare să se realizeze prin suprapunerea a două stări independente ale fotonului. Pentru aceasta trebuie studiată relația care există între polarizare și spinul fotonului. În teoria cuantică noțiunea de polarizare nu are o semnificație la fel de intuitivă ca în fizica clasică. Dar polarizarea există ca fenomen observabil astfel încât el trebuie pus în evidență într-o teorie cuantică. Singura mărime care prezintă orientare și caracterizează fotonul este spinul său. Astfel, se consideră că dacă proiecția spinului este orientată în sensul de propagare al luminii fotonul este polarizat stânga iar dacă aceasta este orientată în sens contrar spunem că fotonul este polarizat dreapta.

În optica clasică se poate realiza orice tip de polarizare (liniară și eliptică) prin suprapunerea a două unde plane coerente care se propagă în aceeași direcție, una fiind polarizată circular dreapta, alta fiind polarizată circular stânga.

Astfel, starea unui foton circular polarizat care se propagă într-o direcție dată trebuie considerată ca o stare proprie căreia îi corespunde una din valorile proprii ale proiecției spinului pe direcția de propagare $+1$ și -1 . Prin suprapunerea liniară a acestor stări se poate obține orice polarizare a fotonului. Starea pentru care $m_s = 0$ nu se realizează ca stare pură ci ca o stare mixtă. Din punct de vedere matematic funcția de undă este o combinație liniară a funcțiilor de undă corespunzătoare valorilor proprii ale proiecției spinului pe axa Oz: $+1$ și -1 . Atunci, coeficienții celor două funcții de undă care determină starea mixtă reprezintă probabilitatea cu care la măsurarea proiecției spinului se obțin valorile $+1$ și -1 . De aceea dacă se măsoară m_s se obțin doar două valori pentru acest număr cuantic: $+1$ și -1 .

5.1.2 Compunerea momentelor cinetice

Considerăm un sistem format din două particule. Notăm cu \vec{r}_1 vectorul de poziție al primei particule și cu \vec{r}_2 vectorul de poziție al celei de-a doua particule. Fie \vec{L}_1 momentul cinetic asociat primei particule și \vec{L}_2 momentul cinetic asociat celei de-a doua particule. Definim momentul cinetic \vec{L} corespunzător sistemului celor două particule care nu

interacționează între ele prin expresia:

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \quad (5.9)$$

În același mod se definește operatorul proiecției momentului cinetic pe axa Oz:

$$L_z = L_{1z} + L_{2z} \quad (5.10)$$

Deoarece particulele nu interacționează între ele funcția de undă $\Psi_1(\vec{r}_1)$ corespunzătoare primei particule nu depinde de prezența sau absența celei de-a doua particule. Notăm cu $\Psi_2(\vec{r}_2)$ funcția de undă corespunzătoare celei de-a doua particule. Atunci, funcția de undă a sistemului se poate scrie sub forma unui produs:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) \quad (5.11)$$

Deoarece variabilele sunt separate în funcția de undă $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ operatorii \vec{L}_1 și \vec{L}_2 sunt comutativi. Din acest motiv pătratul operatorului moment cinetic total se poate scrie:

$$\vec{L}^2 = (\vec{L}_1 + \vec{L}_2)^2 = \vec{L}_1^2 + 2(\vec{L}_1 \vec{L}_2) + \vec{L}_2^2 \quad (5.12)$$

Se pot demonstra următoarele relații de comutare : $[\vec{L}^2, L_z] = 0$, $[\vec{L}^2, L_x] = 0$, $[\vec{L}^2, L_y] = 0$, $[\vec{L}_1, \vec{L}_2] = 0$, $[\vec{L}, \vec{L}_1] = 0$, $[\vec{L}, \vec{L}_2] = 0$

Considerăm că prima particulă are numerele cuantice l_1 și m_1 , iar cea de-a doua particulă are numerele cuantice l_2 și m_2 , unde m_1 poate lua $2l_1 + 1$ valori iar m_2 poate lua $2l_2 + 1$ valori. Notăm că funcția de undă comună este $\Psi_{lm} = \Psi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = \Psi_{l_1 m_1} \Psi_{l_2 m_2}$.

Considerând că dacă pentru cele două particule numerele cuantice l_1 și l_2 sunt fixate, există $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ funcții de undă liniar independente, iar prin combinarea liniară a lor se poate caracteriza orice stare a sistemului.

Se pot defini într-un alt mod funcțiile de undă liniar independente caracterizate de numerele cuantice l_1 și l_2 . Vom considera că $l_1 > l_2$. Atunci, valorile maxime permise pentru numărul cuantic m ce caracterizează proiecția momentului cinetic pe axa Oz sunt arătate în tabelul de mai jos:

m_1	m_2	m
l_1	l_2	$l_1 + l_2$
l_1 $l_1 - 1$	$l_2 - 1$ l_2	$l_1 + l_2 - 1$
l_1 $l_1 - 1$ $l_1 - 2$	$l_2 - 2$ $l_2 - 1$ l_2	$l_1 + l_2 - 2$
.....
l_1	$-l_2$	$l_1 - l_2$

Valorile maxime ale numărului cuantic m sunt $l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2, \dots, l_1 - l_2$. Acestea sunt stări caracterizate de numerele cuantice $l = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2, \dots, l_1 - l_2$. Există astfel $2l_2 + 1$ valori posibile pentru numărul cuantic l . În fiecare caz numărul de stări este $2l + 1$ datorită numărului de proiecții posibile ale momentului cinetic total pe o axă. Numărul total de stări este

$$N = 2(l_1 + l_2) + 1 + 2(l_1 + l_2 - 1) + 1 + \dots + 2(l_1 - l_2) + 1$$

Suma este o progresie geometrică cu rația egală cu 2 și are $2l_2 + 1$ termeni. Rezultă:

$$N = (2l_2 + 1) \frac{2(l_2 - l_1) + 1 + 2(l_1 + l_2) + 1}{2} = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \quad (5.13)$$

Într-o stare dată operatorii corespunzători produselor scalare $\vec{L}_1 \vec{L}_2, \vec{L} \vec{L}_1, \vec{L} \vec{L}_2$ au valori proprii bine determinate. Din relația (5.12) rezultă:

$$\vec{L}_1 \vec{L}_2 = \frac{\vec{L}^2 - \vec{L}_1^2 - \vec{L}_2^2}{2} \quad (5.14)$$

Ținând cont de valorile proprii ale operatorilor $\vec{L}^2, \vec{L}_1^2, \vec{L}_2^2$ valorile proprii operatorului $\vec{L}_1 \vec{L}_2$ sunt:

$$\frac{l(l+1) - l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)}{2} \hbar^2 \quad (5.15)$$

Din

$$\vec{L}_2 = \vec{L} - \vec{L}_1 \quad (5.16)$$

Figura 5.2: Modelul vectorial aplicat la adunarea a două momente cinetice

prin ridicare la pătrat ținând cont de relația de comutare dintre \vec{L} și \vec{L}_1 rezultă:

$$\vec{L}_2^2 = \vec{L}^2 - 2\vec{L}\vec{L}_1 + \vec{L}_1^2$$

de unde:

$$\vec{L}\vec{L}_1 = \frac{\vec{L}^2 + \vec{L}_1^2 - \vec{L}_2^2}{2} \quad (5.17)$$

cu valorile proprii corespunzătoare:

$$\frac{l(l+1) + l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)}{2} \hbar^2 \quad (5.18)$$

Rezultatul poate fi obținut cu ajutorul unor diagrame vectoriale. Vectorii \vec{L}_1 și \vec{L}_2 sunt reprezentați de segmente de dreaptă orientate de lungimi $\sqrt{l_1(l_1+1)}$ și $\sqrt{l_2(l_2+1)}$ iar vectorul rezultat de un segment de mărime $\sqrt{l(l+1)}$. În Fig. 5.2 este reprezentată diagrama vectorială pentru $l_1 = 2$ și $l_2 = 1$. Valorile pe care le poate lua l sunt 3, 2 și 1.

5.2 Nivele energetice în atomi

Starea electronului într-un atom hidrogenoid, așa cum am discutat în Cap. 4, este caracterizată cu ajutorul a patru numere cuantice: n - număr cuantic principal, l - număr cuantic orbital, m_l - număr cuantic magnetic

și m_s - număr cuantic de spin (care determină proiecția vectorului \vec{s} pe axa Oz și care ia două valori $m_s = \pm 1/2$).

Momentul cinetic orbital și momentul de spin \vec{s} se adună vectorial și formează momentul cinetic total $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$. Proiecția momentului cinetic total pe o axă poate lua valorile $m_j \hbar$ cu $m_j = m_l \pm 1/2$. Deoarece j este valoarea maximă a numărului cuantic m_j rezultă că $j = l \pm 1/2$. Semnul $+$ corespunde cazului când spinul electronului este paralel cu \vec{l} iar semnul $-$ corespunde cazului când spinul este orientat antiparalel cu \vec{l} . Astfel, rezultă că j este un număr semiîntreg iar m_j ia valorile $-j, -(j-1), \dots, (j-1), j$. Pentru a caracteriza electronul dintr-un atom hidrogenoid putem înlocui cele patru numere cuantice n, l, m_l și m_s cu numerele n, l, j , și m_s . Pentru caracterizarea unui nivel energetic în spectroscopie se utilizează numerele n, l, j și $2s + 1$. Numărul cuantic l se înlocuiește cu litera corespunzătoare din tabelul de mai jos.

l	0	1	2	3
Notație	s	p	d	f

Se scrie întâi numărul cuantic principal și apoi litera corespunzătoare numărului cuantic l . Apoi acestei litere i se asociază numărul $2s + 1$ ca indice în stânga sus iar numărul j ca indice dreapta jos. Numărul $2s + 1$ poartă numele de indice de multiplicitate al nivelului. Pentru atomii cu un singur electron acest număr se poate suprima deoarece $s = 1/2$ și $2s + 1 = 2$ (stare de dublet). De exemplu, în starea $3^2s_{1/2}$ numărul cuantic principal este $n = 3$, $l = 0$, iar $j = 1/2$. În acest caz în formula $j = l \pm 1/2$ nu se ia în considerare semnul minus deoarece $l = 0$ și $j > 0$. Astfel starea nu este o stare de dublet veritabil. Un alt exemplu este dat de starea $4^2d_{3/2}$ în care numărul cuantic principal este $n = 4$, numărul cuantic orbital este $l = 2$, iar $j = 3/2$. În această stare spinul este antiparalel cu momentul cinetic orbital spre deosebire de starea $4^2d_{5/2}$ în care spinul este paralel cu momentul cinetic orbital. Starea d este o stare de dublet veritabil.

Principala interacție dintre un electron și nucleu este interacția electrostatică dar pentru un electron care este în mișcare față de nucleu apare o interacție suplimentară determinată de interacția spin orbită. Vom încerca să explicăm această interacție cu ajutorul modelului Bohr pentru atomul de hidrogen. Dacă se alege un sistem de referință legat de electron, nucleul (care este un proton) este în mișcare și el crează un

câmp magnetic \vec{B} care determină o acțiune asupra momentului magnetic de spin al electronului care este în repaus față de acest sistem de referință. Deoarece sarcinile protonului și a electronului sunt egale, nucleul în mișcare în referențialul mobil produce același câmp magnetic ca și un electron. Putem atunci privi această interacție ca o interacție între momentul magnetic de spin și momentul cinetic orbital al electronului.

Momentul magnetic de spin al electronului $\vec{\mu}_s$ se poate orienta paralel sau antiparalel cu câmpul magnetic orbital. În primul caz energia de interacție a electronului cu nucleul crește iar în cel de-al doilea caz scade. Prin urmare, datorită interacției spin-orbită nivelul energetic se scindează în două subnivele. Acest lucru nu se produce în starea s deoarece în această stare nu avem moment cinetic orbital. Despicierea nivelelor datorită interacției spin orbită poartă numele de structura fină a nivelelor energetice (există dubleți, tripleți). Nivelele energetice care nu se despică poartă numele de singleți. Astfel, pentru atomii care posedă doar un electron de valență, interacția spin-orbită provoacă despicierea tuturor nivelelor energetice cu excepția nivelelor s . Din acest motiv semnificația numărului $2s + 1$ este clară: acest număr determină numărul de subnivele datorate interacției spin-orbită.

Se poate estima ordinul de mărime al interacției spin orbită. Considerăm un atom de hidrogen în starea fundamentală. Câmpul magnetic creat de proton în sistemul de referință al electronului este:

$$B = \mu_0 \frac{I}{2r_0} \quad (5.19)$$

unde I este curentul datorat mișcării sarcinii pe orbită iar μ_0 este permeabilitatea magnetică a vidului.

$$I = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r_0} \quad (5.20)$$

Atunci inducția câmpului magnetic este:

$$B = \mu_0 \frac{ev}{4\pi r_0^2} \quad (5.21)$$

Energia de interacție (considerată în modul) cu câmpul magnetic al electronului considerând că momentul magnetic se așează paralel sau antiparalel cu \vec{B} este:

$$\mathcal{E}_m = B\mu_B = \mu_0 \frac{ev_0}{4\pi r_0^2} \mu_B \quad (5.22)$$

unde μ_B este magnetonul Bohr.

Dacă se ține cont de expresia razei primei orbite Bohr se obține energia de interacție magnetică în funcție de viteza pe prima orbită v_0 :

$$\mathcal{E}_m = \frac{mv_0^4}{2c^2} \quad (5.23)$$

Modulul energiei \mathcal{E}_1 a stării fundamentale a atomului de hidrogen este:

$$|\mathcal{E}_1| = \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = \frac{1}{2}mv_0^2 \quad (5.24)$$

Raportul dintre cele două energii este:

$$\frac{|\mathcal{E}_1|}{\mathcal{E}_m} = \frac{v_0^2}{c^2} = \alpha^2 \quad (5.25)$$

unde:

$$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (5.26)$$

poartă numele de constanta de structură fină.

Se observă din (5.25) că interacția spin-orbită este un efect pătratic în $\alpha = v_0/c$. Aceasta înseamnă că teoria acestui efect trebuie să fie una relativistă. Se poate demonstra că însăși spinul este un efect cuantic relativist care dispare în aproximația nerelativistă. Variația masei cu viteza contribuie de asemenea la despicarea fină a nivelelor Bohr.

Putem concluziona că structura fină a nivelelor energetice este datorată atât interacției spin-orbită cât și variației masei electronului cu viteza.

Metoda de calcul a structurii fine a nivelelor energetice este cea dată de teoria cuantică relativistă a lui Dirac, care ține cont automat de variația masei cu viteza și de interacția spin-orbită. Pentru un atom hidrogenoid soluția ecuației relativiste duce la următoarea formulă pentru energia unei stări staționare:

$$E = -\frac{m}{2n^2} \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)^2 \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (5.27)$$

Observăm că și în cadrul teoriei lui Dirac nivelele de energie sunt degenerate după l , adică energia depinde doar de numărul cuantic principal n și numărul cuantic corespunzător momentului cinetic total j .

În atomii ușori valorile despărțirii fine a nivelelor energetice sunt de ordinul a 10^{-5} eV, dar acestea cresc cu creșterea masei și a sarcinii nucleului. Pentru atomii grei această despărțire poate ajunge la zecimi de eV. Trebuie precizat că structura fină se descompune și ea la rândul ei într-o structură hiperfină datorită interacției electronilor cu câmpul magnetic al nucleului.

Cazul atomului cu mai mulți electroni

În acest caz fiecare electron al păturii poate fi caracterizat de momentul cinetic orbital \vec{l}_i și momentul cinetic de spin \vec{s}_i . Pentru studiul complet este necesar să se cunoască momentul cinetic total \vec{J} care reprezintă suma momentelor cinetice orbitale și de spin ale electronilor. Modul în care sunt compuse aceste momente cinetice nu influențează rezultatul final. Problema care se pune este aceea de a grupa momentele \vec{l}_i și \vec{s}_i . Modul în care se realizează aceste cuplări depinde de intensitățile relative a diferitelor interacții dintre electronii atomului. Au fost propuse două moduri de cuplare.

1) Cuplarea normală sau Russel - Saunders

Aceasta se utilizează când interacția electrostatică dintre electroni este mult mai mare decât interacția spin-orbită. Acest lucru se petrece în cazul atomilor cu nuclee ușoare. În cazul acestei legături se adună separat momentele cinetice orbitale și de spin și se obțin momentul cinetic rezultat orbital și momentul cinetic rezultat de spin:

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 + \dots \quad (5.28)$$

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \vec{s}_3 + \dots \quad (5.29)$$

Caracterizăm starea învelișului electronic al atomului prin momentele totale \vec{L} și \vec{S} . Momentul cinetic total este:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (5.30)$$

Acestor vectorii le corespund numerele cuantice J , L și S . Dacă atomul posedă un număr par de electroni numerele cuantice S și J sunt întregi, iar dacă atomul posedă un număr impar de electroni S și J sunt semiîntregi. Mărimile $S\hbar$, $L\hbar$ și $J\hbar$ reprezintă cele mai mari valori ale proiecțiilor acestor momente pe o axă. Deoarece numerele cuantice L și S se presupun cunoscute atunci numărul cuantic J poate lua următoarele valori:

$$J = |L + S|, |L + S - 1|, \dots, |L - S|, \quad (5.31)$$

Pentru calculul numerelor cuantice J, L, S este suficient să se studieze doar electronii de valență cu condiția ca păturile interne să fie pline, deoarece pe aceste pături momentele cinetice orbitale și de spin se compensează reciproc, momentul lor cinetic total fiind nul.

Deoarece electronii sunt supuși unui câmp cu simetrie centrală momentul cinetic total \vec{J} se conservă. Vectorii \vec{L} și \vec{S} nu se conservă separat deși mărimile acestora rămân constante. Proiecțiile lui \vec{L} și \vec{S} pe direcția lui \vec{J} se conservă deasemenea. Din acest motiv putem reprezenta variația temporală a lui \vec{L} și \vec{S} ca o precesie (rotație) a acestor vectorii în jurul lui \vec{J} .

În spectroscopie starea electronilor de valență este caracterizată de numărul cuantic L , cu observația că se substituie unei valori a lui L o majusculă din alfabetul latin:

Nr. cuantic L	0	1	2	3	4	5	6
Notăția stării	S	P	D	F	G	H	I

Atașăm acestor litere un indice la dreapta jos care reprezintă numărul cuantic J al momentului cinetic total și un al doilea indice plasat în stânga sus care reprezintă numărul $2S + 1$ și care poartă numele de multiplicitatea nivelului. Cunoșcând acest număr se poate determina S și numărul de subnivele ce apar datorită interacției spin-orbită. Se observă că $2S + 1$ reprezintă numărul de subnivele în care se despică un nivel dacă $S \leq L$. Dacă $S \geq L$ numărul subnivelelor este determinat de numărul proiecțiilor posibile a lui \vec{L} pe \vec{S} , adică $2L + 1$.

Ca exemplu vom considera un atom care pe pătura exterioară posedă 2 electroni. Există două cazuri: a) spinii electronilor sunt antiparaleli și $S = 0$. b) spinii sunt paraleli și $S = 1$.

În primul caz $J = S + L = L$, iar $2S + 1 = 1$. Aceasta înseamnă că toate nivelele sunt singleți. Acest caz este prezentat în tabelul de mai jos:

$J = L$	0	1	2	3	4	5	6
Nivel	1S_0	1P_1	1D_2	1L_3	1G_4	1H_5	1I_6

În al doilea caz $2S + 1 = 3$. Există trei posibilități $J = L - 1$, $J = L$, $J = L + 1$

L	0		1			2		
J	0	1	0	1	2	1	2	3
Nivel	3S_0	3S_1	3P_0	3P_1	3P_2	3D_1	3D_2	3D_3

2 Cuplajul $j - j$

O altă posibilitate este cuplarea $j - j$ care se manifestă când interacția spin orbită este mare în raport cu interacția electrostatică dintre electroni. În acest caz momentele cinetice orbital și de spin al fiecărui electron se adună $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$. Starea electronului este caracterizată prin numerele cuantice și momentele magnetice corespunzătoare. Se poate calcula momentul cinetic total:

$$\vec{J} = \sum \vec{j}_i \quad (5.32)$$

Un astfel de tip de legătură se întâlnește la atomii grei.

5.3 Absorbția și emisia luminii de către atomi

5.3.1 Reguli de selecție

Dacă atomul se află într-o stare excitată el poate trece într-o stare de energie mai mică prin emisia unui foton. Invers, dacă atomul absoarbe un foton el trece pe un nivel de energie mai înalt. Totuși nu toate tranzițiile sunt permise. Tranzițiile permise sunt date de regulile de selecție. În spectroscopie aceste reguli au fost enunțate pur empiric. Dezvoltarea mecanicii cuantice a permis ca aceste reguli să poată fi interpretate din punct de vedere fizic. Fiecare din aceste reguli exprimă de fapt o lege de conservare.

Regulile de selecție cele mai importante care se aplică emisie și absorbției luminii sunt consecințe ale conservării momentului cinetic. Vom considera în continuare doar procesul de emisie al unui singur foton. Legea conservării momentului cinetic în cazul emisie unui foton de către un atom se exprimă sub forma:

$$\vec{J} = \vec{J}' + \vec{s}_f \quad (5.33)$$

unde \vec{J} reprezintă momentul cinetic al atomului înainte de emisia fotonului, \vec{J}' momentul cinetic după emisia fotonului și \vec{s}_f momentul cinetic de spin al fotonului. Trebuie remarcat că vectorul \vec{J} nu poate avea

Figura 5.3: Modelul vectorial conservării momentului cinetic

toate componentele bine determinate, cu excepția cazului când $J = 0$. În acest caz valoarea proprie a pătratului momentului cinetic total este $\sqrt{J(J+1)}\hbar = 0$. Rezultă că tranzițiile dintr-o stare cu $J = 0$ într-o altă stare tot cu $J = 0$ sunt absolut interzise datorită faptului că fotonul are un moment cinetic de spin.

Nu vom discuta din punct de vedere riguros demonstrația regulilor de selecție ci vom da mai degrabă o justificare a acestora. Pentru aceasta vom considera metoda diagramelor vectoriale. Privim mărimile \vec{J} , \vec{J}' , și \vec{s} ca fiind trei vectori ale căror module sunt până la un factor \hbar egale cu $\sqrt{J(J+1)}$, $\sqrt{J'(J'+1)}$ și $\sqrt{s(s+1)}$. În Fig. 5.3 este prezentat modelul vectorial al conservării momentului cinetic.

Considerăm cazul $J' \geq J$. Din Fig. 5.3 rezultă că:

$$\sqrt{J'(J'+1)} \leq \sqrt{J(J+1)} + \sqrt{s(s+1)} \quad (5.34)$$

Deoarece pentru un foton $s = 1$ ultimul termen este egal cu $\sqrt{2}$. Numerele cuantice J și J' sunt numere întregi dacă atomul conține un număr par de electroni sau numere semîntregi dacă atomul conține un număr impar de electroni. Rezultă că diferența $\Delta J = J' - J$ poate fi nulă sau egală cu un număr întreg, deoarece prin emisia unui foton numărul de electroni din nucleu nu se modifică. Înlocuim în expresia 5.34 $J' = J + \Delta J$ și ridicăm la pătrat. Rezultă:

$$\Delta J^2 + (2J+1)\Delta J - 2 \leq 2\sqrt{2J(J+1)} \quad (5.35)$$

Dacă J are o valoare dată și $\Delta J \geq 0$ primul membru crește cu creșterea lui ΔJ . Pentru $\Delta J = 0$ inegalitatea se verifică. Pentru $\Delta J = 1$

inegalitatea se verifică deoarece $J \leq \sqrt{2J(J+1)}$. Pentru $\Delta J = 2$ inegalitatea devine $2(J+1) \leq \sqrt{2J(J+1)}$ și nu mai este valabilă, verificarea putându-se face prin ridicare la pătrat. Cazul în care $J' \leq J$ se discută la fel înlocuind J cu J' . În consecință dacă nici unul din numerele J și J' nu este nul rezultă următoarea regulă de selecție pentru emisia unui foton:

$$\Delta J = J' - J = \pm 1 \text{ sau } 0 \quad (5.36)$$

Dacă unul din numerele J sau J' este egal cu zero triunghiul degenerază în două segmente de dreaptă egale având sensuri contrare. Cazul $\Delta J = 0$ este exclus așa ca rămâne doar $\Delta J = J' - J = \pm 1$.

Se poate formula o regulă de selecție și pentru numerele m_J și $m_{J'}$ care caracterizează proiecția momentelor cinetice totale pe o axă. Rezultă:

$$\Delta m_J = m'_{J'} - m_J = \pm 1 \text{ sau } 0 \quad (5.37)$$

Aceste reguli trebuie verificate simultan cu regulile de selecție precedente.

Este convenabil să se stabilească și reguli de selecție care sunt legate de componentele vectorilor \vec{L} și \vec{S} . Emisia undelor electromagnetice este determinată de proprietățile electromagnetice ale electronului, de exemplu de schimbarea momentului magnetic. Emisia unui foton este urmată fie de schimbarea mișcării orbitale (variația vectorului \vec{L}) fie de o modificare a momentului cinetic de spin \vec{S} , fie de ambele procese. Trebuie remarcat că emisia unui foton urmată de modificarea lui \vec{S} este un efect relativist. Teoria arată că în cazul emisieii luminii în vizibil interacția fotonului cu sarcina electronului este mai mare cu mai multe ordine de mărime decât interacția fotonului cu momentul magnetic. Tragem concluzia că emisia unui foton în gama radiațiilor vizibile nu determină o variație a lui \vec{S} și prin urmare:

$$\Delta \vec{S} = 0 \quad (5.38)$$

Aceasta arată că emisia și absorbția unui foton a cărui lungime de undă nu este foarte scurtă se produce ca și cum electronul nu ar avea spin. Din acest motiv se pot folosi toate rezultatele obținute pentru momentul cinetic total pe care le adaptăm pentru momentul cinetic orbital. Atunci:

$$\Delta L = L' - L = \pm 1 \text{ sau } 0 \quad (5.39)$$

Dacă L sau L' se anulează, valoarea 0 din (5.39) trebuie exclusă. Valoarea $\Delta L = 0$ trebuie exclusă pentru atomii care posedă un singur electron de valență, de exemplu pentru atomii hidrogenoizi. Această interdicție nu este legată de conservarea momentului cinetic ci de conservarea parității funcției de undă.

Atunci când $\Delta J = \pm 1$ fotonul emis este polarizat circular dreapta sau stânga iar când $\Delta J = 0$ polarizarea este rectilinie. Rezultatul pare a fi surprinzător cunoscând că spinul fotonului este egal cu unitatea. În mecanica cuantică se găsește o soluție care surmontează această dificultate. Se afirmă că în aceste condiții fotonul posedă un spin intermediar care rezultă din faptul că starea fotonului este o suprapunere de stări de polarizare circular dreapta și stânga având probabilități egale de realizare. Dacă se măsoară momentul cinetic care se transmite fotonului valorile ± 1 se obțin cu aceeași probabilitate.

5.3.2 Structura fină a liniilor emise de hidrogen și metale alcaline

Trebuie făcută distincția dintre structura fină a liniilor spectrale și structura fină a nivelelor energetice. Structura fină a liniilor spectrale este determinată de tranzițiile permise între diverse subnivele. Pentru atomii unielectronici în absența unor câmpuri exterioare:

$$\Delta l = \pm 1 \quad (5.40)$$

și:

$$\Delta j = \pm 1 \text{ sau } 0 \quad (5.41)$$

În continuare vom considera câteva exemple concrete. Vom examina structura fină a liniei L_α a seriei Lyman care corespunde tranziției $2p - 1s$ (Fig. 5.4 a).

Termenul $1s_{1/2}$ este un singlet în timp ce termenul $2p$ este un dublet ($2p_{1/2}$ și $2p_{3/2}$). Conform regulilor de selecție tranzițiile de pe nivelele $2p_{1/2}$ și $2p_{3/2}$ pe nivelul $1s_{1/2}$ sunt permise. Astfel, linia L_α este un dublet format din două linii foarte apropiate. Din cele două linii spectrale linia $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ este mult mai intensă. Distanța ce separă cele două linii este $\Delta\tilde{\nu} = 0,365 \text{ cm}^{-1}$ sau $\Delta\lambda = 5,3 \times 10^{-4} \text{ nm}$. Lungimea de undă a liniei spectrale L_α este $\lambda = 121 \text{ nm}$. Pentru a putea separa cele două linii puterea de rezoluție a aparatului trebuie să fie egală cu $\lambda/\Delta\lambda = 2 \times 10^5$.

Figura 5.4: a) Structura fină a liniei L_α a seriei Lyman care corespunde tranziției $2p - 1s$ b) Structura fină a liniei H_α a seriei Balmer care corespunde unei tranziții de pe nivelul $n = 3$ pe nivelul $n = 2$.

Un alt exemplu se referă la structura fină a liniei H_α a seriei Balmer care corespunde unei tranziții de pe nivelul $n = 3$ pe nivelul $n = 2$ (Fig.5.4 b). Numărului cuantic $n = 2$ îi corespund stările $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ și $2p_{3/2}$. Deoarece energia nu depinde de numărul cuantic orbital primele două stări au aceeași energie și vor fi reprezentate de un nivel comun. Astfel pentru $n = 2$ avem două subnivele din care unul este format la rândul său din două subnivele care se confundă. Pentru $n = 3$ există un subnivel simplu $3d_{1/2}$ și două subnivele duble $(3p_{3/2}, 3d_{3/2})$, $(3s_{1/2}, 3p_{1/2})$. În Fig 5.4 b sunt reprezentate liniile spectrale care corespund tranzițiilor permise de regulile de selecție.

Structura fină a liniilor spectrale a metalelor alcaline și ale ionilor care sunt asemănători acestora este determinată în principal de interacția spin-orbită și mai puțin de variația masei electronului cu viteza. Aceasta se datorește faptului că interacțiile spin-orbită se intensifică pe măsură ce crește Z . Fig. 5.5 ilustrează cauzele apariției structurii fine în seriile spectrale ale atomului de sodiu. În acest caz există mai multe serii spectrale.

a) Seria principală este datorată tranzițiilor de pe diferitele nivele p pe nivelul $3s_{1/2}$. Acest ultim nivel este un singlet în timp nivelele p sunt dubleți a căror distanță de separare scade pe măsură ce crește numărul

Figura 5.5: Serii spectrale ale atomului de sodiu

cuantic principal. Din acest motiv toate liniile spectrale ale seriei principale sunt dubleți. Această serie apare și în spectrul de absorbție. Liniile mai intense sunt $3p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}$ și $3p_{3/2} \rightarrow 3s_{1/2}$ care corespund lungimilor de undă $\lambda_1 = 589,6 \text{ nm}$ și $\lambda_2 = 589,0 \text{ nm}$ (lumină galbenă). Când Z crește distanța dintre liniile spectrale ale metalelor alcaline devine din ce în ce mai mare.

b) Seria netă rezultă din tranzițiile de pe nivelele s simple pe nivelul dublu $3p$ situat mai jos și care este format din subnivelele $3p_{1/2}$ și $3p_{3/2}$. Deoarece distanțele între componentele dubleților sunt aceleași pentru toată seria aceasta poartă numele de serie netă.

c) Seria difuză apare prin tranzițiile de pe nivelele superioare ($3d_{3/2}$, $3d_{1/2}$) și ($4d_{5/2}$, $4d_{3/2}$) pe nivelul dublet ($3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$). Liniile spectrale sunt tripleți deoarece tranzițiile de forma $3d_{5/2} \rightarrow 3p_{1/2}$ sunt interzise, j variind cu două unități. Distanțele dintre subnivelele d sunt foarte mici în raport cu subnivelele p . În consecință, dacă aparatul spectral are o putere mai mică de rezoluție nu poate decela existența tripleților. Din acest motiv seria a fost numită serie difuză.

5.4 Atomul în câmp magnetic

5.4.1 Momentul magnetic orbital. Teorema Larmor

În aproximația clasică un electron care se rotește pe o orbită circulară este echivalent cu un curent:

$$I = \frac{e}{T} \quad (5.42)$$

unde T este perioada mișcării circulare. Acest curent determină apariția unui moment magnetic:

$$\mu = IS = I\pi r^2 \quad (5.43)$$

unde S este suprafața orbitei iar r este raza orbitei. Se înlocuiește (5.42) în (5.43) și ținând cont că $T = 2\pi/\omega$ rezultă:

$$\mu = \frac{e}{2}\omega r^2 = \frac{e}{2m_e}m_e\omega r^2 = \frac{e}{2m_e}L \quad (5.44)$$

unde $L = m_e\omega r^2$ este momentul cinetic al electronului. Astfel, unui atom hidrogenoid i se poate atașa momentul magnetic μ dat de relația (5.44) datorat mișcării orbitale a electronului.

Dacă atomul respectiv este în câmp magnetic el trebuie să se comporte ca un magnet, adică momentul magnetic trebuie să se orienteze paralel sau antiparalel cu câmpul magnetic. Acestei tendințe i se opune faptul că atomul se comportă ca un giroscop. Astfel, atomul execută o mișcare de precesie în jurul direcției inducției câmpului magnetic \vec{B} . Acest fapt face ca orbita electronului într-un sistem de referință fix să devină extrem de complicată. Din acest motiv se alege un nou sistem de referință legat de orbită. Acest nou sistem de referință execută împreună cu orbita o mișcare de precesie în jurul direcției câmpului magnetic. Notăm cu v viteza electronului în sistemul de referință fix și cu v' viteza electronului în sistemul mobil. În sistemul mobil acționează următoarele forțe de inerție suplimentare:

a) Forța centrifugă

$$\vec{F}_{cf} = m_e\rho\omega_l^2 \quad (5.45)$$

unde ρ este distanța electronului față de axa de precesie iar ω_l este viteza unghiulară de precesie.

b) Forța Coriolis

$$\vec{F}_c = 2m_e(\vec{v}' \times \vec{\omega}_l) \quad (5.46)$$

Figura 5.6: Mișcarea de precesie a orbitei și momentului cinetic în jurul direcției câmpului magnetic

Dacă viteza liniară a precesiei $\rho\omega_l$ este mult mai mică decât viteza electronului în lipsa precesiei v , atunci putem neglija forța centrifugă față de forța Coriolis. În plus putem înlocui în expresia forței Coriolis viteza v' cu viteza v a electronului din sistemul fix. Atunci:

$$\vec{F}_c = 2m_e (\vec{v} \times \vec{\omega}_l) \quad (5.47)$$

Asupra electronului acționează și o forță Lorentz care în sistemul mobil este:

$$\vec{F}_l = -e (\vec{v}' \times \vec{B}) \simeq -e (\vec{v} \times \vec{B}) \quad (5.48)$$

Pentru ca orbita să nu se modifice este necesar ca cele două forțe să fie egale și de sens contrar: $|\vec{F}_c| = |\vec{F}_l|$. Rezultă:

$$2m_e v \omega_l \sin(\vec{v}, \vec{\omega}_l) = evB \sin(\vec{v}, \vec{B}) \quad (5.49)$$

Deoarece $\vec{\omega}_l \parallel \vec{B}$ cele două sinusuri din relația de mai sus sunt egale astfel că:

$$\omega_l = \frac{e}{2m_e} B \quad (5.50)$$

Rezultă că într-un câmp magnetic puțin intens electronul descrie aceeași orbită ca și în cazul absenței câmpului magnetic, însă această orbită este raportată la un nou sistem de coordonate care execută o mișcare de precesie în jurul direcției \vec{B} cu viteza unghiulară ω_l , numită viteză unghiulară Larmor (Fig. 5.6).

Putem astfel enunța teorema Larmor: Acțiunea unui câmp magnetic slab asupra orbitei unui electron determină o mișcare de precesie a acesteia în jurul direcției câmpului magnetic \vec{B} cu viteza unghiulară ω_l .

5.4.2 Efectul Zeeman

Efectul constă în despicarea unei linii spectrale în mai multe componente când sursa luminoasă este așezată într-un câmp magnetic.

Teoria clasică a efectului Zeeman

Explicarea clasică a efectului Zeeman a fost dată de Lorentz care a demonstrat că în cazul observării perpendiculare pe direcția câmpului magnetic, linia spectrală se descompune în trei componente distanțate între ele cu:

$$\Delta\nu = \frac{1}{2\pi} \frac{eB}{2m_e} = \frac{\omega_l}{2\pi} \quad (5.51)$$

Aceste previziuni au fost confirmate în multe cazuri cu o bună precizie. Există însă și situații în care descompunerea liniei spectrale este mult mai complicată.

În cazul că liniile spectrale se descompun în trei componente spunem că avem de-a face cu un efect Zeeman normal. În celălalt caz efectul Zeeman poartă numele de efect Zeeman anomal sau complex.

Fie un atom de hidrogen în câmp magnetic. După aplicarea câmpului magnetic asupra electronului va acționa alături de forța coulombiană și forța Lorentz. Influența câmpului magnetic în acest caz nu se manifestă prin mărirea sau micșorarea razei orbitei ci prin varierea vitezei unghiulare a electronului. Acest fapt poate fi explicat prin faptul că atunci când câmpul magnetic crește (creștere ce are loc într-un timp finit) apare un câmp electric indus cu liniile de câmp închise care acționează asupra electronului în sensul creșterii sau descreșterii vitezei unghiulare a electronului (forța Lorentz nu este responsabilă deoarece ea fiind perpendiculară pe viteză lucrul mecanic efectuat de ea este nul).

În absența câmpului magnetic forța centrifugă ce acționează asupra electronului aflat în mișcare de rotație în jurul nucleului este echilibrată de forța electrostatică:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e r \omega_0^2 \quad (5.52)$$

Atunci când este aplicat câmpul magnetic alături de forța electrostatică intervine și forța Lorentz:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \pm eBv = m_e r \omega^2 \quad (5.53)$$

Semnul + corespunde electronului care se rotește în sens trigonometric iar semnul – corespunde electronului care se rotește în sensul acelor de ceasornic. Ținând cont că $v = \omega r$ și de relația (5.52), atunci (5.53) devine:

$$m_e r \omega_0^2 \pm e B \omega r = m_e r \omega^2 \quad (5.54)$$

Se împarte cu $m_e \omega_0^2$ și ținând cont că $(eB) / (2m_e) = \omega_l$ relația (5.54) devine:

$$\omega^2 \mp 2\omega_l \omega - \omega_0^2 = 0 \quad (5.55)$$

Pentru electronul care se rotește în sensul trigonometric rezultă:

$$\omega = \omega_l + \sqrt{\omega_l^2 + \omega_0^2} \quad (5.56)$$

Deoarece $\omega_0 \gg \omega_l$ atunci:

$$\omega = \omega_l + \omega_0 \quad (5.57)$$

Pentru electronul care se rotește în sensul acelor de ceasornic:

$$\omega = -\omega_l + \sqrt{\omega_l^2 + \omega_0^2} \simeq \omega_0 - \omega_l \quad (5.58)$$

Deoarece $|\Delta\omega| = \omega_l$, astfel că:

$$\Delta\nu = \frac{1}{2\pi} |\Delta\omega| = \frac{1}{2\pi} \frac{eB}{2m_e} \quad (5.59)$$

Teoria cuantică a efectului Zeeman

Efectul normal În discuția pe care o vom face nu vom lua în considerare spinul electronului. Ecuației Schrödinger trebuie să i se atașeze termenii datorati interacției electronului cu câmpul magnetic.

În cazul clasic influența câmpului magnetic este luată în considerație prin înlocuirea în hamiltonianul sistemului a impulsului \vec{p} cu mărimea $\vec{p} - e\vec{A}$ unde \vec{A} este potențialul vector asociat câmpului magnetic. Atunci hamiltonianul sistemului devine:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{p} - e\vec{A} \right)^2 + U \quad (5.60)$$

Trecerea la operatorul hamiltonian se face înlocuind mărimile clasice cu operatorii corespunzători:

$$\vec{p} - e\vec{A} \rightarrow \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\vec{A} \right) \quad (5.61)$$

Având în vedere că \vec{A} nu este unic determinat considerăm că $\nabla \vec{A} = 0$ (condiția de etalonare Lorentz). Atunci:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\vec{A} \right)^2 + U \quad (5.62)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{ie\hbar}{m_e} \vec{A} \nabla + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2m_e} + U \quad (5.63)$$

unde în cazul unui atom hidrogenoid:

$$U = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (5.64)$$

Deoarece acțiunea câmpului magnetic este slabă în raport cu acțiunea câmpului electric vom neglija termenul care conține pe \vec{A}^2 . Câmpul magnetic fiind unul constant putem alege:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \quad (5.65)$$

Atunci:

$$\vec{A} \nabla = \frac{1}{2} (\vec{B} \times \vec{r}) \nabla = \frac{1}{2} \vec{B} (\vec{r} \times \nabla) = -\frac{1}{2i\hbar} \vec{B} \vec{L} \quad (5.66)$$

unde am ținut cont că operatorul moment cinetic cinetic este $\vec{L} = -i\hbar (\vec{r} \times \nabla)$. Atunci (5.63) devine:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U + \frac{e}{2m_e} \vec{B} \vec{L} \quad (5.67)$$

Alegând axa Oz după direcția lui \vec{B} atunci:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U + \frac{e}{2m_e} B L_z \quad (5.68)$$

Se observă că hamiltonianul se poate scrie ca:

$$H = H_0 + H' \quad (5.69)$$

unde:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + U \quad (5.70)$$

iar

$$H' = \frac{e}{2m_e}BL_z = \frac{\mu_B}{\hbar}BL_z \quad (5.71)$$

Problema cu funcții și valori proprii

$$H\Psi = E\Psi \quad (5.72)$$

se rezolvă cu ajutorul teoriei perturbațiilor, considerând că H' este hamiltonianul de perturbație. Soluția ecuației cu hamiltonianul neperturbat:

$$H_0\Psi_0 = E^{(0)}\Psi_0 \quad (5.73)$$

se consideră cunoscută și are forma:

$$\Psi_0 = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (5.74)$$

Aplicând teoria perturbațiilor, corecția de ordinul întâi la energie este:

$$E^{(1)} = \left(\Psi_0, \frac{\mu_B B}{\hbar} L_z \Psi_0 \right) \quad (5.75)$$

Deoarece $L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi)$ atunci:

$$E^{(1)} = m(\Psi_0, \mu_B B \Psi_0) = m\mu_B B \quad (5.76)$$

Dar m nu poate lua decât valorile întregi dintre $-l$ și l . Rezultă că un nivel energetic se despică în $2l + 1$ subnivele. Spunem că este ridicată degenerarea după m . Frecvența noilor linii spectrale devine:

$$\omega = \frac{E_k - E_i}{\hbar} = \frac{E_k^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar} + \Delta m \frac{\mu_B B}{\hbar} \quad (5.77)$$

$$\omega = \omega_0 + \Delta m \frac{\mu_B B}{\hbar} = \omega_0 + (\Delta m)\omega_l \quad (5.78)$$

Conform regulilor de selecție $\Delta m = \pm 1$. Astfel, în câmp magnetic fiecare linie spectrală se despică în trei linii cu frecvențele:

$$\nu_0 + \frac{1}{2\pi}\omega_l, \nu_0, \nu_0 - \frac{1}{2\pi}\omega_l \quad (5.79)$$

Această descompunere simplă se obține doar în anumite cazuri particulare pentru câmpuri magnetice slabe și pentru liniile singlet.

Efectul complex (anomal) Descompunerea unei linii spectrale într-un triplet așa cum prezice teoria efectului Zeeman normal nu se petrece decât în cazul liniilor spectrale care nu posedă o structură fină. Pentru celelalte linii se obține o descompunere complexă. Efectul poate fi explicat luând în considerare faptul că electronul are spin. Fenomenele sunt diferite în câmpuri magnetice puternice sau slabe. Spunem că un câmp magnetic este slab dacă separarea produsă de câmpul magnetic este mică în raport cu separarea datorată structurii fine a liniilor spectrale. În cazul unui câmp slab interacția dintre \vec{L} și \vec{S} este mult mai puternică decât interacția cu câmpul magnetic. Vom considera cazul cuplajului normal.

În acest caz atomul este caracterizat de momentul cinetic orbital \vec{L} de momentul de spin \vec{S} și momentul cinetic total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Dacă se lucrează cu operatorii corespunzători prin ridicare la pătrat și ținând cont că operatorii \vec{L} și \vec{S} comută rezultă:

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{S}\vec{L} \quad (5.80)$$

de unde:

$$\vec{S}\vec{L} = \frac{J^2 - L^2 - S^2}{2} \quad (5.81)$$

Valorile proprii ale acestui operator sunt:

$$\frac{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)}{2} \hbar^2 \quad (5.82)$$

Momentelor cinetice \vec{L} și \vec{S} le corespund momentul magnetic orbital $\vec{\mu}_L = -g_L \frac{e}{2m_e} \vec{L}$ și momentul magnetic de spin $\vec{\mu}_S = -g_S \frac{e}{2m_e} \vec{S}$. (Semnul minus este utilizat deoarece sarcina electronului este negativă și prin urmare $\vec{\mu}_L$ și \vec{L} ca și $\vec{\mu}_S$ și \vec{S} sunt orientate în sensuri contrare). $g_L = 1$ iar $g_S = 2$.

În absența unui câmp exterior momentul cinetic total \vec{J} se conservă în direcție și modul. Momentele \vec{L} și \vec{S} nu se conservă datorită interacției spin-orbită dar în starea considerată modulele lor se conservă ele executând o mișcare de precesie în jurul vectorului \vec{J} cu aceeași viteză unghiulară deoarece cei trei vectori \vec{J} , \vec{L} , \vec{S} trebuie să fie în același plan. Momentele magnetice $\vec{\mu}_L$ și $\vec{\mu}_S$ ca și momentul magnetic total $\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S$ execută o mișcare de precesie cu aceeași viteză unghiulară. Deoarece

$g_L \neq g_S$ vectorul $\vec{\mu}$ nu este colinear cu vectorul \vec{J} . Determinăm proiecția $\vec{\mu}$ pe direcția lui \vec{J} . Pentru aceasta se face produsul scalar:

$$\vec{\mu}\vec{J} = -\left(g_L\vec{L} + g_S\vec{S}\right)\left(\vec{L} + \vec{S}\right)\frac{e}{2m_e} \quad (5.83)$$

$$\vec{\mu}\vec{J} = \left[-g_L L^2 - g_S S^2 - (g_L + g_S)\vec{L}\vec{S}\right]\frac{e}{2m_e} \quad (5.84)$$

Dacă ținem seama că:

$$\vec{\mu} = -g\frac{e}{2m_e}\vec{J} \quad (5.85)$$

din (5.84) rezultă:

$$g\vec{J}^2 = g_L\vec{L}^2 + g_S\vec{S}^2 + \frac{(g_L + g_S)(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)}{2}$$

$$g\vec{J}^2 = \frac{(g_L + g_S)}{2}\vec{J}^2 + \frac{(g_L - g_S)(\vec{L}^2 - \vec{S}^2)}{2} \quad (5.86)$$

Privim egalitatea ca fiind între operatori; din ea rezultă egalitatea când se lucrează cu valorile proprii.

$$gJ(J+1) = \frac{(g_L + g_S)}{2}J(J+1) + \frac{(g_L - g_S)[L(L+1) - S(S+1)]}{2}$$

$$g = \frac{(g_L + g_S)}{2} + \frac{(g_L - g_S)[L(L+1) - S(S+1)]}{2J(J+1)} \quad (5.87)$$

Pentru electroni $g_L = 1$ și $g_S = 2$. Atunci:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (5.88)$$

Factorul g este o funcție rațională și poartă numele de factorul lui Landé.

Deasemenea, din (5.85) putem scrie $\mu_{\parallel}|\vec{J}\rangle = -g\frac{e}{2m_e}|\vec{J}^2\rangle$. Proiecția momentului magnetic pe direcția vectorului \vec{J} are o valoare bine determinată $\mu_{\parallel} = -g\frac{e}{2m_e}|\vec{J}\rangle$. Proiecția μ_{\perp} nu are o valoare bine determinată, iar din cauza precesiei se anulează în timpul unei perioade de precesie.

Momentul magnetic al atomului se reduce la proiecția sa μ_{\parallel} astfel că în această aproximație:

$$\mu = \mu_{\parallel} = -g \frac{e}{2m_e} \left| \vec{J} \right| \quad (5.89)$$

Presupunem că atomul se află într-un câmp magnetic omogen. Momentul cinetic total nu se conservă și execută o mișcare de precesie forțată sub acțiunea câmpului magnetic. Considerăm cazul câmpurilor slabe în care caz precesia determinată de câmpul magnetic este lentă în raport cu cea determinată de interacția spin orbită. Aceasta înseamnă că inducția câmpului magnetic este suficient de mică astfel ca desplicarea liniilor spectrale să fie mică în raport cu desplicarea datorată structurii fine. În aceste condiții se observă efectul Zeeman anomal. Această condiție nu este importantă pentru liniile singleți deoarece pentru acestea nu are importanță dacă câmpul este mare sau mic și efectul Zeeman se manifestă ca un efect normal.

În câmp magnetic slab energia suplimentară a atomului se calculează considerând că momentul magnetic total este dat de expresia:

$$\vec{\mu} = -g\mu_B \vec{J} \quad (5.90)$$

astfel că energia atomului într-un câmp magnetic care este orientat după axa Oz este:

$$E = E_0 + m_j g \omega_l \hbar \quad (5.91)$$

Pulsația liniilor spectrale este în acest caz:

$$\omega = \omega_0 + \Delta(m_j g) \frac{\mu_B B}{\hbar} = \omega_0 + \omega_l \Delta(m_j g) \quad (5.92)$$

unde m_j este numărul cuantic care ia valori între $-j$ și j .

Aceasta arată că nivelele se scindează în subnivele sub acțiunea câmpului magnetic și astfel apar tranziții între subnivelele corespunzătoare. Sunt valabile regulile de selecție:

$$\Delta m_j = 0 \text{ și } \pm 1 \quad (5.93)$$

Pentru punerea în evidență a efectului Zeeman anomal vom considera o linie spectrală ce corespunde unei tranziții de pe un nivel dublet ($^2p_{1/2}, ^2p_{3/2}$) pe un nivel singlet $^2s_{1/2}$. În cazul că $n = 3$ se obține linia galbenă a sodiului (nu este neapărat nevoie să se fixeze n deoarece efectul

nu depinde de acest număr). Astfel, pentru nivelul $p_{3/2}$, $l = 1$, $j = 3/2$, $s = 1/2$ iar $g = 4/3$. Pentru nivelul $p_{1/2}$ se obține $g = 2/3$ iar pentru nivelul $s_{1/2}$ se obține $g = 2$. Despicărilor nivelelor energetice sunt arătate în tabelul de mai jos.

Despicarea nivelelor energetice

$p_{3/2}$	m_j	-3/2	-1/2	1/2	3/2
	gm_j	-2	-2/3	2/3	2
$p_{1/2}$	m_j	-1/2	1/2		
	gm_j	-1/3	1/3		
$s_{1/2}$	m_j	-1/2	1/2		
	gm_j	-1	1		

În tabelele de mai jos sunt prezentate liniile spectrale care se obțin:

Tranziții $p_{1/2} - s_{1/2}$

$m_j^{(1)} \rightarrow m_j^{(2)}$	$(gm_j)^{(1)} \rightarrow (gm_j)^{(2)}$
$-1/2 \rightarrow 1/2$	$-1/2 - 1 = -4/3$
$-1/2 \rightarrow -1/2$	$-1/3 - (-1) = 2/3$
$1/2 \rightarrow 1/2$	$1/3 - 1 = -2/3$
$1/2 \rightarrow -1/2$	$1/3 - (-1) = 4/3$

Se observă că linia ${}^2p_{1/2} \rightarrow {}^2s_{1/2}$ se despică în patru linii.

Tranziții $p_{3/2} - s_{1/2}$

$m_j^{(1)} \rightarrow m_j^{(2)}$	$(gm_j)^{(1)} \rightarrow (gm_j)^{(2)}$
$-3/2 \rightarrow 1/2$	interzisă
$-3/2 \rightarrow -1/2$	$-2 - (-1) = -1$
$-1/2 \rightarrow 1/2$	$-2/3 - 1 = -5/3$
$-1/2 \rightarrow -1/2$	$-2/3 + 1 = 1/3$
$1/2 \rightarrow 1/2$	$2/3 - 1 = -1/3$
$1/2 \rightarrow -1/2$	$2/3 + 1 = 5/3$
$3/2 \rightarrow 1/2$	$2 - 1 = 1$
$3/2 \rightarrow -1/2$	interzisă.

Se observă că linia $p_{3/2} \rightarrow s_{1/2}$ se despică în 6 linii.

Efectul Paschen Back Dacă intensitatea câmpului magnetic este mare, acțiunea care se exercită asupra atomului devine egală sau superioară interacției spin-orbită și atunci se poate neglija interacția spin orbită și se studiază în mod independent precesia vectorilor \vec{L} și \vec{S} în jurul direcției câmpului magnetic. Momentul magnetic total este:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{e\hbar}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S}) \quad (5.94)$$

iar energia devine:

$$E = E_0 + \frac{e\hbar}{2m_e} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} = E_0 + \omega_l \hbar (m_L + 2m_S) \quad (5.95)$$

Dacă se consideră regulile de selecție $\Delta m_L = \pm 1$ sau 0 , iar $\Delta m_S = 0$ atunci:

$$\Delta\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} \pm \omega_l \text{ sau } \Delta\omega = 0 \quad (5.96)$$

Rezultatul este analog cu cel obținut în cazul efectului Zeeman normal când o linie spectrală se despică în trei linii.

5.4.3 Rezonanța magnetică

În prezența unui câmp magnetic fiecare nivel energetic al atomului se despică în $2J + 1$ subnivele. Subnivelele se deosebesc unele de altele prin valoarea numărului cuantic m_j ce caracterizează proiecția vectorului \vec{J} pe axa Oz.

Despicarea liniilor spectrale care se observă în efectul Zeeman rezultă datorită tranzițiilor între subnivelele ce provin din nivele energetice diferite. Tranzițiile spontane între subnivelele ce provin din același nivel energetic sunt puțin probabile deoarece probabilitățile de tranziție depind de puterea a treia a distanțelor ce le separă. Dacă există un singur electron de valență tranzițiile sunt interzise de regula de selecție $\Delta L \neq 0$.

Tranzițiile stimulate, adică tranzițiile care se produc sub acțiunea unor câmpuri externe se pot produce și dacă regulile de selecție nu sunt satisfăcute. Dacă atomul este plasat într-un câmp de forțe adecvat, probabilitățile de tranziție pot crește în mod considerabil. Acesta este și cazul tranzițiilor între subnivelele formate prin despicarea unui nivel energetic într-un câmp magnetic \vec{B} . Aceste tranziții se efectuează cu probabilități mari dacă se suprapune un câmp magnetic variabil de intensitate mică pe direcția transversală față de câmpul inițial. Ansamblul

fenomenelor și metodelor utilizate pentru obținerea tranzițiilor stimulate poartă numele de fenomene de rezonanță magnetică.

Să considerăm o particulă cu momentul cinetic \vec{J} și momentul magnetic $\vec{\mu}$, plasată într-un câmp magnetic \vec{B} omogen și uniform. Cele două momente sunt legate prin relația:

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{J} \quad (5.97)$$

unde γ poartă numele de raport giromagnetic:

$$\gamma = g \frac{\mu_0}{\hbar} \quad (5.98)$$

În relația (5.98) μ_0 este fie magnetonul Bohr $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ dacă particula este un electron, fie magnetonul nuclear $\mu_p = \frac{e\hbar}{2m_p}$ dacă particula este un proton. O astfel de particulă aflată în câmp magnetic este supusă momentului unui cuplu de forțe $\vec{\mu}_0 \times \vec{B}$, astfel că variația momentului cinetic în unitatea de timp este:

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\mu}_0 \times \vec{B} = \gamma (\vec{J} \times \vec{B}) \quad (5.99)$$

Aceasta este ecuația unui giroscop. Rezultă că \vec{J} și împreună cu el momentul magnetic $\vec{\mu}$ execută în jurul direcției lui \vec{B} o mișcare de precesie cu viteza unghiulară:

$$\vec{\Omega} = -\gamma \vec{B} = -g \frac{e}{2m} \vec{B} \quad (5.100)$$

unde m este fie masa unui electron fie masa unui proton. Presupunem că peste câmpul uniform \vec{B} se suprapune un câmp magnetic slab \vec{B}' perpendicular pe axa \vec{B} și care se rotește în jurul acestuia. Asupra particulei se va exercita un moment suplimentar $\vec{\mu} \times \vec{B}'$ care face ca unghiul dintre \vec{J} și \vec{B} să varieze. Dacă viteza unghiulară de precesie Ω și viteza de rotație Ω' a câmpului slab diferă mult, cele două rotații sunt defazate astfel că se produc variații periodice mici în direcția vectorului \vec{J} . Aceste variații produc doar mici variații periodice ale unghiului dintre vectorii \vec{J} și \vec{B} , astfel că valoarea medie a acestuia în timp rămâne neschimbată.

Situația este diferită dacă $\Omega' = \Omega$. În acest caz se manifestă fenomenul de rezonanță magnetică. Acest fenomen constă în aceea că momentul

forței suplimentare se exercită tot timpul în aceeași direcție și în același sens, orientează vectorul \vec{J} fie paralel, fie antiparalel cu \vec{B} . Mărimea vectorului \vec{J} rămâne constantă, dar proiecția J_z pe direcția lui \vec{B} variază.

Din punctul de vedere al mecanicii cuantice, proiecția \vec{J}_z este cuantificată, valoarea ei variind în salturi în timp ce din punct de vedere clasic valoarea ei variază continuu. Se ajunge la concluzia că relația $\Delta m_j = \pm 1$ trebuie să fie satisfăcută atunci când au loc tranziții între subnivelele ce apar prin desplicarea unui nivel prin efect Zeeman. Acest fapt arată că numai tranzițiile între subnivelele vecine sunt permise. Distanța între subnivele este $\Delta E = gB\Delta m_j\hbar$, astfel că pulsația radiației emise este $\omega = \Delta E/\hbar = gB\Delta m_j$. Aceasta coincide cu Ω dacă $\Delta m_j = \pm 1$. Regula de selecție este o consecință a legii de conservare a momentului cinetic deoarece putem asimila tranziția între subnivele cu o interacție a sistemului atomic cu un foton de pulsație Ω .

Este comod ca în rezonanța magnetică să se utilizeze în locul câmpului \vec{B}' rotitor un câmp ce variază sinusoidal pe o direcție transversală cu câmpul \vec{B} . În principiu nu se schimbă nimic deoarece putem reprezenta pe \vec{B} ca o suprapunere de două câmpuri de aceeași intensitate \vec{B}' care se rotește cu aceeași viteză unghiulară în sensuri opuse. Câmpul care se rotește în sens invers precesiei particulei exercită asupra acesteia o acțiune oscilantă rapidă care nu joacă nici un rol în fenomenul considerat. Singurul câmp important este cel care se rotește în sensul precesiei vectorului \vec{J} . Pulsația la care apare rezonanța este dată de relația (5.100).

Dacă momentele magnetice sunt determinate de electronii păturilor electronice ale atomului, rezonanța poartă numele de rezonanță paramagnetică electronică și dacă aceasta este determinată de nucleonii din nucleul atomului, rezonanța poartă numele de rezonanță nucleară.

Rezonanța magnetică este utilizată pentru determinarea momentelor magnetice ale atomilor și nucleului atomic, pentru studiul moleculelor și cristalelor.

Istoric, primele observații ale fenomenului de rezonanță magnetică nucleară au fost făcute în anul 1938 prin metoda elaborată de Rabi. Schema instalației experimentale este arătată în Fig. 5.7

Un fascicol de atomi sau molecule traversează fanta O și ajunge într-un câmp magnetic neomogen creat de magnetul A. După magnetul A se află magnetul C care crează un câmp magnetic omogen permanent și unde se află o nouă fantă S. Apoi urmează un nou magnet B identic cu primul care crează tot un câmp magnetic neomogen în așa fel încât gradi-

Figura 5.7: Dispozitiv experimental pentru punerea în evidență a fenomenului de rezonanță magnetică

entul câmpului magnetic creat de acesta este în sens invers celui creat de magnetul A. Dacă magnetii A și B ar lipsi fascicolul de atomi ar fi dirijat de-a lungul axei aparatului și vor cădea pe detectorul B. Dar în câmpuri neomogene particulele care au un moment magnetic vor fi supuse unei forțe transversale $F = \mu (dB/dz)$ orientată paralel sau antiparalel cu gradientul câmpului magnetic în funcție de semnul proiecției μ_z pe axa câmpului magnetic. Această forță curbează traiectoria particulelor. Sursa de atomi sau molecule furnizează particule având viteze și direcții diferite. Numai particulele care traversează fanta S prezintă interes. Deoarece forța F care acționează asupra particulelor nu se schimbă (proiecția μ_z nu se modifică) într-o primă aproximație traiectoriile particulelor pot fi considerate ca fiind circulare cu raza R dată de ecuația $v^2/R = f$ unde f este forța care se exercită normal pe unitatea de masă. În câmpul produs de magnetul B proiecția μ_z fiind aceeași, traiectoriile particulelor sunt tot cercuri dar curbate în sens invers. Prin alegerea convenabilă a configurației aparatului, deviația particulelor determinată de magnetul A va fi compensată de magnetul B și particulele ajung la detectorul D. Două astfel de traiectorii sunt arătate în Fig. (5.7). Presupunem că toate aceste câmpuri sunt permanente. Suprapunem peste câmpul puternic \vec{B} produs de magnetul C un câmp magnetic transversal \vec{B}' a cărui frecvență este ω . Acest câmp stimulează tranzițiile cuantice ale particulelor. Din acest motiv proiecțiile μ_z ale anumitor particule sunt modificate, fapt ce determină modificarea forțelor care se exercită asupra particulelor în câmpul neomogen produs de magnetul B. Astfel, particulele își modifică traiectoriile și ele nu vor mai ajunge la detectorul D.

Figura 5.8: Rezultatele experimentului de rezonanță magnetică nucleară cu un fascicol de atomi de ${}^7\text{Li}$

Presupunem că pulsația câmpului slab este $\omega < \Omega$. Pe măsură ce ω crește intensitatea N a fascicolului ce cade pe detectorul D se diminuează. Pentru $\omega = \Omega$ survine rezonanța între oscilațiile câmpului \vec{B}' și precesia Larmor a particulelor în jurul direcției câmpului \vec{B} . În acest moment intensitatea N a fascicolului ce cade pe detector devine minimă. Astfel:

$$\omega = \gamma B = g \frac{eB}{2m} \quad (5.101)$$

sau:

$$\nu = \frac{\gamma B}{2\pi} = g \frac{eB}{4\pi m} \quad (5.102)$$

În relația de mai sus m poate fi masa protonului sau masa electronului. Având determinată frecvența ν și mărimea câmpului magnetic B se poate determina mărimea raportului giromagnetic pentru nucleele atomilor respectivi. În experimente însă este mult mai comod să se mențină frecvența ν a câmpului magnetic perturbator \vec{B}' constantă și să se varieze lent câmpul magnetic puternic \vec{B} . Fig. (5.8) arată rezultatele obținute

pentru nucleele de ${}^7\text{Li}$ care utilizează un fascicol de molecule cu spinii compensați.

5.5 Atomul în câmp electric. Efectul Stark

Efectul constă în deplasarea și desplicarea subnivelor energetice ale atomului când acesta este introdus într-un câmp electric. Există două tipuri de efect Stark în funcție de existența sau inexistența un moment electric dipolar al atomului în absența câmpului electric \vec{E} .

În primul caz aplicarea unui câmp electric face ca atomul să capete o energie suplimentară $\vec{p}\vec{E}$ care este direct proporțională cu intensitatea câmpului electric \vec{E} . Deplasarea și desplicarea liniilor spectrale este proporțională cu E și efectul este unul liniar.

În al doilea caz, atomul nu posedă un moment electric dipolar. Acțiunea câmpului duce la apariția unui moment electric dipolar $\vec{p} = \alpha\vec{E}$ unde α poartă numele de polarizabilitate. Atunci când câmpul electric crește de la 0 la \vec{E} , momentul de dipol variază de la valoarea 0 la valoarea \vec{p} . Câmpul electric interacționează cu dipolul atomului astfel că acesta capătă o energie egală cu $\alpha E^2/2$. Rezultă că deplasarea și desplicarea liniilor spectrale este proporțională cu E^2 . Efectul poartă numele de efect Stark pătratic. Efectul pătratic în general este mult mai slab decât cel liniar. Un atom care are un moment dipolar propriu în câmp electric capătă un moment dipolar suplimentar care este proporțional cu intensitatea câmpului \vec{E} . În aceste condiții există o suprapunere a efectului Stark liniar și pătratic.

5.5.1 Efectul Stark liniar

Vom discuta acest efect utilizând teoria perturbațiilor aplicată atomului de hidrogen introdus într-un câmp electric aplicat pe axa Oz. Perturbația introdusă de câmpul electric este de forma:

$$H' = eEz \quad (5.103)$$

În discuția pe care o vom face în continuare nu vom lua în considerație spinul electronului astfel că funcțiile proprii ale acestuia depind doar de trei numere cuantice n, l, m și le vom nota cu Ψ_{nlm} .

Starea fundamentală este o stare nedegenerată și ea este caracterizată de funcția de stare Ψ_{000} . Atunci, corecția de ordin întâi pentru energie este:

$$E_1^{(1)} = eE (\Psi_{000}, z\Psi_{000}) = eE \int |\Psi_{000}|^2 z dv \quad (5.104)$$

Deoarece funcția de sub integrală este impară iar integrala se face pe tot spațiul rezultă că integrala este nulă, astfel că:

$$E_1^{(1)} = 0 \quad (5.105)$$

În starea fundamentală nu există deplasare de energie care să fie liniară în \vec{E} .

Vom discuta în continuare efectul Stark pentru primul nivel excitat având $n = 2$. Dacă nu se ia în considerație structura fină a nivelelor energetice, sistemul aflat în această stare are o degenerare de ordin patru, existând patru funcții de stare pentru energia E_2 :

$$\Psi_{200}, \Psi_{21-1}, \Psi_{210}, \Psi_{211} \quad (5.106)$$

Pentru calculul corecției de ordinul întâi a energiei trebuie utilizată teoria perturbațiilor în cazul degenerat. Pentru aceasta este necesar să se calculeze elementele de matrice:

$$H_{nlm, n'l'm'} = eE \int \Psi_{nlm}^* z \Psi_{n'l'm'} dv \quad (5.107)$$

Vom ține cont că funcțiile Ψ_{nlm} pentru atomul de hidrogen conțin o parte radială și o parte exprimată prin intermediul funcțiilor sferice:

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (5.108)$$

Paritatea funcției de stare este dată de paritatea funcțiilor sferice care este $(-1)^l$. Atunci paritatea funcției de sub integrală este $(-1)^{l+l'+1}$. Atunci când paritatea acestei funcții este egală cu -1 integrala este nulă și elementul de matrice este nul. Pentru ca elementul de matrice să poată fi nenul este necesar ca $l = l' \pm 1$, astfel încât funcția de sub integrală să fie pară. În plus dacă se ține cont că funcțiile sferice se exprimă prin intermediul polinoamelor Legendre asociate:

$$Y_{lm} = \frac{P_{lm}(\cos \theta)}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (5.109)$$

că $z = r \cos \theta$ și $dv = r^2 \sin \theta d\theta d\varphi$ elementul de matrice se scrie ca:

$$H_{nlm,n'l'm'} = \frac{eE}{8\pi} \int_0^\infty r^3 R_{nl} R_{n'l'} dr \int_0^\pi P_{lm}(\theta) P_{l'm'}(\theta) \sin 2\theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \quad (5.110)$$

Se observă că integrala după φ este nulă dacă $m \neq m'$ și este nenulă dacă $m = m'$.

De aici rezultă că singurele elemente de matrice nenule sunt acelea pentru care $m = m'$ și $l = l' \pm 1$.

În cazul nivelului $n = 2$ vom renunța la indicele n și vom nota elementele de matrice cu $H_{lm,l'm'}$. Astfel, singurele elemente de matrice nenule sunt $H_{10,00}$ și $H_{00,10}$. Sistemul de ecuații este:

$$\begin{cases} (H_{00,00} - E_2^{(1)}) a_1 + H_{00,11} a_2 + H_{00,10} a_3 + H_{00,1-1} a_4 = 0 \\ H_{11,00} a_1 + (H_{11,11} - E_2^{(1)}) a_2 + H_{11,10} a_3 + H_{11,1-1} a_4 = 0 \\ H_{10,00} a_1 + H_{10,11} a_2 + (H_{10,10} - E_2^{(1)}) a_3 + H_{10,1-1} a_4 = 0 \\ H_{1-1,00} a_1 + H_{1-1,11} a_2 + H_{1-1,10} a_3 + (H_{1-1,1-1} - E_2^{(1)}) a_4 = 0 \end{cases} \quad (5.111)$$

Având în vedere cele discutate mai sus sistemul de patru ecuații se reduce la două ecuații (prima și a treia ecuație). Pentru simplificare vom nota $H_{10,00} = H_{10}$ și $H_{00,10} = H_{01}$.

$$\begin{cases} -E_2^{(1)} a_1 + H_{10} a_3 = 0 \\ +H_{01} a_1 - E_2^{(1)} a_3 = 0 \end{cases} \quad (5.112)$$

Cele două elemente de matrice sunt:

$$H_{10} = \int \Psi_{210}^* z \Psi_{200} dv \quad (5.113)$$

$$H_{01} = \int \Psi_{200}^* z \Psi_{210} dv \quad (5.114)$$

Pentru calculul acestora se ține cont de expresiile celor două funcții de undă:

$$\Psi_{200} = R_{20}(r) Y_{00} = 2 \left(\frac{Z}{2r_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{2r_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2r_0}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (5.115)$$

$$\Psi_{210} = R_{21}(r) Y_{10} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2r_0} \right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{2r_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2r_0}} \frac{\sqrt{3} \cos \theta}{\sqrt{4\pi}} \quad (5.116)$$

Deoarece ambele funcții sunt funcții reale cele două elemente de matrice sunt egale $H_{10} = H_{01}$. Vom calcula integrala în coordonate sferice; Se obțin:

$$H_{10} = \frac{eEZ^3}{18\pi r_0^3} \int_0^\infty r^3 \left(\frac{Ze}{r_0} \right) \left(1 - \frac{Ze}{r_0} \right) e^{-\frac{Zr}{r_0}} dr \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$H_{10} = -\frac{3eEr_0}{Z} \quad (5.117)$$

Pentru ca sistemul (5.112) să aibă soluții este necesar ca determinantul său să fie nul:

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & H_{10} \\ H_{10} & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (5.118)$$

Rezultă că:

$$E_2^{(1)} = \pm H_{10} = \pm \frac{3eEr_0}{Z} \quad (5.119)$$

Dacă $E_2^{(1)} = -\frac{3eEr_0}{Z}$ atunci $a_1 = a_3$ și starea respectivă poate fi caracterizată prin funcția de undă normată:

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{200} + \Psi_{210}) \quad (5.120)$$

Dacă $E_2^{(1)} = \frac{3eEr_0}{Z}$ atunci $a_1 = -a_3$ și starea respectivă poate fi caracterizată de funcția normată:

Figura 5.9: Nivele obținute prin despicare în câmp electric a nivelului energetic $n = 2$ al atomului de hidrogen

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{200} - \Psi_{210}) \quad (5.121)$$

Trebuie subliniat că stările reprezentate de funcțiile de stare Ψ_1 și Ψ_2 nu sunt stări proprii nici ale operatorului de paritate și nici ale operatorului \vec{L}^2 . Deplasarea numărului de undă a liniilor spectrale este

$$\Delta\tilde{\nu} = \pm \frac{3eEr_0}{hcZ} = 12,8 \left(\frac{E}{Z} \right) 10^{-7} \text{cm}^{-1} \quad (5.122)$$

Aceasta înseamnă că pentru punerea în evidență a efectului sunt necesare câmpuri electrice foarte mari (10^7 V/m).

Despicarea nivelului degenerat $n = 2$ a hidrogenului este arătată în Fig. 5.9 . Nivelul se despică în trei subnivele.

Faptul că un sistem clasic cu momentul dipolar \vec{p} aflat în câmp electric are energia potențială $\vec{p}\vec{E}$, sugerează că atomul de hidrogen se comportă ca și cum ar avea un moment electric $3er_0$ independent de intensitatea câmpului electric \vec{E} . Acest moment de dipol se poate orienta în trei moduri diferite: paralel cu câmpul electric (starea Ψ_1), antiparalel cu câmpul electric (starea Ψ_2) și perpendicular pe aceasta. În starea fundamentală hidrogenul nu are moment dipolar permanent. Această concluzie poate fi generalizată în sensul că sistemele aflate în stări nedegenerate nu pot avea momente electrice dipolare permanente.

5.6 Deplasarea Lamb

Studiul atomilor cu ajutorul teoriei relativiste a lui Dirac duce la concluzia că nivelele de energie ale atomilor unielelectronici având aceeași valoare a numerelor cuantice n și j , dar valori diferite ale lui l trebuie să coincidă. Dacă numărul cuantic j este dat numărul cuantic l poate lua valorile $j - 1/2$ și $j + 1/2$. Astfel, numărului cuantic $n = 2$ îi corespund trei nivele energetice: $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, și $2p_{3/2}$. Conform teoriei lui Dirac energia nivelelor $2s_{1/2}$ și $2p_{1/2}$ este aceeași.

Pentru a verifica dacă energia nivelelor $2s_{1/2}$ și $2p_{1/2}$ este aceeași s-a studiat structura fină a liniei H_α a hidrogenului care rezultă din tranzițiile de pe nivelul $n = 3$ pe nivelul cu numărul cuantic principal $n = 2$. Primele experimente efectuate au dat rezultate contradictorii, unii spectroscopiști negăsind nici o neconcordanță între rezultatele experimentale și teoria lui Dirac, în timp ce alții au găsit deplasarea în sus a nivelului $2s_{1/2}$ de aproximativ $0,03 \text{ cm}^{-1}$. Această deplasare este foarte mică și anume de 10 ori mai mică decât distanța dintre nivelul $2s_{1/2}$ și următorul nivel energetic $2p_{3/2}$. Dificultatea care apare la punerea în evidență a acestei deplasări este aceea că nivelele energetice sunt relativ largi iar distanța dintre ele este foarte mică.

Problema a fost rezolvată de W. E. Lamb și R. C. Retherford în anul 1947. În loc să se încerce punerea în evidență a structurii fine a hidrogenului investigând spectrul optic, Lamb și Retherford au folosit tehnici de microunde pentru a stimula o tranziție directă în radio-frecvență între nivelele $2s_{1/2}$ și $2p_{1/2}$.

Deoarece nu există nici o regulă de selecție cu privire la numărul cuantic n , pot exista tranziții între nivelele având același număr cuantic principal. Acest fapt a fost semnalat în 1928 de Grotian care a sugerat că ar putea fi implicate frecvențe din domeniul undelor radio. De exemplu în cazul tranziției $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ separarea energetică este $\Delta E = 4,52 \times 10^{-2} \text{ eV}$ și corespunde unei frecvențe $\nu = \Delta E/h = 10949 \text{ MHz}$. Deoarece frecvențele radio sunt mici, ratele de tranziție pentru emisia spontană (care este proporțională cu ν^3) sunt foarte mici. Cu toate acestea se pot produce tranziții stimulate dacă atomii sunt introduși într-un câmp magnetic care oscilează cu o frecvență potrivită.

Experimentul propus de Lamb și Retherford se fundamentează pe faptul că nivelul excitat $2p_{1/2}$ este instabil în timp ce nivelul $2s_{1/2}$ este metastabil. Într-adevăr, timpul de viață al nivelului $2s_{1/2}$ este de 10^8 ori

Figura 5.10: Instalația utilizată în experimentul Lamb: K - cuptor, E- fasciol de electroni, N, S - polii unui magnet, P - țintă, G- galvanometru

mai mare decât timpul de viață al nivelului $2p_{1/2}$. Tranziția de pe nivelul $2p_{1/2}$ pe nivelul $1s_{1/2}$ este permisă de regula de selecție $\Delta l = \pm 1$ în timp ce tranziția $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ este interzisă deoarece $\Delta l = 0$. Această a doua tranziție nu se poate realiza decât prin emisia a 2 fotoni și prin urmare probabilitatea ei de realizare este de 10^8 ori mai mică decât a tranziției $2p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$.

În cadrul experimentului Lamb și Retherford moleculele de hidrogen au fost inițial dissociate într-un cuptor de wolfram la temperaturi de 2500 °C (Fig. 5.10).

Se obține astfel un fascicol de atomi de hidrogen aflați în starea $1s_{1/2}$ (starea fundamentală). Acești atomi cad pe o țintă metalică P legată la pământ prin intermediul unui galvanometru G. Dacă atomii fascicolului nu sunt excitați ei nu pot transmite energie electronilor din ținta P. Acești electroni nu pot părăsi ținta P astfel că galvanometrul G nu înregistrează nici un curent.

Pentru a realiza excitatea fascicolului de atomi de hidrogen se bombardează acest fascicol cu un fascicol de electroni cu energia cinetică ceva mai mare decât 10,2 eV, care este pragul pentru excitarea nivelului $n = 2$. O mică fracțiune din atomii ($1/10^8$) se excită în stările $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ și $2p_{3/2}$. Atomii ajunși în stările $2p_{1/2}$ și $2p_{3/2}$ se dezexcită rapid pe nivelul fundamental $1s_{1/2}$ și nu ajung excitați pe țintă. Doar atomii excitați în starea $2s_{1/2}$ metastabilă ajung pe țintă, scot electroni din aceasta cedându-și energia de excitare. Galvanometrul va indica trecerea unui curent a cărui intensitate este proporțională cu numărul de atomi aflați în starea $2s_{1/2}$. Se trece apoi fascicolul printr-un câmp magnetic de ra-

Figura 5.11: Deplasarea Lamb în cazul hidrogenului pentru nivelul $n = 2$

diofrecvență cu frecvență potrivită. Dacă nivelele $2s_{1/2}$ și $2p_{1/2}$ nu sunt confundate, acțiunea câmpului magnetic provoacă tranziții stimulate între nivelele $2s_{1/2}$ și $2p_{1/2}$. Rata acestor tranziții este maximă atunci când frecvența câmpului magnetic exterior corespunde diferenței de energie între cele două nivele considerate.

Trecând din starea $2s_{1/2}$ în starea $2p_{1/2}$ atomii ajung aproape instantaneu în starea fundamentală $1s_{1/2}$. Acest fapt se traduce prin diminuarea curentului care trece prin galvanometru. Observând minimumul curentului se determină frecvența de rezonanță a câmpului magnetic care corespunde diferenței de energie dintre nivelele $2s_{1/2}$ și $2p_{1/2}$.

Experimentele efectuate de Lamb și Retherford arată că nivelele de energie sunt distincte. Diferența de frecvență între aceste nivele a fost găsită ca fiind $1057 \pm 0,09$ MHz. Această diferență (și în general toate diferențele între nivelele structurii fine având aceleași numere cuantice n și j dar având l diferit) poartă numele de deplasare Lamb.

În Fig. 5.11 sunt reprezentate pentru hidrogen pozițiile relative ale nivelelor $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ și $2p_{3/2}$. Deplasarea Lamb este foarte mică și anume de 10 ori mai mică decât cea dintre nivelele $2p_{3/2}$ și $2s_{1/2}$ datorată structurii fine.

O astfel de deplasare este prezisă într-o teorie cuantică relativistă. Valoarea calculată a deplasării Lamb este $1057,864 \pm 0,014$ MHz, valoare ce este în concordanță cu cea obținută experimental.

5.7 Tabelul periodic al elementelor

Repetarea periodică a proprietăților elementelor chimice a fost descoperită de Mendeleev în anul 1869 și și-a găsit expresia în sistemul periodic care a fost interpretat în anul 1922 de Bohr pe baza teoriei structurii atomilor. Acesta a afirmat că proprietățile elementelor sunt date nu de masa atomică așa cum a presupus inițial Mendeleev ci de sarcina nucleului. Considerând sarcina elementară e , sarcina nucleului se exprimă ca fiind Ze , unde Z este un număr întreg. Acest număr determină numărul elementului în tabelul periodic și din acest motiv poartă numele de număr atomic de ordine. Sarcina învelișului electronic este egală și de semn schimbat cu sarcina nucleului. Astfel, Z reprezintă numărul de electroni care se află în jurul nucleului. Proprietățile elementelor depind în special de numărul de electroni constituiți în învelișul electronic al atomului precum și de structura acestui înveliș. Proprietățile chimice ale elementelor sunt determinate de electronii periferici.

În natură se găsesc 90 de elemente. Uraniul este elementul cel mai greu având numărul atomic $Z = 92$. Elementul Tecnețiu ($Z = 43$) și Prometium ($Z = 61$) nu există în stare naturală. Ele sunt elemente radioactive a căror perioadă de dezintegrare este mult mai mică decât viața planetei. Elementele cu $Z > 92$ se numesc elemente transuraniene. Ele sunt elemente radioactive și au fost obținute în mod artificial.

Periodicitatea proprietăților chimice este manifestarea vizibilă a structurii interne a învelișului electronic. Elaborarea teoriei sistemului periodic se reduce la studiul învelișului electronic. În această teorie se caută să se caracterizeze stările electronilor considerați individuali și nu învelișul ca un ansamblu. Starea cuantică a învelișului electronic ar trebui caracterizată cu ajutorul unei singure funcții de undă care să depindă de toate coordonatele electronilor din care este format. Din cauza interacției dintre electroni coordonatele acestora nu pot fi separate ceea ce înseamnă că funcția de undă totală nu poate fi exprimată ca un produs de funcții de undă individuale. Problema determinării exacte a unei funcții de undă a unui sistem de mai multe particule care interacționează între ele este inaccesibilă din punct de vedere matematic.

Din acest motiv starea unui electron va fi caracterizată cu ajutorul a patru numere cuantice n, l, m_l, m_s . Aplicarea principiului Pauli duce la concluzia că într-o stare cuantică dată nu se găsește decât un singur electron. Numărul cuantic de spin m_s ia doar două valori $m_s = \pm 1/2$. În

acest caz putem spune că într-o stare caracterizată de numerele cuantice n, l, m_l pot exista doar 2 electroni.

Ansamblul electronilor unui atom care are o valoare dată a numărului cuantic principal n formează o pătură electronică. Conform terminologiei în vigoare în spectroscopia de raze X, diferitele pături sunt notate cu literele majuscule ale alfabetului latin.

n	1	2	3	4	5
Pături	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>O</i>
Nr. electroni	2	8	18	32	50

Ansamblul electronilor ce au aceleași numere cuantice n, l formează un orbital. Stările în interiorul orbitalului diferă prin numărul cuantic m_l . Deoarece m_l ia $2l + 1$ valori pot exista $2(2l + 1)$ electroni pe un orbital. Diferiți orbitali corespund diferitelor valori l ce sunt notate cu litere mici ale alfabetului latin.

l	0	1	2	3	4
Orbital	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>
Nr. electroni	2	6	10	14	18

Astfel putem scrie configurația învelișului electronic al unui atom. De exemplu $1s^2 2s^2 2p^6$ semnifică faptul că în starea $n = 1$ se află 2 electroni, în starea $n = 2, l = 0$ se află 2 electroni iar în starea $n = 2, l = 1$ se află 6 electroni. Numărul maxim de electroni dintr-o pătură se află sumând după toate valorile posibile ale lui l :

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2 \quad (5.123)$$

Se poate examina modul în care se ocupă păturile electronice. Astfel în cazul că se trece de la un atom cu numărul atomic Z la unul cu numărul atomic $Z + 1$ este necesar ca noua configurație electronică să aibă cea mai mică energie posibilă. Altfel spus energia de legătură a norului electronic trebuie să fie maximă. Pare normal ca păturile să se ocupe succesiv iar orbitalii în ordinea s, p, d, f .

Energia de legătură a electronului nu depinde numai de energia potențială în câmpul electric ci și de energia centrifugală $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}$ care are

semn contrar energiei potențiale de interacție electrostatică. Aceste două energii au acțiuni opuse. Putem spune că forța centrifugă ce apare în mișcarea electronului tinde să îndepărteze norul electronic de nucleu. Din acest motiv cei zece electroni de pe orbitalul $3d$ au energie mai mică decât a celor 2 electroni de pe pătura $4s$. Aceasta înseamnă că orbitalul $4s$ se ocupă cu electroni înaintea nivelului $3d$ deși numărul cuantic al celui de-al doilea este mai mic. Energia centrifugă este mult mai mare pentru orbitalii d și f pentru care $l(l+1) = 6$, respectiv $l(l+1) = 12$. În realitate păturile electronice se ocupă (făcând abstracție de anumite detalii) astfel:

$$\begin{aligned} &1s^2 \\ &2s^2 2p^6 \\ &3s^2 3p^6 \\ &4s^2 3d^{10} 4p^6 \\ &5s^2 4d^{10} 5p^6 \\ &6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 \\ &7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6 \end{aligned}$$

5.8 Atomul de Heliu

După atomul de Hidrogen cel mai simplu atom este atomul de Heliu ($Z = 2$) precum și ionii de Li^+ ($Z = 3$), Be^{++} ($Z = 4$). În spectrele acestor atomi se regăsesc aceleași serii spectrale ca și în cazul metalelor alcaline.

Ecuția lui Schrödinger pentru stările staționare ale electronilor din atomul de Heliu este:

$$H\Psi = (H_1 + H_2 + U_{12})\Psi = E\Psi \quad (5.124)$$

unde funcția de undă Ψ depinde de coordonatele celor doi electroni, E este energia stării staționare, H_1 și H_2 sunt hamiltonienii primului și a celui de-al doilea electron (în cazul că electronii nu interacționează între ei) și U_{12} este partea din energia totală care corespunde interacției dintre electroni:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \quad (5.125)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_e} \quad (5.126)$$

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}^2} \quad (5.127)$$

unde ∇_1^2 și ∇_2^2 sunt operatorii Laplace corespunzători primului și celui de-al doilea electron ai căror vectori de poziție se scriu ca $\vec{r}_1(x_1, y_1, z_1)$ și $\vec{r}_2(x_2, y_2, z_2)$:

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$$

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}$$

Pentru a trata din punct de vedere teoretic atomul de Helium vom considera termenul U din hamiltonian ca o perturbație. În aproximația de ordin zero ecuația lui Schrödinger se prezintă sub forma:

$$H_0 \Psi^{(0)} = E_0 \Psi^{(0)} \quad (5.128)$$

unde $H_0 = H_1 + H_2$, iar $\Psi^{(0)}$ este funcția de undă în aproximația de ordin zero. După găsirea soluțiilor acestei ecuații adică după determinarea lui $\Psi^{(0)}$ și E_0 se caută soluții în aproximația de ordin întâi de forma $\Psi = \Psi^{(0)} + \Psi^{(1)}$ și $E = E_0 + E_1$. Astfel:

$$(H_0 + U_{12}) (\Psi^{(0)} + \Psi^{(1)}) = (E_0 + E_1) (\Psi^{(0)} + \Psi^{(1)}) \quad (5.129)$$

Utilizând teoria perturbațiilor independente de timp corecția la energie este:

$$E_1 = (\Psi^{(0)}, U_{12} \Psi^{(0)}) = \int \Psi^{*(0)} U_{12} \Psi^{(0)} d\tau \quad (5.130)$$

Examinăm ecuația în aproximația de ordin zero. Ea se scrie:

$$(H_1 + H_2) \Psi^{(0)} = E_0 \Psi^{(0)} \quad (5.131)$$

unde H_1 depinde numai de \vec{r}_1 iar H_2 depinde doar de \vec{r}_2 . Din acest motiv funcția de undă neperturbată se poate scrie ca un produs de două funcții

care depind una de \vec{r}_1 iar cea de-a doua de \vec{r}_2 . Astfel are loc separarea variabilelor. Punând $\Psi^{(0)} = \Psi_1^{(0)} \Psi_2^{(0)}$ din relația (5.131) se obține:

$$\frac{H_1 \Psi_1^{(0)}}{\Psi_1^{(0)}} + \frac{H_2 \Psi_2^{(0)}}{\Psi_2^{(0)}} = E_0 \quad (5.132)$$

Primul termen nu depinde decât de coordonatele primului electron iar termenul al doilea nu depinde decât de coordonatele celui de-al doilea electron. Atunci cei doi termeni trebuie să fie constanți:

$$H_1 \Psi_1^{(0)} = E_{01} \Psi_1^{(0)} \quad (5.133)$$

$$H_2 \Psi_2^{(0)} = E_{02} \Psi_2^{(0)} \quad (5.134)$$

unde $E_0 = E_{01} + E_{02}$.

Cele două ecuații sunt identice și nu diferă decât prin natura coordonatei. Fiecare din aceste ecuații descrie starea staționară a unui electron în câmpul nucleului. Astfel, în aproximația de ordin zero se ajunge la calculul funcțiilor și valorilor proprii ai unui atom hidrogenoid. Determinăm în această aproximație energia de ionizare. Pentru atomul de hidrogen această energie este 13,539 eV. Pentru un atom hidrogenoid cu sarcina nucleului Ze ea trebuie să fie de Z^2 mai mare. Deoarece atomul de heliu posedă doi electroni atunci energia necesară pentru a îndepărta electronii la infinit de nucleu este în această aproximație egală cu $(E_0)_{ion} = 2 \times Z^2 \times 13,539 = 108$ eV. Cunoscând funcția de undă în aproximația de ordin zero cu ajutorul ecuației (5.130) se poate determina corecția ce trebuie adusă energiei de ionizare pentru a obține rezultatul în aproximația de ordin unu:

$$(E_0 + E_1)_{ion} = \left(2Z^2 - \frac{5}{4}Z \right) (E_0)_{ion} \quad (5.135)$$

Remarcăm că seriile spectrale rezultă din excitarea unui singur electron și nu din excitarea a doi electroni (ultimul proces este extrem de puțin probabil). Considerăm în aproximația de ordin zero că unul din electroni nu este excitat iar altul se află într-o stare excitată. Notăm cu $\Psi_1^{(0)}$ (1) funcția de undă a electronului neexcitat ($n = 1, l = 0, m_s = 0$) și cu $\Psi_k^{(0)}$ (2) funcția de undă a electronului excitat. Indicele k desemnează cele trei numere cuantice ce descriu electronul (n, l, m_l). În

această aproximație funcția de undă se scrie ca produsul $\Psi_1^{(0)}(1) \Psi_k^{(0)}(2)$. Această funcție nu respectă principiul de indiscernabilitate al particulelor. Dacă se permută electronul 1 cu electronul 2 se obține funcția de undă $\Psi_1^{(0)}(2) \Psi_k^{(0)}(1)$ care descrie aceeași stare a atomului. O suprapunere a celor două funcții de undă caracterizează aceeași stare inițială. Din cauza indiscernabilității celor două particule nu se realizează decât stările descrise de funcțiile de undă simetrice sau antisimetrice:

$$\Psi_s^{(0)}(1, 2) = \Psi_1^{(0)}(1) \Psi_k^{(0)}(2) + \Psi_1^{(0)}(2) \Psi_k^{(0)}(1) \quad (5.136)$$

$$\Psi_a^{(0)}(1, 2) = \Psi_1^{(0)}(1) \Psi_k^{(0)}(2) - \Psi_1^{(0)}(2) \Psi_k^{(0)}(1) \quad (5.137)$$

Caracterul de simetrie și antisimetrie este dat de posibilitatea de permutare al electronilor care este legată de poziția electronilor ce este caracterizată prin coordonatele spațiale. Deoarece sistemul este format din electroni care sunt fermioni atunci funcția de stare a sistemului trebuie să fie antisimetrică. Trebuie remarcat că această condiție trebuie pusă asupra funcțiilor de stare complete unde în afară de coordonatele spațiale trebuie implicate și coordonatele de spin. Atunci, starea electronului este caracterizată cu ajutorul a patru parametri: 3 de poziție și unul de spin. Funcțiile de undă care depind doar de coordonatele spațiale satisfac principiul de indiscernabilitate al particulelor și pot fi folosite pentru a descrie starea atomului. Principiul lui Pauli exclude ca doi electroni să aibă aceleași numere cuantice (n, l, m_l, m_s) , dar doi electroni pot avea numerele cuantice (n, l, m_l) . În particular pot exista stări cu $k = 1$ atunci când cei doi electroni se găsesc în starea fundamentală caracterizată de numerele cuantice $(n = 1, l = 0, m_l = 0)$. Pentru a caracteriza această stare trebuie aleasă dintre cele două funcții de undă cea simetrică deoarece cea antisimetrică se anulează. Astfel, starea fundamentală este caracterizată de o funcție de stare simetrică.

Putem utiliza oricare din expresiile pentru calculul aproximației de ordin unu cu ajutorul teoriei perturbațiilor. Se găsesc deasemenea funcții de undă simetrice și funcții de undă antisimetrice pe care le vom nota cu $\Psi_a(1, 2)$ și $\Psi_s(1, 2)$. Funcția de undă antisimetrică $\Psi_a(1, 2)$ descrie starea *orto* iar funcția de undă simetrică $\Psi_s(1, 2)$ descrie starea *para*. Nu există două tipuri de heliu ci doar două stări cuantice diferite.

Cunoscând funcțiile de undă în aproximația de ordin zero putem calcula cu ajutorul formulei corecția care trebuie adusă energiei în aproxi-

mația de ordin unu. Pentru aceasta se normalizează funcțiile de stare și vom nota cu C_s constanta de normare a stării simetrice și cu C_a constanta de normare a stării antisimetrice. Pentru starea descrisă de funcția de undă simetrică corecția de ordin unu la energie este:

$$E_{s1} = |C_s|^2 \int \Psi_S^{(0)*} \frac{e^2}{4\pi r_{12}^2} \Psi_S^{(0)} d\tau \quad (5.138)$$

Pentru starea descrisă de funcția de undă antisimetrică corecția de ordin unu la energie este:

$$E_{a1} = |C_a|^2 \int \Psi_a^{(0)*} \frac{e^2}{4\pi r_{12}^2} \Psi_a^{(0)} d\tau \quad (5.139)$$

Substituind expresiile funcțiilor date de expresiile (5.136) și (5.137) în (5.139) rezultă că:

$$E_{s1} = |C_s|^2 (I_C + I_{CC}) \quad (5.140)$$

$$E_{a1} = |C_a|^2 (I_C - I_{CC}) \quad (5.141)$$

unde:

$$I_C = 2 \int \left| \Psi_1^{(0)}(1) \right|^2 \frac{e^2}{4\pi r_{12}^2} \left| \Psi_k^{(0)}(2) \right|^2 d\tau \quad (5.142)$$

$$I_{CC} = 2 \int \frac{e^2}{4\pi r_{12}^2} \Psi_1^{(0)}(1) \Psi_k^{(0)*}(1) \Psi_k^{(0)}(2) \Psi_1^{(0)*}(2) d\tau \quad (5.143)$$

Se deduce că mărimile E_{s1} și E_{a1} sunt pozitive. Astfel: $I_C + I_{CC} > 0$ și $I_C - I_{CC} > 0$. Rezultă că o stare orto are o energie mai mică decât nivelul energiei stării para. Termenul I_C poate fi interpretat aproape clasic. Astfel $\left| \Psi_1^{(0)}(1) \right|^2 e$ este o densitate volumică de sarcină datorată primului electron (deoarece $\left| \Psi_1^{(0)}(1) \right|^2$ reprezintă densitatea volumică de probabilitate pentru primul electron) iar $\left| \Psi_k^{(0)}(2) \right|^2 e$ este densitatea volumică de sarcină datorată celui de-al doilea electron. Atunci acest termen poate fi considerat ca o energie potențială repulsivă. Termenul I_{CC} este de natură pur cuantică și poartă numele de energie de schimb. Aceasta apare datorită indiscernabilității particulelor. Din acest motiv energia de

schimb este caracteristică nu numai forțelor coulombiene ci ea se manifestă în toate sistemele de particule identice.

Vom ține cont în continuare și de spinul electronilor. În aproximația de ordin zero partea din funcția de stare datorată spinilor electronilor este separată de componenta spațială. Partea de funcție de undă de spin trebuie și ea să satisfacă condițiile de simetrie și antisimetrie. Există patru funcții de spin dintre care trei sunt simetrice și una este antisimetrică. Aceasta se datorește faptului că există două orientări posibile pentru momentul de spin:

$$\varphi_s^{(1)} = \varphi_+(1) \varphi_+(2) \quad (5.144)$$

$$\varphi_s^{(2)} = \varphi_-(1) \varphi_-(2) \quad (5.145)$$

$$\varphi_s^{(3)} = \varphi_+(1) \varphi_-(2) + \varphi_+(2) \varphi_-(1) \quad (5.146)$$

$$\varphi_a^{(4)} = \varphi_+(1) \varphi_-(2) - \varphi_+(2) \varphi_-(1) \quad (5.147)$$

Prima funcție arată că proiecțiile spinilor pe o axă sunt egale cu $1/2$, a doua funcție arată ca proiecțiile spinilor sunt egale cu $-1/2$ iar pentru a treia funcție simetrică proiecțiile spinilor sunt antiparalele. În primele două cazuri spinul total al electronilor este 1, și proiecția este egală cu 1 respectiv cu -1 . Dar dacă spinul total este 1 atunci trebuie să existe și o valoare zero a proiecției sale. Valoarea zero este realizată de a treia funcție de undă simetrică. În ceea ce privește funcția de undă antisimetrică proiecția spinului este nulă și cum aceasta este singura valoare posibilă pentru proiecție atunci și spinul total este nul.

Pentru determinarea funcției de stare se înmulțesc funcțiile spațiale cu cele de spin iar aceasta trebuie să fie o funcție antisimetrică în raport cu permutarea celor doi electroni. Astfel se obțin patru funcții de stare:

$$\varphi_s^{(1)}\Psi_a, \varphi_s^{(2)}\Psi_a, \varphi_s^{(3)}\Psi_a, \varphi_a^{(4)}\Psi_S \quad (5.148)$$

Primele trei funcții corespund spinului egal cu unu cu proiecțiile -1 , 1 și 0 . Acesta este tripletul care corespunde stării orto. Nivelele energetice și liniile spectrale corespunzătoare tripletului satisfac regulile de selecție. Ele se împart în trei componente ca urmare a interacției spin orbită. În

aceste stări atomii au momente magnetice diferite de zero și în prezența unei câmp magnetic prezintă efect Zeeman.

Funcția de undă $\varphi_a^{(4)}\Psi_S$ descrie starea para în care spinul este nul astfel că în această stare nu apare efectul Zeeman.

5.9 Raze X

Razele X sunt produse în interiorul unor tuburi vidate prin bombardarea cu electroni rapizi a unor plăci metalice plasate în fața unui anod. Razele X sunt invizibile pentru ochiul uman dar au proprietatea de a produce o fluorescență vizibilă în anumite substanțe cristaline naturale (platinocinaură de bariu, sulfură de zinc) sau în unele pulberi preparate artificial (luminofori). Ele impresionează placa fotografică și produc ionizarea gazelor.

Natura razelor X este electromagnetică, lungimea de undă a acestora fiind foarte mică în raport cu cea a radiațiilor din spectrul vizibil.

Se disting două tipuri de raze X. Dacă energia electronilor care suferă o frânare pe anod nu depășește o anumită valoare, caracteristică pentru substanța anodului, radiația poartă numele de radiație de frânare. Radiația X de frânare are un spectru continuu. Distribuția în intensitate funcție de lungimea de undă, prezintă un maxim pentru o anumită lungime de undă. Scăderea intensității se face lent în zona lungimilor de undă mari și brusc în zona lungimilor de undă mici (Fig. 5.12).

Dacă energia electronilor depășește o anumită valoare apar radiații caracteristice care depind de substanța anodului. Spectrul radiației caracteristice este un spectru de linii și este caracteristic fiecărui element. Fiecare linie din spectrul radiației X caracteristice este legată de trecerea atomului de pe un nivel energetic pe un alt nivel energetic. Frecvența radiației emise se calculează cu formula:

$$\nu = \frac{E_1 - E_2}{h} \quad (5.149)$$

unde E_1 este energia nivelului inițial iar E_2 este energia nivelului final. Deoarece lungimile de undă ale radiației X sunt mici (de ordinul nanometrilor) diferența dintre energia stării inițiale și finale este mare. Astfel, pentru elementele grele această diferență este de $10^3 - 10^4$ ori mai mare decât diferența dintre energiile nivelelor care determină radiația din

Figura 5.12: Intensitatea radițiilor X emise de un anod de crom pe care cad electroni accelerați la tensiunea $U = 35$ keV

spectrul vizibil. Pentru a se putea produce tranziții din care să rezulte o radiație electromagnetică cu lungimea de undă foarte mică este necesar ca în păturile interne apropiate de nucleu să apară stări libere neocupate cu electroni care să poată fi ocupate de electronii de pe nivelele superioare. Aceste stări apar prin bombardarea atomilor cu electroni rapizi sau fotoni de energie mare.

Presupunem de exemplu că s-a extras un electron din pătura K a unui atom. Energia atomului crește cu valoarea energiei de ionizare corespunzătoare păturii K. Fie E_1 energia pe care o capătă atomul după extragerea electronului. Starea liberă din pătura K poate fi ocupată de exemplu de un electron din pătura L. Atomul în această stare va avea energia E_2 ($E_2 < E_1$). Trecerea electronului de pe pătura L pe pătura K se face prin emisia unei cuante cu o frecvență care este dată de (5.149). Locul lăsat liber în pătura L va fi ocupat de un electron ce provine din pătura M, această tranziție determinând emisia unei noi cuante X cu energia mai mică decât prima. Trebuie remarcat că tranzițiile pot avea loc nu numai între pături vecine dar și între pături mai depărtate. Aceste tranziții determină apariția unor cuante X de energie mult mai mare. Ansamblul acestor procese conduce la apariția unui spectru de raze X.

Atunci când un electron este scos din învelișul electronic atomul trece

Figura 5.13: Schema inversată a nivelelor energetice

într-o stare excitată și energia sa crește cu valoarea energiei de ionizare. Din acest motiv se poate utiliza pentru a explica producerea razelor X, schema de nivele a unui atom excitat, schemă stabilită atunci când un singur electron este eliminat din nivelul considerat, numărul celorlalți electroni din înveliș rămânând neschimbat. Rezultă că schema de nivele a unui atom excitat este inversă în raport cu schema unui atom neexcitat. Energiile în acest caz sunt egale în valoare absolută cu energiile nivelelor energetice ale atomului neexcitat. În Fig. 5.13 este prezentată schema inversată a nivelelor energetice ale unui atom.

În atomul neexcitat păturile electronice corespunzătoare numerelor cuantice principale $n = 1, 2, 3, \dots$ se notează cu K, L, M, ... Utilizăm notați-

ile spectroscopice în cazul atomului excitat: $1^2S_{1/2}$, $2^2P_{1/2}$... Utilizarea acestor notații este justificată deoarece subpăturile electronice interne fiind complete, momentul cinetic este nul. Dacă un electron este scos dintr-o pătură momentul cinetic al electronului este transmis cu semn contrar acesteia.

În câmp magnetic nul, energia nu depinde de numărul cuantic m ; ea depinde de numerele cuantice n și j . Astfel pătura K se reduce la un singur nivel energetic $1^2S_{1/2}$ ($n = 1$, $l = 0$, $j = 1/2$). Pătura L se împarte în trei subpături L_I , L_{II} , L_{III} . Subpătura L_I corespunde subnivelului 2S, iar subpăturile L_{II} și L_{III} corespund subnivelurilor $2^2P_{1/2}$ și $2^2P_{3/2}$.

Putem considera lipsa unui electron într-o pătura ca pe un "gol". În mod formal "golul" se poate afla pe diverse stări energetice. Trecerea "golului" de pe o stare energetică superioară pe una inferioară determină apariția unei cuante X. Schema energetică inversată este analoagă schemei energetice a unui atom cu un singur electron. În aceste condiții regulile de selecție din cazul unui atom cu un singur electron rămân valabile. Astfel:

$$\Delta J = -1, 0, +1 \quad \text{și} \quad \Delta L = \pm 1$$

Spectrele de raze X se compun din serii de linii care se desemnează prin literele K, L, M... Seria K rezultă din tranzițiile de pe nivelul K pe nivele cu energie mai mică.

Mosley a stabilit o lege care leagă frecvența liniilor spectrale de numărul atomic al elementului. Astfel, pentru o linie din seria K:

$$\sqrt{\nu} = M(Z - a) \quad (5.150)$$

unde Z este numărul atomic al elementului care emite linia, M și a fiind constante. Aceiași formulă dar cu alte valori ale constantelor se poate utiliza pentru determinarea liniilor spectrale din seriile L, M.

Vom încerca să justificăm apariția termenului $(Z - a)$. Presupunem că într-un atom există o stare liberă în pătura K. Presupunem că un electron din pătura L va trece pe starea liberă. Acest electron nu suferă nici o acțiune datorită electronilor periferici deoarece aceștia formează o pătură sferică încărcată, câmpul creat în interiorul ei fiind nul. Câmpul electric care acționează asupra acestui electron este datorat nucleului

și electronului de pe pătura K. Putem considera că asupra electronului acționează nucleul însă cu o sarcină efectivă $(Z - 1)e$. Spunem că electronul de pe pătura K produce o ecranare a nucleului. În cazul că starea liberă există într-o altă pătură decât K atunci sarcina efectivă a nucleului este $(Z - a)e$, unde a poartă numele de constantă de ecranare. Cazul este analog cu cazul metalelor alcaline. Atunci, numerele de undă a liniilor emise se scriu ca:

$$\tilde{\nu} = R(Z - a)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (5.151)$$

unde R este constanta lui Rydberg.

Atunci când un fascicol paralel de raze X traversează o substanță intensitatea lui este atenuată. Există două cauze: difuzia (o parte din raze suferă împrăștieri și sunt scoase din fascicol nemaieregăsindu-se în fascicolul inițial) și absorbția (atunci când o parte din energia radiațiilor X se transformă în căldură). Dacă un fascicol paralel de raze X monocromatic cade pe o substanță micșorarea intensității este proporțională cu grosimea stratului străbătut de radiație:

$$dI = -\mu I dx \quad (5.152)$$

unde I este intensitatea fascicolului incident pe stratul de substanță iar μ un coeficient ce caracterizează scăderea intensității și care poartă numele de coeficient de atenuare. Rezultă intensitatea fascicolului după ce acesta stăbate un strat de grosime d prin integrarea relației (5.152):

$$I = I_0 \exp[-\mu d] \quad (5.153)$$

unde I_0 este intensitatea fascicolului înainte de a trece prin stratul de substanță. Deoarece scăderea intensității fascicolului are loc datorită difuziei și absorbției putem scrie:

$$\mu = \tau + \sigma \quad (5.154)$$

unde τ este coeficientul de atenuare datorat absorbției iar σ este coeficientul de atenuare datorat difuziei. Coeficienții τ și σ sunt proporționali cu masa de substanță. Din acest motiv se utilizează coeficienți masici:

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho} \quad ; \quad \tau_m = \frac{\tau}{\rho} \quad ; \quad \sigma_m = \frac{\sigma}{\rho} \quad (5.155)$$

Figura 5.14: Coeficientul de absorbție al razelor X în funcție de lungimea de undă pentru cupru și argint

Atunci relația (5.153) se scrie:

$$I = I_0 \exp[-\mu_m \rho x] \quad (5.156)$$

În calculele teoretice este mult mai comod să se utilizeze coeficienții atomici

$$\mu_a = \frac{\mu}{\rho} m = \frac{\mu}{\rho} \frac{A}{N_A} \quad (5.157)$$

$$\tau_a = \frac{\tau}{\rho} m = \frac{\tau}{\rho} \frac{A}{N_A} \quad (5.158)$$

$$\sigma_a = \frac{\sigma}{\rho} m = \frac{\sigma}{\rho} \frac{A}{N_A} \quad (5.159)$$

unde m este masa unui atom, iar N_A este numărul lui Avogadro.

În general coeficienții de absorbție ai razelor X cresc cu lungimea de undă, dar pentru anumite valori aceștia scad brusc (Fig. 5.14). Această particularitate a absorbției razelor X are o explicație fizică simplă. Presupunem că lungimea de undă a radiațiilor X este suficient de mică astfel încât nivelele profunde să fie excitate (de exemplu nivelul K). Energia razelor X este utilizată pentru ca aceste nivele să fie excitate (electroni de pe aceste nivele să fie scoși din atom). Pe măsură ce lungimea de undă

crește, când depășește o anumită valoare energia radiației X nu mai este suficientă pentru a excita nivelul K, astfel că absorbția se diminuează brusc. Iarăși coeficientul de absorbție crește iar atunci când nici nivelul L_I nu mai poate fi excitat coeficientul de absorbție scade brusc.

Există o relație empirică care descrie dependența de lungimea de undă a coeficientului de absorbție:

$$\tau_m = CZ^4\lambda^3 \quad (5.160)$$

Ea se verifică cu o bună precizie între pragurile de absorbție. Constanta C scade după fiecare prag de absorbție.

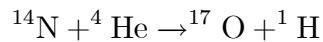
Capitolul 6

Fizică nucleară

6.1 Noțiuni fundamentale

6.1.1 Nomenclatura și constituenții nucleului

Nucleul este constituit din protoni și neutroni. Protonul a fost descoperit în anul 1919 odată cu prima reacție nucleară realizată de Rutherford. Nucleele de azot au fost bombardate cu particule α și s-a obținut un izotop al oxigenului și un proton:



Având în vedere faptul că înainte de a se descoperi protonul fusese descoperit electronul în primul model al nucleului s-a presupus că acesta este constituit din protoni și electroni. Acest model a prezentat o serie de deficiențe care au fost rezolvate în anul 1932 când Chadwich a descoperit neutronul. Ulterior Ivancenco și Meisemberg (în mod independent) au propus modelele în care nucleul este format din protoni și neutroni (fără electroni). Se introduc noțiunile:

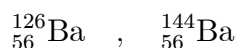
1. *Numărul de masă* A care reprezintă numărul de nucleoni (protoni și neutroni) din care este contituit nucleul.
2. *Numărul atomic* Z care reprezintă numărul de protoni din nucleu; el este o măsură a sarcinii cu care este încărcat nucleul.
3. *Numărul de neutroni din nucleu* este notat cu N . Între numerele A , Z și N exista o relație simplă și anume:

$$Z + N = A \tag{6.1}$$

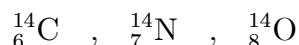
Pentru denumirea speciilor nucleare se utilizează notația ${}^A_Z\text{El}_N$ unde cu El am notat elementul chimic.

4. *Nuclidul* reprezintă o specie nucleară și este caracterizat de numărul de masă A și numărul atomic Z . În prezent sunt cunoscuți peste 1200 nuclizi.

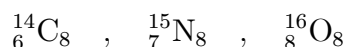
5. *Izotopii* sunt nuclizi care au același număr atomic Z :



6. *Izobarii* sunt nuclizii care au același număr de masă:

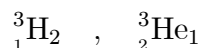


7. *Izotonii* sunt nuclizii care au același număr de neutroni:



8. *Izomerii* sunt nuclizii ce au același număr de masă și același număr atomic dar care se află în stări metastabile diferite. Stările metastabile sunt stările în care timpul de viață mediu este de 10^{-9} s.

9. *Nuclizii oglindă* sunt nuclizi în care numărul de neutroni ai unui nucleu este egal cu numărul atomic al celuilalt; de exemplu:



Referitor la rolul neutronilor în stabilitatea nucleară trebuie remarcat că în timp ce ${}^5_3\text{Li}_2$ are un timp de viață de 10^{-21} s nuclizii ${}^6_3\text{Li}_3$ și ${}^7_3\text{Li}_4$ sunt stabili, ${}^8_3\text{Li}_5$ are timpul de viață de 1,24 s iar ${}^9_3\text{Li}_6$ are timpul de viață 0,25 s. În stare liberă neutronii sunt instabili și timpul lor mediu de viață este de 16,9 minute. Ei sunt mai grei ca protonii. Masa neutronilor este $m_n = 1,67252 \times 10^{-27}$ kg = 1,008665u unde u reprezintă unitatea atomică de masă. $u = 1,66043 \times 10^{-27}$ kg și este echivalentă cu o energie egală cu $E = 931,480$ KeV. Masa protonului este $m_p = 1,67252 \times 10^{-27}$ kg = 1,007227u. Protonul și neutronul mai sunt numiți și nucleoni. În stare liberă neutronul este neutru în timp ce protonul are sarcină pozitivă egală în modul cu cea a electronului.

6.1.2 Raza nucleului

Studiile efectuate prin împrăștiere cu electroni, nucleoni, deuteroni și particule α împreună cu considerații de minim a energiei fac ca într-o

Figura 6.1: Variația densității materiei nucleare funcție de distanța măsurată din centrul nucleului

primă aproximație să se considere că nucleul poate fi privit ca având o structură sferică.

Cele mai aprofundate studii ale densității materiei nucleare în nucleu au fost făcute de Hafstaderr și colaboratorii de la Stanford University. Metoda utilizată a fost aceea a împrăstierii de electroni. Aceștia au presupus că densitatea de sarcină este de forma:

$$\rho = \frac{\rho_1}{1 + e^{(r-R)/z_1}} \quad (6.2)$$

unde ρ_1 este densitatea la dimensiuni mici ale razei, R este valoarea razei r la care $\rho = \rho_1/2$ iar z_1 este o măsură a grosimii stratului superficial al nucleului. Se poate presupune că și densitatea materiei nucleare urmează o lege de același tip. Aceasta arată că nucleele nu au o frontieră bine determinată. Astfel structura nucleului este descrisă cu ajutorul distribuției masei și a sarcinii nucleare a căror densitate scade continuu. Din acest motiv vom înțelege prin raza nucleului R distanța din centrul nucleului la punctul în care densitatea scade la jumătate (Fig. 6.1). S-a tras concluzia că pentru nuclee raza acestora este:

$$R = r_0 A^{1/3} \quad (6.3)$$

unde A este numărul de masă al nucleului iar $r_0 = 1,4 \times 10^{-15}$ m. Legătura dintre R și A permite determinarea densității materiei nucleare

$$\rho_0 \simeq \frac{Am_p}{V} = \frac{3Am_p}{4\pi R^3} = \frac{3m_p}{4\pi r_0^3} \simeq 10^{14} \text{ g/cm}^3$$

Densitatea materiei nucleare este constantă până în apropierea suprafeței unde aceasta scade brusc. Acest fapt a permis să se facă o analogie între nucleu și o picătură de lichid, pe baza căreia s-a dezvoltat modelul picăturii.

6.1.3 Masa nucleară și energia de legătură

Nucleul conține în jur de 99,975% din masa unui atom. Tabelul cu masele nucleare poate fi obținut prin scăderea maselor electronilor (luând în considerare și energiile de legătură a electronilor când se dorește obținerea unor precizii foarte mari). Totuși cu excepția unor particule ionizate (He, H) masa atomică este cea utilizată mai degrabă decât cea nucleară. Există însă și situații în care prezența electronilor nu mai poate fi neglijată ca de exemplu când aceștia iau parte direct la procesele nucleare (captură electronică, conversie internă). Masa nucleară se obține cu ajutorul formulei:

$$M_N c^2 = M(A, Z) c^2 - (Z m_e c^2 - B_e) \quad (6.4)$$

unde $M(A, Z)$ este masa atomică, m_e este masa electronului, c este viteza lumini, M_N este masa nucleului iar B_e este energia de legătură a electronilor. Energia de legătură reprezintă energia care ar trebui cedată atomului pentru a desprinde de el toți electronii și ai duce la o distanță la care interacția dintre ei și nucleu să fie neglijabilă.

Mai mult, experimental s-a constatat că masa nucleului este mai mică decât suma maselor componentilor săi. Aceasta se datorează existenței unei energii de legătură a nucleonilor în nucleu. Energia de legătură reprezintă în acest caz energia necesară pentru a rupe nucleul în constituenții săi. Ea este:

$$B = [Z m_p + (A - Z) m_n - M_N] c^2 \quad (6.5)$$

Expresia de mai sus se poate scrie ca:

$$B = [Z(m_p + m_e) + (A - Z)m_n - (M_N + Zm_e)]c^2 \quad (6.6)$$

Ținând cont că masa hidrogenului este $M_H \simeq m_p + m_e$ iar masa atomică $M(A, Z) = M_N + Zm_e$ relația (6.6) devine (neglijând energia de legătură a electronilor):

Figura 6.2: Variația energiei de legătură pe nucleon funcție de numărul de masă

$$B = [ZM_H + (A - Z)m_n - M(A, Z)]c^2 \quad (6.7)$$

O semnificație mai importantă o are energia medie de legătură pe nucleon B/A arătată în Fig. 6.2 deoarece ea este direct legată de stabilitatea speciilor nucleare. Pentru nucleele cu $A > 30$ energia de legătură rămâne aproximativ constantă și anume 8 MeV/nucleon cu un maxim de 8,8 MeV/nucleon în jurul lui $A = 60$ și apoi scade monoton până în jur de 7,5 MeV/nucleon când $A = 240$.

Această comportare furnizează informații despre valoarea energiei ce apare în cazul în care are loc fisiunea nucleelor grele în nuclee mai ușoare. Aceasta conduce la o mărire a energiei de legătură per nucleon. Pentru $A = 240$ prin fisiune creșterea energiei de legătură este de aproximativ $8,5 - 7,5 = 1$ MeV/nucleon și corespunde unei energii eliberate de aproximativ $\Delta E \simeq 200$ MeV.

6.1.4 Momentul cinetic

Protonii și neutronii sunt particule al căror spin este $s = 1/2$. Dacă se consideră că în interiorul nucleului nucleonii se mișcă în jurul centrului de masă pe anumite orbite (modelul particulelor independente) aceștia sunt caracterizați și de momente cinetice orbitale care sunt determinate cu ajutorul unor numere cuantice întregi ca în fizica atomică. Suma momentelor cinetice orbitale și de spin determină momentul cinetic total. Operatorul asociat pătratului momentului cinetic are valorile proprii $J(J+1)\hbar^2$. J numărul cuantic al momentului cinetic total este un număr întreg pentru nucleele cu A par și un număr semiîntreg pentru nucleele cu A impar. Numărul cuantic J ce caracterizează momentul cinetic total este adesea numit spin al nucleului.

Proiecția momentului cinetic pe o axă (de exemplu direcția câmpului magnetic sau direcția în care se deplasează un fascicol de particule) poate lua valorile:

$$-J\hbar, -(J-1)\hbar, \dots, (J-1)\hbar, J\hbar$$

Rezultă că numărul orientărilor în spațiu a momentului cinetic este $2J + 1$. Experimental s-a găsit că nucleele cu Z par și A par (nuclee par-pare) în starea fundamentală au fără excepție $J = 0$.

6.1.5 Paritatea

Paritatea este un concept extrem de important în fizica atomică și nucleară, dar nu are un corespondent în fizica clasică. Aceasta este o proprietate a funcției de stare care descrie sistemul fizic. Astfel, funcția de stare care descrie o singură particulă este pară dacă nu-și schimbă semnul când coordonatele particulei își schimbă semnul

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(-x, -y, -z) \quad (6.8)$$

și impară dacă aceasta își schimbă semnul prin această operație:

$$\Psi(x, y, z) = -\Psi(-x, -y, -z) \quad (6.9)$$

În primul caz spunem că paritatea funcției de stare este $P = 1$, iar în al doilea că paritatea este $P = -1$.

O funcție de stare ce descrie mai multe particule (care nu interacționează între ele) poate fi scrisă ca un produs de funcții de stare individuale sau ca o sumă de astfel de produse. Paritatea întregului sistem este dată în acest caz de produsul parităților funcțiilor de stare individuale.

Rezultă că o stare nucleară este caracterizată în afară de numărul cuantic al momentului cinetic total și de paritatea stării respective, simbolismul fiind J^p (de exemplu $1^-, 2^+, \dots$). În particular starea nucleelor par pare (care au un număr par de protoni și neutroni) este 0^+ . În continuare vom considera că protonul și neutronul au aceiași paritate și anume una pozitivă.

În procesele nucleare alături de conservarea energiei totale, a momentului cinetic și a impulsul se conservă și paritatea. (Totuși există procese în care paritatea nu se mai conservă și anume în procesele în care sunt implicate forțele nucleare slabe).

6.1.6 Momente magnetice nucleare

Unui electron cu sarcina $-e$ și masa m_e care posedă un moment cinetic orbital \vec{L} i se asociază un moment magnetic dat de relația:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} \quad (6.10)$$

În mod similar asociem spinului său \vec{S} un moment magnetic intrinsec:

$$\vec{\mu}_S = -g_S\frac{e}{2m_e}\vec{S} \quad (6.11)$$

unde $g_S = 2$ îl vom denumi factor giromagnetic de spin. Valoarea reală a momentului magnetic este definită de proiecția pe axa Oz , μ_{S_z} când electronul se află într-o stare în care proiecția spinului pe axă este $m_S = 1/2$.

$$\mu_{S_z} = -g\frac{e}{2m_e}S_z \quad (6.12)$$

unde $S_z = m_S\hbar$, cu $m_S = \pm 1/2$. Atunci cu $m_S = 1/2$ se obține pentru momentul magnetic expresia:

$$\mu_S = -\frac{1}{2}g\frac{e\hbar}{2m_e} = -\frac{1}{2}g\mu_B \quad (6.13)$$

unde $\mu_B = 9,274 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$ este magnetonul Bohr.

Toate particulele cu spin cu excepția lui neutrino au un moment magnetic intrinsec pentru care există relații analoage ca cele de mai sus. Astfel, operatorii moment magnetic pentru proton și neutron sunt definiți ca:

$$\vec{\mu}_p = g_p \frac{e}{2m_p} \vec{S}_p \quad (6.14)$$

$$\vec{\mu}_n = g_n \frac{e}{2m_p} \vec{S}_n \quad (6.15)$$

iar valorile lor sunt dependente de masa protonului și de diferenții factori giromagnetici. Relațiile echivalente relației (6.13) pentru valorile momentelor magnetice sunt:

$$\mu_p = \frac{1}{2} g_p \mu_N \quad (6.16)$$

$$\mu_n = \frac{1}{2} g_n \mu_N \quad (6.17)$$

unde prin analogie cu magnetonul Bohr, magnetonul nuclear este definit ca:

$$\mu_n = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5,05078 \times 10^{-27} \text{ JT}^{-1} \quad (6.18)$$

Factorii giromagnetici corespunzători protonului și neutronului sunt:

$$g_p = 5,5856 \quad \text{și} \quad g_n = -3,8262 \quad (6.19)$$

Momentele magnetice ale protonului și neutronului sunt:

$$\mu_p = 2,7928\mu_N \quad \text{și} \quad \mu_n = -1,9131\mu_N \quad (6.20)$$

Datorită dependenței de masă a valorii momentului magnetic rezultă că momentele magnetice nucleare sunt cu trei ordine de mărime mai mici decât momentul magnetic intrinsec al electronului. În plus ele diferă mult de valorile prezise de teorie ($\mu_p = \mu_N$ și $\mu_n = 0$). Aceasta este atribuită faptului că spre deosebire de electron, nucleonii au o dimensiune finită și o structură internă complicată.

Aceste momente magnetice precum și momentele magnetice orbitale ale protonilor din nucleu contribuie la momentul magnetic total al nucleului. Atunci, legătura dintre operatorul moment magnetic total μ_J și operatorul moment cinetic total este:

$$\vec{\mu}_J = g_J \frac{e}{2m_p} \vec{J} \quad (6.21)$$

Momentele magnetice ale celor mai multe stări nucleare fundamentale și excitate au fost măsurate. Tehnicile includ măsurători de structură hiperfină, spectroscopie de microunde, rezonanță magnetică de spin, rezonanță paramagnetică. S-a găsit că momentele magnetice nucleare sunt cuprinse în intervalul $-2\mu_N$, $6\mu_N$.

6.1.7 Momentul electric de cuadripol

În discuțiile anterioare am presupus implicit că nucleul are o formă sferică. Anumite nuclee au într-adevăr o formă sferică dar multe dintre ele nu au o astfel de formă. Cantitativ măsura deviației de la forma sferică este dată de momentul de cuadripol.

Momentul electric de dipol pentru un ansamblu de sarcini este definit ca fiind:

$$p = \int r \rho dv \quad (6.22)$$

unde ρ este densitatea de sarcină, din elementul de volum, iar integrala se efectuează peste întreg volumul sistemului încărcat electric. Pentru nuclee momentul de dipol este nul în stările staționare. Această este o consecință a simetriei nucleelor; cu alte cuvinte aceasta este o consecință a parității stărilor nucleare. O astfel de simetrie nu trebuie să fie neapărat sferică. Nimic nu împiedică să se presupună că nucleul are forma unui elipsoid de rotație (oricum cele mai multe nuclee au o astfel de formă), deviația de la forma sferică fiind caracterizată cu ajutorul momentului electric de cuadripol.

Pentru definirea acestei mărimi se presupune că potențialul electric $V(x, y, z)$ este definit în jurul originii sistemului de coordonate unde se află o sarcină electrică ρ a cărei densitate depinde de poziția $\rho(x, y, z)$ astfel că centrul de sarcină a acesteia să coincidă cu originea sistemului de coordonate. Pentru a calcula energia potențială de interacție de natură electrostatică se dezvoltă potențialul V în serie Taylor în jurul originii:

$$\begin{aligned}
Ep &= \int V(x, y, z) \rho dv = V_0 \int \rho dv \\
&+ \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_0 \int x \rho dv + \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)_0 \int y \rho dv + \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)_0 \int z \rho dv \quad (6.23) \\
&+ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right)_0 \int x^2 \rho dv + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right)_0 \int y^2 \rho dv + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 \int z^2 \rho dv \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} \right)_0 \int xy \rho dv + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x \partial z} \right)_0 \int xz \rho dv + \left(\frac{\partial^2 V}{\partial y \partial z} \right)_0 \int yz \rho dv \right]
\end{aligned}$$

Primul termen reprezintă energia de interacțiune cu câmpul electric a unei sarcini punctiforme. Următorii trei termeni reprezintă energia de interacțiune dipolară cu câmpul electric. Considerând o distribuție de sarcină simetrică rezultă că momentele de dipol electric sunt nule iar această energie este nulă. Ultimii șase termeni reprezintă energia de interacție cuadripolară cu câmpul electric. Cele șase integrale definesc cele șase componente ale momentului de cuadripol. Datorită simetriei componentele cuadripolare în care apar produsele xy , yz , zx se anulează.

Mai mult, nici celelalte trei componente ale momentului de cuadripol nu sunt independente. Dacă se consideră ca axa Oz este axă de simetrie, integrala ce conține pe y^2 dă același rezultat ca integrala ce conține pe x^2 .

Atunci, energia de interacție cuadripolară devine:

$$E_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 \int z^2 \rho dv + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right)_0 \int \frac{x^2 + y^2}{2} \rho dv \quad (6.24)$$

Din ecuația lui Laplace rezultă:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = - \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \quad (6.25)$$

Dar $x^2 + y^2 = r^2 - z^2$. Atunci:

$$E_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 \int z^2 \rho dv - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 \int \frac{r^2 - x^2}{2} \rho dv$$

sau:

Figura 6.3: Legătura dintre forma nucleului și momentul de cuadripol.

$$E_2 = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 \int (3z^2 - r^2) \rho dv = \frac{eQ_0}{4} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right)_0 \quad (6.26)$$

unde Q_0 este momentul de cuadripol.

$$Q_0 = \frac{1}{e} \int (3z^2 - r^2) \rho dv \quad (6.27)$$

Expresia de mai sus este o simplă mediere spațială a expresiei $(3z^2 - r^2)$ relativ la distribuția de sarcină astfel că pentru un nucleu putem scrie:

$$Q_0 = Z (3 \langle z^2 \rangle - \langle r^2 \rangle) \quad (6.28)$$

unde Z este numărul de protoni din acesta. Dimensiunea lui Q se exprimă în m^2 . Din cauza dimensiunilor foarte mici ale nucleelor se utilizează de obicei o altă unitate de măsură și anume barnul ($1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2$).

Deoarece $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$ și cum pentru nucleele sferice $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$ rezultă că $\langle z^2 \rangle = \langle r^2 \rangle / 3$. Astfel pentru o distribuție sferică de sarcină $Q_0 = 0$. Dacă se consideră un nucleu pentru care $\langle z^2 \rangle \neq \langle r^2 \rangle / 3$ atunci există două posibilități (Fig. 6.3):

- a) $\langle z^2 \rangle > \langle r^2 \rangle / 3$ când nucleul este alungit de-a lungul axei Oz și $Q_0 > 0$
- b) $\langle z^2 \rangle < \langle r^2 \rangle / 3$ când nucleul este turtit de-a lungul axei Oz și $Q_0 < 0$.

Figura 6.4: Forma energiei potențiale de interacție internucleonică

Discuția anterioară este similară celei din mecanica clasică, o tratare a problemei în mecanica cuantică implicând de exemplu exprimarea densității de sarcină ρ prin modulul pătrat al funcției de stare nucleare. Pentru un nucleu cu numărul cuantic al momentului cinetic total egal cu $J > 0$ rezultă:

$$Q = \frac{2J - 1}{2(J + 1)} Q_0 \quad (6.29)$$

În cazul $J = 0$, $Q = 0$ deoarece nici o axă de simetrie nu poate fi definită. Deasemenea momentul de cuadripol se anulează când $J = 1/2$. Pentru valori mari ale lui J , $Q \simeq Q_0$. Au fost măsurate multe momente cuadripolare iar valorile lor au fost găsite ca aparținând intervalului 1 – 8 barn. Valori mari ale momentului de cuadripol au pământurile rare.

6.2 Forțe nucleare și energia de interacțiune nucleară

Pentru ca nucleele să fie stabile este necesar ca între nucleoni să existe forțe de interacțiune care să-i țină apropiați unii de alți. Aceste forțe trebuie să fie suficient de puternice pentru a contracara acțiunea forțelor

repulsive de natură electrostatică care există între protoni. Vom considera că aceste forțe derivă dintr-o energie potențială cu simetrie radială:

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla V(\vec{r}) \quad (6.30)$$

Energia medie de legătură pe nucleon (B/A) este aproximativ constantă pentru nucleele stabile și are valoarea de aproximativ 8 MeV. Aceasta arată că energia necesară pentru a îndepărta un nucleon din nucleu este aproximativ independentă de numărul de nucleoni pe care acesta îi conține. Această constanță a raportului B/A implică faptul că energia potențială de interacție dintre nucleoni nu are o rază mare de acțiune și dependența de r trebuie să difere mult față de $1/r$. Concluzia care poate fi trasă este aceea că energia potențială are rază mică de acțiune iar în nucleu nucleonii sunt supuși unor forțe atractive datorate vecinilor nucleonului respectiv (această proprietate poartă numele de proprietatea de saturare a forțelor nucleare). Deoarece distanța dintre doi nucleoni este în jur de $1,8 \times 10^{-15} \text{ m} = 1,8 \text{ fm}$ putem presupune că forțele de interacțiune dintre nucleoni se manifestă pe o distanță de 2 fm.

O altă proprietate a potențialului nuclear V rezultă din faptul că volumul nucleului este proporțional cu numărul de masă A . Această proporționalitate implică faptul că deși energia potențială de interacție determină forțe atractive nu se ajunge la un colaps al nucleului. Acest fapt se datorează existenței unei componente repulsive care are o rază de acțiune mult mai mică decât raza de acțiune a componentei atractive a forțelor nucleare. Această componentă ține la distanță nucleonii unii față de alții. Forma energiei potențiale de interacție este arătată în Fig. 6.5:

6.2.1 Deuteronul

Informații cu privire la energia potențială de interacție dintre nucleoni pot fi obținute dacă se studiază proprietățile unui sistem format din 2 nucleoni (deuteronul) care este format dintr-un proton și un neutron. Deuteronul mai este cunoscut și sub denumirea de hidrogen greu (${}^2\text{H}$). Pentru acesta s-au determinat experimental mai multe mărimi:

Figura 6.5: Forma energiei de interacție internucleonice

Energia de legătură	$B = 2,23 \text{ MeV}$
Momentul cinetic	$J = 1$
Momentul magnetic	$\mu = 0,86\mu_N$
Momentul electric de cuadripol	$\mu = 0,86\mu_N$
Paritatea stării	$P = 1$

Pentru determinarea teoretică a valorilor de mai sus este nevoie să se rezolve ecuația Schrödinger făcând anumite presupuneri asupra energiei potențiale internucleonice. Pentru simplificare vom considera această energie de forma unei gropi de potențial (Fig. 6.6).

Ecuația care trebuie rezolvată este:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] u(r, \theta, \varphi) = Eu(r, \theta, \varphi) \quad (6.31)$$

unde r, θ, φ sunt coordonatele sferice, iar:

$$m = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p} \simeq \frac{m_p}{2} \quad (6.32)$$

este masa redusă a sistemului.

Deoarece energia potențială are o simetrie sferică funcția de stare are forma $u(r, \theta, \varphi) = R_{nl} Y_{lm}(\theta, \varphi)$ unde $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sunt funcțiile sferice.

Figura 6.6: Energia potențială considerată sub forma unei gropi de potențial

6.2.2 Starea fundamentală a deuterionului

Energia stării fundamentale este mică și deuterionul nu are stări excitate. Din acest motiv vom considera pentru funcția de stare cele mai mici valori posibile ale numerelor cuantice: $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$. Astfel starea fundamentală a deuterionului este o stare S ($l = 0$). Deoarece protonul și neutronul au spini egali cu $1/2$, există două posibilități pentru realizarea acestei stări:

- a) Pentru $J = 1$ se realizează starea de triplet 3S_1
- b) Pentru $J = 0$ se realizează starea de singlet 1S_0

Experiența arată că starea care se realizează este aceea de triplet. Această afirmație este confirmată de luarea în considerație a momentului magnetic. În starea S nu există nici o contribuție la momentul magnetic datorită mișcării orbitale a protonului, astfel că momentul magnetic rezultă din momentele magnetice intrinseci ale neutronului și protonului. Cum în această stare $J = 1$ momentele de spin ale neutronului și protonului sunt aliniate în același sens. Rezultă că și momentele magnetice corespunzătoare sunt aliniate în aceeași sens, astfel că momentul magnetic total al deuterionului este:

$$\mu = \mu_n + \mu_p = 0,88\mu_n \quad (6.33)$$

valoare care este apropiată de valoarea determinată experimental.

6.2.3 Energia stării fundamentale a deuteronului

Deoarece $l = 0$, $m = 0$, Y_{00} este o constantă. Rămâne de rezolvat ecuația radială satisfăcută de R_{10} . Efectuăm substituția $R_{10} = v/r$. Din (6.31) rezultă ecuația pentru v :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2v}{dr^2} + V(r)v = E_{10}v \quad (6.34)$$

Pentru starea fundamentală E_{10} este negativă și egală cu energia de legătură cu semn schimbat $-B$. Energia potențială $V(r)$ este:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{pentru } r \leq a \\ 0 & \text{pentru } r > a \end{cases} \quad (6.35)$$

În cazul $r \leq a$ ecuația (6.34) devine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2v}{dr^2} = (V_0 - B)v \quad (6.36)$$

unde ținem cont că V_0 și B sunt mărimi pozitive și $V_0 - B > 0$.

Soluția acestei ecuații este de forma:

$$v_1 = A \sin k_1 r + C \cos k_1 r \quad (6.37)$$

unde:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - B)}{\hbar^2}} \quad (6.38)$$

iar A și C sunt constanțe. Atunci:

$$R_{10}(r) = A \frac{\sin k_1 r}{r} + C \frac{\cos k_1 r}{r} \quad (6.39)$$

Deoarece când $r \rightarrow 0$, $\frac{\sin k_1 r}{r} \rightarrow k_1$, iar $\frac{\cos k_1 r}{r} \rightarrow \infty$ este necesar să considerăm $C = 0$. Astfel, soluția ecuației (6.34) în acest caz este:

$$v_1 = A \sin k_1 r \quad (6.40)$$

În cazul $r > a$ ecuația (6.34) devine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2v}{dr^2} = -Bv \quad (6.41)$$

care are soluția generală:

$$v_2 = De^{-k_2 r} + Fe^{k_2 r} \quad (6.42)$$

unde:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2mB}{\hbar^2}} \quad (6.43)$$

Deoarece $e^{k_2 r} \rightarrow \infty$ când $r \rightarrow \infty$, este necesar să alegem $F = 0$.
Atunci:

$$v_2 = De^{-k_2 r} \quad (6.44)$$

Impunem apoi condițiile ca v și dv/dr să fie continue în $r = a$,

$$v_1(a) = v_2(a) \quad (6.45)$$

$$\left. \frac{dv_1}{dr} \right|_{r=a} = \left. \frac{dv_2}{dr} \right|_{r=a} \quad (6.46)$$

Rezultă:

$$A \sin k_1 a = De^{-k_2 a} \quad (6.47)$$

$$k_1 A \cos k_1 a = -k_2 De^{-k_2 a} \quad (6.48)$$

Din împărțirea celor două relații rezultă:

$$\operatorname{ctg} k_1 a = -\frac{k_2}{k_1} = -\sqrt{\frac{B}{V_0 - B}} \quad (6.49)$$

Această ecuație conține două necunoscute: lărgimea gropii de potențial a și adâncimea ei V_0 . Deoarece B este relativ mic în comparație cu energia medie de legătură dintre nucleoni într-o primă aproximație îl putem neglija în comparație cu V_0 , astfel că ecuația (6.49) se reduce la:

$$\operatorname{ctg} k_1 a = 0 \quad (6.50)$$

unde:

Figura 6.7: Forma funcției $v(r)$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad (6.51)$$

Din ecuația (6.50) rezultă $k_1 a = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \dots$. Deoarece am considerat rezolvarea ecuației în starea fundamentală vom considera doar cazul $k_1 a = \pi/2$. Atunci:

$$V_0 a^2 \simeq \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m_p} \simeq 10^{-28} \text{ MeV m}^2 \quad (6.52)$$

6.2.4 Forma detaliată a energiei potențiale internucleonice

Forma funcției de stare $v(r)$ este reprezentată în Fig. 6.7

Din forma funcției $v(r)$ se deduce că sistemul celor doi nucleoni se află în afara gropii de potențial cam 40% din timp. Dacă presupunem că $a = 2$ fm din relația (6.52) rezultă că $V_0 \simeq 25$ MeV. Dacă se utilizează relația mai exactă (6.49) rezultă $V_0 \simeq 35$ MeV.

O altă observație care poate fi făcută este aceea că energia de interacție este dependentă de spin. Aceasta rezultă din faptul că deuteronul se află în starea de triplet cu $J = 1$ și nu se poate afla în starea de singlet cu $J = 0$. Aceasta înseamnă că energia de interacție dintre cei doi nucleoni este mult mai mică în starea de singlet decât energia de interacție în starea de triplet.

Informații asupra dependenței de spin a forțelor nucleare pot fi obținute în procesele de împrăștiere a neutronilor de energii mici pe protoni. În

acest caz trebuie luate în considerare doar undele S ($l = 0$). Brown și Jackson au obținut în anul 1976 următoarele rezultate:

- a) pentru starea de triplet ($J = 1$), $V_{0t} = 31,3$ MeV, $a_t = 2,21$ fm
- b) pentru starea de singlet ($J = 0$), $V_{0s} = 13,4$ MeV, $a_s = 2,65$ fm

Această diferență între energiile potențiale de triplet și singlet implică existența operatorilor de spin ai celor doi nucleoni în expresia matematică a energiei:

$$V = V_C + V_s = f_C(r) + f_S(r) \vec{s}_1 \vec{s}_2 \quad (6.53)$$

unde f_C reprezintă partea ce corespunde forțelor centrale, iar f_S reprezintă partea dependentă de spin. Operatorul $\vec{s}_1 \vec{s}_2$ are valorile proprii $\hbar^2/4$ în cazul în care $J = 1$ și $-3\hbar^2/4$ în cazul în care $J = 0$, fapt ce determină diferența dintre energia de interacție dintre cei doi nucleoni în starea de triplet și singlet.

Datorită faptului că momentul de cuadripol nu este nul ($Q \neq 0$), deuteronul nu are o simetrie perfect sferică. Forma lui este mai degrabă una elipsoidală. În starea 3S_1 funcția de stare nu posedă o dependență unghiulară și atunci $Q = 0$. Aceasta înseamnă că funcția de stare trebuie să prezinte o anumită dependență unghiulară adică ea trebuie să aibă și o altă componentă. Există trei posibilități pentru componenta respectivă și anume să descrie stările: 3P_1 ($S = 1, L = 1, J = 1$), 1P_1 ($S = 0, L = 1, J = 1$), 3D_1 ($S = 1, L = 2, J = 1$). Primele două stări nu sunt acceptabile din cauză că au paritatea $P = -1$ în timp ce starea 3S_1 are paritatea $P = 1$. Deoarece starea nucleară a deuteronului are paritatea unu, singura stare care poate fi admisă este 3D_1 . Atunci, funcția de stare este o combinație între funcțiile de stare corespunzătoare stărilor 3S_1 și 3D_1 . Ea este o stare mixtă. Funcția de stare a deuteronului are forma:

$$\Psi = (1 - p)^{1/2} \Psi({}^3S_1) + p^{1/2} \Psi({}^3D_1) \quad (6.54)$$

unde p este probabilitatea ca deuteronul să se afle în starea 3D_1 . Din valoarea măsurată a momentului de cuadripol rezultă că $p \sim 5 - 8\%$. Deoarece $Q > 0$ forma deuteronului este elipsoidală (Fig. 6.3). Componenta adițională la energia de interacție care determină o astfel de formă pentru deuteron este cunoscută sub denumirea de componenta tensorială și are forma:

$$V_T = f_T(r) \left[\frac{3(\vec{s}_1 \vec{r})(\vec{s}_2 \vec{r})}{r^2} - \vec{s}_1 \vec{s}_2 \right] \quad (6.55)$$

unde $f_T(r)$ este o funcție ce dă dependența radială a energiei respective.

În afară de acești termeni există și alte contribuții. Un fenomen interesant este acela de schimb. S-a făcut următoarea experiență: Neutroni cu energii de 500 KeV au fost împrăștiați pe protoni. Deoarece energia potențială de interacție este mică în raport cu energia neutronilor ne-am fi așteptat ca numai o mică parte din energie să fie transferată protonului, iar neutronul să-si continue drumul cu cea mai mare parte din energie. De fapt s-a găsit că protonul este împrăștiat înainte cu o energie foarte mare. Acest fenomen se petrece astfel: neutronul preia sarcina protonului transformându-se într-un proton în timp ce protonul original se transformă într-un neutron.

O ultimă observație care trebuie făcută este aceea că forțele internucleare sunt independente de sarcină. Forța de interacție este aceeași între doi neutroni, între doi protoni, și între un neutron și un proton. Stările cu doi protoni și doi neutroni nu se realizează datorită principiului de excluziune Pauli.

În concluzie despre forțele nucleare putem spune că:

- au rază mică de acțiune
- sunt atractive
- au proprietatea de saturație
- nu depind de sarcină

6.3 Modele nucleare

6.3.1 Modelul picăturii de lichid

Modelul este bazat pe ideea că nucleul se comportă asemănător unei picături de lichid. De exemplu în cazul lichidelor forțele intermoleculare sunt forțe cu rază scurtă de acțiune, astfel că energia necesară vaporizării unei mase de lichid dintr-o picătură este independentă de dimensiunea picăturii ceea ce înseamnă că energia de legătură a moleculelor în picătură este independentă de mărimea acesteia. În același mod energia de legătură pe nucleon este independentă de A .

Modelul picăturii de lichid se aplică la nuclee grele pentru a calcula energia de legătură și a studia procesul de fisiune nucleară. El se aplică în general pentru nucleele cu $A > 30$.

Ideea de bază de la care se pornește este aceea că energia de legătură este dată de suma mai multor termeni, forma acestor termeni fiind determinată de considerente de natură fizică. Termenii depind de anumiți parametri care sunt determinați din compararea datelor teoretice cu valorile experimentale. Pentru un nucleu cu numărul atomic Z și numărul de masă A există următorii termeni care contribuie la energia de legătură a nucleului:

1. *Energia de volum.* Aceasta reprezintă contribuția forțelor attractive care acționează asupra fiecărui nucleon din partea nucleonilor vecini. Dacă fiecare nucleon contribuie cu energia a_v la energia de legătură atunci:

$$B_v = a_v A \quad (6.56)$$

2. *Energia de suprafață.* Nucleonii de lângă suprafață interacționează cu mai puțini nucleoni față de cei care sunt în interiorul nucleului. De aceea energia de legătură este micșorată cu o cantitate proporțională cu numărul de nucleoni aflați la suprafață (fenomenul este analog cu existența unei tensiuni superficiale pentru o picătură de lichid). Deoarece numărul de nucleoni aflați la suprafața nucleului este proporțional cu suprafața, el va fi proporțional și cu $A^{2/3}$ deoarece raza nucleului este proporțională cu $A^{1/3}$ conform relației 6.3. Rezultă:

$$B_s = -a_s A^{2/3} \quad (6.57)$$

3. *Energia de interacție coulombiană.* Nucleul are sarcina totală Ze distribuită în mod uniform în interiorul unei sfere de rază R . Energia potențială pentru o astfel de distribuție de sarcină este:

$$E_p = \frac{3}{5} \frac{(Ze)^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (6.58)$$

Deoarece $R \sim A^{1/3}$ contribuția acesteia la energia de legătură este de forma:

$$B_c = -a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} \quad (6.59)$$

4. *Energia de asimetrie.* Nucleele stabile ușoare sunt caracterizate prin faptul că $N \simeq Z$, și $A \simeq 2Z$. Abaterea de la egalitatea $A = 2Z$ duce la micșorarea energiei de legătură. Astfel trebuie introdus un termen negativ care să depindă de diferența $A - 2Z$:

$$B_{as} = -a_{as} \frac{(A - 2Z)^2}{A} \quad (6.60)$$

5. *Energia de împerechere.* Experiența arată că nucleele cele mai stabile sunt nucleele par-pare, nucleele impar-impare sunt cel mai puțin stabile iar cele par-impare au o stabilitate intermediară. Efectul acesta este considerat prin intermediul unui nou termen de forma

$$\delta(A, Z) = \begin{cases} a_0 A^{-3/4}, & \text{pentru nucleele par-pare} \\ 0, & \text{pentru nucleele par-impare} \\ -a_0 A^{-3/4}, & \text{pentru nucleele impar-impare} \end{cases} \quad (6.61)$$

Valoarea pozitivă a lui δ pentru nucleele par-pare indică creșterea energiei de legătură.

Rezultă în final următoarea expresie a energiei de legătură:

$$B = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_{as} \frac{(A - 2Z)^2}{A} + \delta(A, Z) \quad (6.62)$$

Masa nucleului este:

$$M_N = Z m_p + (A - Z) m_n - B \quad (6.63)$$

Comparând masele nucleare calculate cu expresia (6.63) cu cele determinate experimental rezultă următoarele valori pentru parametri ce intră în relația (6.62): $a_v = 15,76$ MeV, $a_s = 17,81$ MeV, $a_c = 0,71$ MeV, $a_{as} = 23,70$ MeV, $a_0 = 34$ MeV.

Cu ajutorul modelului picăturii se poate găsi relația dintre A și Z pentru toate nucleele stabile. Pentru aceasta se derivează relația (6.62) la Z , se egalează cu zero și se obține:

$$Z = \frac{A}{1,97 + 0,015 A^{2/3}} \quad (6.64)$$

Formula permite calculul lui Z pentru izobarul β stabil pentru un număr de masă A dat. Trebuie remarcat că deși (6.62) permite calculul

energiilor de legătură, a maselor nucleare, modelul nu poate fi utilizat pentru a explora în detaliu proprietățile nucleare ca spinul, paritatea, momentul magnetic și nivelele de energie.

6.3.2 Modelul păturilor nucleare

Modelul care a permis înțelegerea structurii nucleare este modelul păturilor nucleare care ia în considerație comportarea individuală a nucleonilor în nucleu. Se poate considera următoarea comportare a unui neutron în interiorul nucleului. Asupra unui neutron care se mișcă în interiorul nucleului forța medie care acționează asupra lui este aproximativ zero atâta timp cât este departe de marginile nucleului, deoarece el este încojurat din toate părțile de alți nucleoni care-și compensează reciproc acțiunile. Atunci când nucleonul se apropie de suprafață asupra lui vor începe să acționeze forțe de atracție fapt ce duce la o modificare în energia sa potențială. Aceasta crește de la o valoare negativă aproximativ constantă (când nucleonul este în interiorul nucleului) la zero atunci când neutronul ajunge departe de nucleu și este în afara razei de acțiune a forțelor internucleonice. Se pot aplica aceleași argumente la studiul mișcării unui proton, cu excepția faptului că atunci când acesta se îndepărtează de nucleu există forțe de repulsie electrostatică care dau o contribuție pozitivă la energia potențială de interacție. Această energie este reprezentată în Fig. 6.8.

Considerând o particulă într-o astfel de groapă de potențial prin rezolvarea ecuației Schrödinger rezultă o serie de nivele de energie. Este de așteptat ca nucleele în care nivelele energetice sunt complete să prezinte o stabilitate deosebită.

Numerele magice

A fost observat experimental că nucleele ce au următoarele valori pentru Z sau N , cunoscute sub denumirea de numere magice au o mare stabilitate. Numerele magice sunt:

$$2, 8, 20, 28, 50, 82, 126$$

Anumite caracteristici ale acestor nuclee sunt prezentate mai jos:

Figura 6.8: Energia potențială medie pe care o are un neutron și un proton în interiorul nucleului

1. Comparând masele nucleare reale cu cele date de formula (6.63) se găsește că acestea sunt semnificativ mai mici când Z și N sunt numere magice.

2. Nucleele care au pentru Z și N ca valori numerele magice posedă mai mulți izotopi stabili și mai mulți izotoni stabili decât nucleele vecine. De exemplu pentru $Z = 50$ există 10 izotopi stabili în comparație cu cei 4 izotopi stabili pentru celelalte nuclee. Pentru $N = 20$ există 5 izotoni stabili în timp ce pentru $N = 19$ nu există nici un izoton stabil iar pentru $N = 21$ există un singur izoton stabil.

3. Nucleele dublu magice sunt deosebit de stabile. Ca exemplu putem da nucleul de ${}^4\text{He}$ ($Z = 2, N = 2$), de ${}^{16}\text{O}$ ($Z = 8, N = 8$) și nucleul de ${}^{206}\text{Pb}$ ($Z = 82, N = 126$) care este cel mai greu nucleu stabil.

4. Heliul precum și nucleele având $N = 50, 82, 126$ prezintă o mare abundență în univers.

5. Primele stări excitate ale nucleelor cu un număr magic de protoni sau neutroni au energii mult mai mari decât în cazul nucleelor vecine.

6. Momentul de cuadripol este dependent de Z , fiind zero când Z este un număr magic (în acest caz forma nucleului este sferică).

Pentru a obține anumite rezultate cantitative trebuie să fie făcute presupuneri asupra adâncimii și lărgimii gropii de potențial. Din studii

de împrăștiere cu neutroni cu joasă energie rezultă: $V_0 \simeq 50 \text{ MeV}$.

Pentru determinarea nivelelor nucleare de energie trebuie rezolvată ecuația Schrödinger pentru un nucleon care se mișcă într-un astfel de potențial. Funcțiile proprii depind de numerele cuantice n, l, m_l în timp ce valorile proprii care corespund energiei depind de numerele cuantice n și l . Ordinea nivelelor este arătată în Fig. 6.9 și este diferită față de ordinea acestora în câmp coulombian.

Principiul lui Pauli permite ca pe un nivel cu numărul cuantic l să existe $2(2l + 1)$ nucleoni. Rezultă că atunci când se ocupă nivelul $1s$ există 2 nucleoni, când se ocupă și nivelul $1p$ numărul de nucleoni ajunge la 8, când se ocupă nivelul $1d$ se ajunge la 20 de nucleoni, restul numerelor magice nemaifiind posibil de obținut, după ocuparea nivelului $1f$ numărul de nucleoni ajungând la 34. Astfel, în anul 1948 Mayer și Jensen au sugerat că la energia potențială $V(r)$ trebuie adăugată și o energie potențială datorită interacției spin-orbită:

$$V_{so}(r) = f(r) \vec{L} \vec{s} \quad (6.65)$$

unde \vec{L} este momentul orbital al nucleonului, iar \vec{s} este spinul nucleonului:

$$f(r) \sim \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \quad (6.66)$$

Efectul acestei interacții constă în despicarea nivelelor energetice E_{nl} în două subnivele caracterizate de numerele cuantice corespunzătoare momentului cinetic total $j = l \pm 1/2$. Ca și în cazul despicerii nivelelor atomice ΔE este proporțional cu $2l + 1$ și este aproximativ:

$$\Delta E = E_{j=l+1/2} - E_{j=l-1/2} = 10(2l + 1) A^{-2/3} \text{ MeV} \quad (6.67)$$

Revenind la diagrama din Fig. 6.9 se observă că apar noi nivele pe fiecare din aceste nivele existând $2j + 1$ nucleoni. Despiceria nivelelor crește cu creșterea lui l [$l = 3$ (f), 4 (g), 5 (h)].

Momentul cinetic și paritatea

Modelul în pături nucleare permite să se facă predicții asupra spinilor și parităților stărilor fundamentale ale anumitor nuclee și anume acelea

Figura 6.9: Nivele de energie într-o groapă de potențial. În partea stângă sunt prezentate nivelele fără a lua în considerație interacția spin orbită, iar în dreapta sunt prezentate nivelele energetice când se ia în considerare interacția spin-orbită

care au păturile și subpăturile complete precum și acele nuclee care au un nucleon în plus sau în minus față de o pătură completă. Trebuie remarcat că pe un nivel caracterizat de numărul cuantic j pot exista $2j + 1$ nucleoni a căror componentă pe axa Oz a momentului cinetic este caracterizată de numerele cuantice $m = -j, -j + 1, \dots, j$. Valoarea totală a componentei după axa Oz a momentului cinetic al nucleonilor de pe pătura respectivă este zero ($\sum m = 0$). Aceasta implică faptul că și momentul cinetic total este nul. Astfel, nucleele la care toate subpăturile sunt ocupate complet au momentul cinetic total nul $J = 0$. Deoarece $j = l \pm 1/2$ este semiîntreg $2j + 1$ este un număr par, astfel că nucleele de acest tip sunt nuclee par-pare. Predicția pentru J este în concordanță cu observațiile experimentale.

Deoarece paritățile tuturor nucleonilor într-o subpătură sunt aceleași și $P = (-1)^l$ rezultă că paritatea totală a nucleonilor de pe o pătură completă, care este produsul parităților componentelor, este $P = 1$. Atunci paritatea totală a nucleului având păturile complete este tot $P = 1$. Pentru astfel de nuclee $J^P = 0^+$. Cele mai multe nuclee din această categorie sunt nucleele dublu magice (${}^4_2\text{He}$, ${}^{16}_8\text{O}$, ${}^{208}_{82}\text{Pb}$) dar sunt și altele ca ${}^{12}_6\text{C}$ (subpăturile $1s_{1/2}$ și $1p_{1/2}$ sunt complete).

Să considerăm cazul nucleelor cu un nucleon în plus față de situația în care $J = 0^+$. Atunci, momentul cinetic total și paritatea sunt determinate de nucleonul în plus. De exemplu ${}^{17}_8\text{O}$ are un neutron în plus în starea $1d_{5/2}$ pentru care $j = 5/2$, $l = 2$ și $P = (-1)^l = 1$. Atunci starea în care se află nucleul este $J^P = \frac{5}{2}^+$ în concordanță cu datele experimentale. În cazul ${}^{41}_{20}\text{Ca}$ nucleonul impar este în starea $1f_{7/2}$ iar starea nucleului este $J^P = \frac{7}{2}^-$, din nou în concordanță cu datele experimentale.

Rezultate similare se obțin în cazul în care unei pături îi lipsește un nucleon. O pătură cu un nucleon în minus are același moment cinetic cu cel al nucleonului lipsă deoarece momentul cinetic total combinat cu momentul cinetic al nucleonului lipsă trebuie să fie egal cu zero. Astfel, nucleul ${}^{15}_7\text{N}$ care are un gol în subpătura $1p_{1/2}$ se află în starea $J^P = \frac{1}{2}^-$. Nucleul ${}^{207}_{82}\text{Pb}$ are un gol în subpătura $3p_{1/2}$ astfel că $J^P = \frac{1}{2}^-$. Ambele predicții sunt în concordanță cu experiența.

Pentru alte tipuri de nuclee trebuie făcute alte considerații. Modelul păturilor nucleare este un model aproximativ în sensul că interacția dintre nucleoni este aproximată cu o energie potențială $V(r)$ precum și cu o energie potențială legată de interacția spin-orbită pentru o singură par-

ticulă. Astfel, trebuie să existe o interacție reziduală care reprezintă diferența dintre interacția efectivă și cea aproximativă pe care am considerat-o până acum.

Energia potențială internucleonică determină o forță atractivă între perechile de nucleoni. Aceasta înseamnă că starea cu energia cea mai joasă este una în care fiecare pereche de nucleoni se află la o distanță cât mai mică pentru ca forțele de atracție să fie cât mai mari. Dar, conform principiului lui Pauli doi nucleoni nu pot fi în aceeași stare cu același set de numere cuantice. Astfel, cea mai joasă energie pentru 2 nucleoni aflați pe subpătura j trebuie să aibă numerele cuantice corespunzătoare proiecției momentului cinetic pe axa Oz m și $-m$. Aceasta înseamnă că momentul cinetic al unui nucleon dintr-o pereche este de sens opus celui alt nucleon din pereche. Momentul total al unei perechi este zero.

Acceptând existența efectului de împerechere rezultă că toate nuclele par-pare sunt în starea $J^P = 0^+$, cum a fost găsit experimental, deoarece nucleonii se împerechează doi câte doi având un moment cinetic total nul. Mai mult, orice nucleu par-impair provine dintr-un nucleu par-par la care s-a adăugat un nucleon. Rezultă că momentul cinetic total și paritatea sunt egale cu valorile acestor mărimi pentru nucleonului adițional. Există excepții de la aceste reguli. Astfel, pentru $^{106}_{47}\text{Ag}$ este așteptat ca să existe 7 protoni pe nivelul energetic $1g_{1/2}$ astfel că starea nucleului trebuie să fie $\frac{9}{2}^+$. Experimental se găsește că starea nucleului este $\frac{1}{2}^-$. Aceasta rezultă din faptul că dacă se face un calcul mai exact, din punct de vedere energetic este mai favorabilă configurația ca să existe 8 protoni pe nivelul $1g_{1/2}$ și un singur proton pe nivelul $2p_{1/2}$. Protonul impar se află astfel pe nivelul $2p_{1/2}$ și el este nucleonul care determină momentul nucleului și paritatea nucleului. În cazul nucleelor impar-impair modelul nu dă rezultate satisfăcătoare.

Momente magnetice și momentul de cuadripol

În cazul unui nucleu cu momentul cinetic total \vec{J} , momentul magnetic este:

$$\vec{\mu}_j = g_j \frac{e}{2m_p} \vec{J} \quad (6.68)$$

Aceasta înseamnă că pentru nuclele par-pare care au $J = 0$ în starea fundamentală nu există momente magnetice.

În schimb pentru nucleele par-impare care au un moment cinetic caracterizat de un număr cuantic J semiîntreg ne așteptăm ca acestea să aibă momente magnetice. În acest model momentul magnetic al nucleului este dat de ultimul nucleon a cărui stare este caracterizată de numerele cuantice l , și j . Există două contribuții la momentul magnetic: una datorată spinului nucleonului, iar alta datorată mișcării orbitale. Pentru un singur nucleon operatorul moment magnetic poate fi scris ca:

$$\vec{\mu}_j = \frac{e}{2m_p} \left(g_L \vec{L} + g_s \vec{s} \right) \quad (6.69)$$

unde g_L și g_s sunt factorii giromagnetici. g_L are valoarea 1 pentru proton și 0 pentru neutron (acesta nu are sarcină electrică), $g_s = 5,5856$ pentru proton și $g_n = -3,8262$ pentru neutron. Din relațiile (6.68) și (6.69) se obține:

$$g_j \vec{J} = g_L \vec{L} + g_s \vec{s} \quad (6.70)$$

Multiplicând cu \vec{J} relația (6.70) se obține:

$$g_j \vec{J}^2 = g_L \vec{L} \vec{J} + g_s \vec{s} \vec{J} \quad (6.71)$$

Cum

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{s}$$

rezultă $\vec{s} = \vec{J} - \vec{L}$ și $\vec{L} = \vec{J} - \vec{s}$. De aici rezultă:

$$\vec{L} \vec{J} = \frac{\vec{J}^2 + \vec{L}^2 - \vec{s}^2}{2} \quad (6.72)$$

$$\vec{s} \vec{J} = \frac{\vec{J}^2 + \vec{s}^2 - \vec{L}^2}{2} \quad (6.73)$$

Atunci relația (6.71) devine:

$$g_j \vec{J}^2 = \frac{1}{2} \left[g_L \left(\vec{J}^2 + \vec{L}^2 - \vec{s}^2 \right) + g_s \left(\vec{J}^2 + \vec{s}^2 - \vec{L}^2 \right) \right] \quad (6.74)$$

Ecuția de mai sus este o ecuație pentru operatori. Înlocuind apoi pătratul fiecărui operator unghiular prin valorile proprii corespunzătoare se obține:

$$\mu_J = g_J \vec{J} = \frac{1}{2} J \left[g_L + g_s + (g_L - g_s) \frac{l(l+1) - 3/4}{J(J+1)} \right] \quad (6.75)$$

Dacă se utilizează această ecuație și valorile factorilor giromagnetici g , momentele magnetice ale protonului sau neutronului impar μ_J se determină ușor în două cazuri și anume când $J = l \pm 1/2$. Rezultatele obținute cu ajutorul modelului nu duc la predicții în conformitate cu datele experimentale. Pentru a realiza o concordanța bună trebuie utilizate modele mai sofisticate.

Se observă că numai nucleele cu $J > 1/2$ au valori diferite de zero pentru momentul de cuadripol Q . Ne vom referi doar la nucleele par-impare cu un proton impar. În acest ultim caz utilizând modelul păturilor nucleare Q va fi determinat doar de nucleonul impar și:

$$Q = (3 \langle z^2 \rangle - \langle r^2 \rangle) \quad (6.76)$$

unde Z a fost luat egal cu 1 (un singur proton) iar media va fi făcută peste orbita protonului. Mediile variază de la 10^{-30} m^2 pentru nucleele ușoare la $6 \times 10^{-27} \text{ m}^2$ pentru nucleele grele. În cazul nucleelor cu un neutron impar $Q = 0$ deoarece neutronul nu are sarcină. Din punct de vedere experimental situația este diferită. Prima dată trebuie remarcat că nu există o mare diferență între valorile lui Q pentru nucleele care au un proton impar și nucleele care au un neutron impar. În al doilea rând valorile găsite pentru Q pentru anumite nuclee sunt de 10 ori mai mari decât cele calculate. Astfel de nepotriviri pot fi explicate de o mișcare colectivă a nucleonilor în nuclee.

Stări excitate

În cazul nucleelor cu A impar, adică a nucleelor par-impare stările excitate rezultă din excitarea nucleonului neîmperecheat pe stările energetice superioare. De exemplu ^{17}O are un neutron pe nivelul $1d_{5/2}$ iar imediat deasupra acestui nivel se află nivelele $2s_{1/2}$ și $1d_{3/2}$. Referindu-ne la diagrama nivelelor energetice din Fig. 6.9 într-adevăr prima stare excitată este o stare $\frac{1}{2}^+$ și poate fi interpretată ca apărând din trecerea neutronului pe nivelul energetic $2s_{1/2}$ iar starea $\frac{3}{2}^+$ poate fi interpretată ca apărând din trecerea neutronului pe nivelul energetic $1d_{3/2}$.

În cazul nucleelelor par-pare obținerea unei stări excitate se face prin ruperea unei perechi de nucleoni fapt ce complică mult lucrurile.

Modelul simplu al păturilor nucleare este în măsură să explice numerele magice, momentele cinetice ale nucleelelor, ordinul de mărime al momentelor magnetice, existența stărilor excitate pentru nucleele care au un nucleon în plus sau în minus față de o pătură completă.

O ipoteză a acestui model este că nucleonii se mișcă fără ca ei să interacționeze între ei. Acest fapt pare a nu fi în concordanță cu realitatea datorită faptului că între nucleoni există forțe de interacție.

6.4 Reacții nucleare

O reacție nucleară este inițiată prin bombardarea unor nuclee țintă cu un fascicol de nucleoni sau nuclee. La începutul dezvoltării fizicii nucleare erau folosite particulele α care proveneau din dezintegrări radioactive. În zilele noastre particulele sunt accelerate în acceleratoare de particule. Există două obiective majore în experiențele în care se studiază reacțiile nucleare:

1. Datele experimentale obținute pot fi comparate cu predicțiile ce se fac asupra reacțiilor respective, în acest mod verificându-se modelele propuse pentru structura nucleului și a reacțiilor însăși.
2. Reacțiile nucleare sunt utilizate în spectroscopia nucleară pentru a se obține informații asupra nivelelor nucleare.

6.4.1 Energetica reacțiilor nucleare

O reacție nucleară este în general scrisă astfel:



unde A este nucleul țintă, a este particula proiectil care ajunge pe nucleul țintă, B este nucleul care se formează după reacția lor iar b este particula care rezultă în urma acestei reacții. O reacție poate fi scrisă simplificat astfel: $A(a, b)B$. Ca exemplu putem da reacția:



Reacția nucleară poate fi mai complicată în sensul că pot exista mai mulți produși de reacție. În continuare ne vom limita la situația în care există doar doi produși de reacție.

Reacțiile nucleare sunt guvernate de legile de conservare obișnuite: a impulsului, a energiei, a sarcinii și a numărului total de nucleoni.

Din punct de vedere energetic importantă este energia de reacție Q care reprezintă diferența dintre energia de repaus a particulelor în starea inițială și energia de repaus în starea finală:

$$Q = [(m_a + M_A) - (m_b + M_B)] c^2 \quad (6.79)$$

O altă expresie a lui Q se poate obține utilizând legea conservării energiei. Considerăm că energia cinetică a particulei a în sistemul laboratorului este T_a iar nucleul țintă se află în repaus. Atunci:

$$m_a c^2 + M_A c^2 + T_a = M_B c^2 + T_B + m_b c^2 + T_b \quad (6.80)$$

unde T_B și T_b sunt energiile cinetice ale produșilor de reacție. Rezultă:

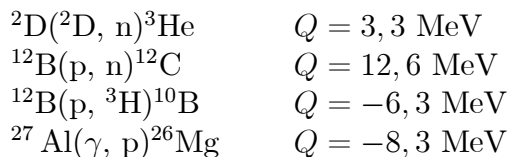
$$Q = T_B + T_b - T_a \quad (6.81)$$

Există două situații:

a) $Q > 0$, când reacția este însoțită de eliberare de energie. În acest caz spunem că reacția este exoenergetică.

b) $Q < 0$, când reacția este însoțită de creșterea energiei de repaus pe seama energiei cinetice. Spunem că reacția este endoenergetică.

Q se măsoară în general în MeV și ea poate fi determinată utilizând ecuația (6.79). Astfel, pentru reacția (6.78) avem $M({}_2^4\text{He}) = 4,002604u$, $M({}_4^9\text{Be}) = 9,01219u$, $M({}_6^{12}\text{C}) = 12,00000u$, $M({}_0^1\text{n}) = 1,00867u$. Astfel se obține $Q = 6,12 \times 10^{-3}uc^2$ unde $c = 3 \times 10^8$ m/s este viteza luminii în vid. Dar cum $uc^2 = 931,19$ MeV rezultă energia de reacție $Q = 5,7$ MeV. Câteva valori ale lui Q pentru diverse reacții sunt prezentate mai jos:



6.4.2 Sistemul centrului de masă

Dacă $Q < 0$, legea conservării energiei cere ca în sistemul laboratorului energia cinetică a proiectilului să fie mai mare decât $|Q|$ deoarece conservarea impulsului interzice ca produșii de reacție în starea finală să fie în repaus. Pentru a studia acest fapt vom discuta reacția în sistemul centrului de masă. Conform legii conservării impulsului avem:

$$m_a v_a + M_A v_A = 0 \quad (6.82)$$

de unde

$$v_A = -\frac{m_a}{M_A} v_a \quad (6.83)$$

În sistemul centrului de masă energia totală este:

$$T = \frac{1}{2} m_a v_a^2 + \frac{1}{2} M_A v_A^2 = \frac{1}{2} m_a v_a^2 \left(1 + \frac{m_a}{M_A} \right) \quad (6.84)$$

În sistemul laboratorului nucleul țintă este în repaus și doar particula a se mișcă. Atunci energia cinetică este:

$$T' = \frac{1}{2} m_a v_a'^2 \quad (6.85)$$

unde v_a' este viteza relativă a particulei a față de nucleul A .

$$v_a' = v_a - v_A = v_a \left(1 + \frac{m_a}{M_A} \right) \quad (6.86)$$

Înlocuind în (6.85) relația (6.86) rezultă:

$$T' = T \left(1 + \frac{m_a}{M_A} \right) \quad (6.87)$$

Ținând cont de condiția ca să se producă o reacție endoenergetică în sistemul centrului de masă $T > |Q|$. Atunci:

$$T' > |Q| \left(1 + \frac{m_a}{M_A} \right) \quad (6.88)$$

Cantitatea $|Q| \left(1 + \frac{m_a}{M_A} \right)$ reprezintă energia de prag pentru care are loc reacția nucleară.

Figura 6.10: a) Interacția dintre un fascicol de particule cu o țintă constând din sfere rigide. b) Particule punctiforme care se ciocnesc de sfere de raze R . c) Particule de raze r care se ciocnesc de sfere de raze R .

6.4.3 Reacțiile nucleare și secțiunile eficace

Să considerăm un fascicol ce cade pe o țintă constând din obiecte sferice de rază R (Fig. 6.10). Fiecare sferă are aria secțiunii $\sigma = \pi R^2$, iar fiecare particulă ajungând în interiorul acestei arii lovește sfera respectivă. Dacă particulele incidente sunt și ele sfere de rază r aria de interacție va crește la valoarea $\pi(r + R)^2$. Probabilitatea de ciocnire crește cu creșterea ariei de interacție σ .

Întorcându-ne la reacțiile nucleare, trebuie remarcat că nucleele nu sunt sfere bine definite, deoarece densitatea lor variază cu raza. În plus, datorită razei finite de acțiune a forțelor nucleare, nu este nevoie ca să existe un contact direct între particulele care interacționează. Astfel, vom considera ca măsură pentru probabilitatea de reacție o secțiune pe care o vom nota tot cu σ și pe care o vom denumi secțiune eficace. σ poate fi privită ca o secțiune totală de interacție (σ_T) care este legată de probabilitatea ca să se petreacă ceva când particulele incidente și ținta interacționează, sau poate fi privită ca o secțiune eficace parțială de interacție când ea este legată de probabilitatea ca o anumită reacție să aibă loc. Evident:

$$\sigma_T = \sum \sigma_i \quad (6.89)$$

Deși σ nu reprezintă secțiunea nucleului care nu poate fi precis definită ne așteptăm ca aceasta să fie de același ordin de mărime cu secțiunea sferică a nucleului. Deoarece raza nucleară este cuprinsă în intervalul 2

și 7 fm atunci πR^2 va fi cuprinsă în intervalul $5 \times 10^{-29} \text{ m}^2$ - $1,5 \times 10^{-27} \text{ m}^2$. Uzual secțiunile eficace se exprimă în fizica nucleară în barni (1 barn = 1b = 10^{-28} m^2)

Vom demonstra în continuare că atenuarea unui fascicol de particule ce trece printr-o țintă este legată de σ . Fie o țintă de arie A , grosime dz care conține n nuclee pe unitatea de volum, astfel încât în fiecare secundă pe aria A să ajungă N particule. Dacă secțiunea eficace a fiecărui nucleu este σ avem:

$$\text{-numărul total de nuclee din țintă} = nAdz$$

$$\text{-secțiunea eficace corespunzătoare tuturor nucleelor} = n\sigma Adz$$

Atunci, numărul de particule din fascicolul incident care interacționează cu nucleele țintă în unitatea de timp = (numărul de particule ce ajung pe unitatea de arie) \times (secțiunea eficace corespunzătoare tuturor nucleelor):

$$\frac{N}{A} n\sigma Adz = N\sigma ndz$$

Acesta este numărul de particule care este îndepărtat din fascicolul incident. Notând cu dN variația numărului de particule din fascicolul incident prin reacția nucleară ($dN < 0$) atunci:

$$dN = -N\sigma ndz \quad (6.90)$$

Pentru o țintă de dimensiuni finite vom obține atenuarea totală prin integrarea pe distanța z :

$$\int_{N_0}^N \frac{dN}{N} = - \int_0^z n\sigma dz \quad (6.91)$$

unde N_0 este o măsură a intensității fascicolului incident iar N este o măsură a intensității fascicolului transmis. Rezultă:

$$N = N_0 \exp(-n\sigma z) = N_0 \exp(-\mu z) \quad (6.92)$$

unde $\mu = n\sigma$ este cunoscut sub denumirea de coeficient de atenuare. Inversul $1/n\sigma$ are dimensiunea unei lungimi și reprezintă distanța pe care fascicolul este atenuat cu un factor $1/e$.

În final vom introduce conceptul de secțiune eficace diferențială. Situația este ilustrată în Fig. 6.11 unde produsul de reacție este arătat ca împrăștiindu-se sub unghiurile polare θ și φ în interiorul unghiului solid $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$

Figura 6.11: Particule incidente pe o țintă

Pentru o anumită reacție nucleară, σ este legat de probabilitatea ca reacția să aibă loc iar produșii de reacție să se deplaseze în toate direcțiile posibile.

Mărimea $d\sigma/d\Omega$ este legată de probabilitatea ca produșii de reacție să se găsească într-un unghi solid $d\Omega$ în jurul direcției caracterizate de unghiurile θ și φ . $d\sigma/d\Omega$ este funcție de unghiurile θ și φ și se numește secțiune diferențială. Dacă particulele din fascicolul incident și nucleele țintei au spinii orientați haotic atunci $d\sigma/d\Omega$ va fi independent de φ .

Dacă se integrează secțiunea diferențială pe unghiul solid 4π se obține secțiunea eficace σ :

$$\sigma = \int_0^{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (6.93)$$

Dacă $d\sigma/d\Omega$ este independent de unghiul φ se obține:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (6.94)$$

6.4.4 Tipuri de reacții nucleare

Fie o particulă încărcată care se apropie de un nucleu. Prima interacție va fi cea electrostatică iar dacă particula are o energie mică ea va fi împrăștiată pe un potențial de tip coulombian. Ea va suferi o împrăștiere elastică fără ca ea să atingă nucleul. Modul în care are loc împrăștierea

depinde de forma și mărimea nucleului și de potențialul asociat acestuia. Un astfel de proces va fi simbolizat astfel:



Dacă energia particulei este suficient de mare este posibil ca particula încărcată să traverseze bariera de potențial și să ajungă în regiunea în care se fac simțite forțele nucleare iar particula atinge practic nucleul. Există mai multe posibilități. Un nucleon poate fi excitat pe un nivel energetic superior în timp ce particula incidentă părăsește nucleul cu o energie mai mică. Un astfel de proces poartă numele de ciocnire inelastică și în urma lui nucleul rămâne într-o stare excitată. O altă posibilitate este ca particula incidentă să excite un mod colectiv de vibrație sau rotație. Un astfel de proces este simbolizat prin:



unde A^* are semnificația unei stări excitate a nucleului A .

Dacă energia particulei incidente este și mai mare atunci în urma interacției nucleul poate suferi o transformare. Există două posibilități dependente de energia pe care o are particula incidentă și de câtă energie este pierdută de particula incidentă. Astfel, dacă particula a are suficientă energie ea poate să părăsească nucleul determinând apariția unui nucleon. Acest proces se scrie ca:



unde B este nucleul rezidual iar b este nucleonul scos afară din nucleu după ciocnire. Dacă particula incidentă pierde foarte multă energie în cursul reacției ea nu va mai avea suficientă energie să părăsească nucleul și va rămâne în interiorul nucleului:



Aceste tipuri de reacții poartă numele de reacții directe deoarece interacțiunea are loc mai degrabă doar cu un singur nucleon decât cu nucleul ca un întreg. Alte variante ale acestui tip de reacții sunt cele de stripping și pick-up. În primul tip de reacție particula incidentă (de obicei deuteronul) pierde unul din nucleoni care rămâne în interiorul țintei în timp ce celălalt iese din aceasta. În al doilea tip de reacție particula

Figura 6.12: a) Exemple de reacții directe b) Reacție stripping c) Reacție pick-up

incidentă lovește un nucleon din țintă căruia îi transmite suficientă energie pentru a ieși din aceasta. Aceste posibilități sunt arătate în Fig. 6.12.

O altă posibilitate este aceea în care particula incidentă cade pe un nucleu din care nu are suficientă energie să iasă. În interiorul nucleului particula va suferi diverse ciocniri până ce energia va fi concentrată pe una sau mai multe particule care pot părăsi nucleul. Este posibil și ca nucleul să piardă excesul de energie prin emisie de radiație electromagnetică (emisie gama). Starea nucleului după ce acesta a captat particula incidentă poartă numele de nucleu compus.

În cazul unei reacții directe pentru o particulă cu energia de câțiva MeV reacția are loc într-un interval de timp egal ca ordin de mărime cu timpul în care aceasta traversează nucleul ($\approx R/c \simeq 10^{-22}$ s). În cazul reacțiilor cu formare de nucleu compus intervalul de timp este mult mai mare ($10^{-14} - 10^{-20}$ s). Un proces în care apare un nucleu compus poate fi considerat în următoarele etape: a) formarea nucleului compus b) dezintegrarea nucleului compus:

$$A + a \rightarrow C^* = B + b \quad (6.99)$$

În final vom aminti despre modelul optic care a fost dezvoltat de Feshbach, Porter and Weisskopf în anul 1954 și care este util în înțelegerea reacțiilor nucleare. El se bazează pe ideea că potențialului tip groapă de potențial (din modelul cu pături) i se adaugă o componentă imaginară:

$$V + iW \quad (6.100)$$

Ultimul termen este introdus pentru a lua în considerație că particula incidentă poate fi absorbită în reacție. Numele vine din analogia cu optica unde termenul complex adăugat indicelui de refracție este introdus pentru a lua în considerație absorbția. Astfel, particula care interacționează cu nucleul poate fi sau nu absorbită.

6.4.5 Împrăștiere și absorbție

Vom considera interacția unei particule cu câmpul electrostatic al nucleului și cu potențialul optic (care ia în considerație posibilitatea ca particula să fie absorbită). Ne vom concentra numai asupra a ceea ce se întâmplă cu particula incidentă și nu vom considera nici un detaliu referitor la posibilele reacții nucleare.

Împrăștierea columbiană

Fie o particulă încărcată cu sarcina ze care se apropie de un nucleu cu sarcina Ze . Energia de interacție dintre cele două particule este:

$$V_C = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.101)$$

unde r este distanța măsurată din centrul nucleului. Atunci când particula ajunge în raza de acțiune a forțelor nucleare energia potențială de interacție se modifică în mod radical ca în Fig. 6.13 unde am prezentat simbolic energia potențialului optic.

Aici efectul de interacție al particulei cu nucleul prin intermediul forțelor nucleare este reprezentat de potențialul optic $V + iW$. Bariera de potențial poate fi depășită dacă particula incidentă are energia

Figura 6.13: Energia potențială a unei particule în vecinătatea nucleului

$$V_B = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (6.102)$$

unde R este raza nucleară. Valori tipice pentru V_B în cazul unui proton incident când $z = 1$ sunt:

Carbon	($Z = 50$)	$V_B \simeq 3$ MeV
Argint	($Z = 47$)	$V_B \simeq 12$ MeV
Plumb	($Z = 82$)	$V_B \simeq 17$ MeV

Deși în mecanica clasică, o particulă incidentă nu poate trece peste o barieră de potențial decât dacă energia ei este mai mare ca V_B , conform mecanicii cuantice chiar dacă energia acesteia este mai mică decât înălțimea barierei de potențial ea poate penetra bariera (efectul tunel). Dacă însă energia particulei este mult mai mică decât înălțimea barierei efectul este neglijabil, iar particula va suferi o împrăștiere. Pentru a determina distanța minimă la care particula ajunge se pune condiția ca energia cinetică să fie egală cu energia potențială la distanța d_c . Se obține:

$$d_c = \frac{zZe^2}{4\pi r T} \quad (6.103)$$

unde cu T am notat energia cinetică a particulei incidente. Împrăștierea coulombiană este prezentată în Fig. 6.14.

Figura 6.14: Împrăștierea unor particule încărcate în câmp coulombian

Un calcul detaliat arată că traiectoriile particulelor sunt hiperbole iar secțiunea diferențială este de forma:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d_c^2}{16\sin^4\frac{\theta}{2}} \quad (6.104)$$

În Fig. 6.15 este reprezentată secțiunea diferențială de interacție într-un astfel de caz.

Împrăștiere și absorbție pe potențialul nuclear

Să considerăm situația în care energia particulei este suficient de mare astfel încât distanța minimă de apropiere d_C să cadă în interiorul razei de acțiune a potențialului optic. Pentru energii înalte ne așteptăm ca $d\sigma/d\Omega$ să difere de valorile date de ecuația (6.104) pentru valori mari ale unghiului θ . Acest lucru este ilustrat în cazul protonilor de 30 MeV care sunt împrăștiati pe nuclee de ^{208}Pb (Fig. 6.16).

Fluctuațiile secțiunii diferențiale pot fi considerate ca fiind asemănătoare intensității luminoase obținute prin difracție Fraunhofer pe o sferă absorbantă. Absorbția protonilor este luată în considerare prin partea imaginară a potențialului optic iW . Pornind de la acesta și de la distanțele dintre maxime se poate determina valoarea R a gropii de potențial. Rezultă $R = (1,4 - 1,5) A^{1/3}$ fm. Așa cum era de așteptat expresia lui R

Figura 6.15: Secțiunea diferențială de împrăștiere a particulelor α de 7,68 MeV pe nuclee de ^{197}Au

Figura 6.16: Secțiunea diferențială de împrăștiere a protonilor de 30 MeV pe ^{208}Pb

este de același tip ca cea dată de ecuația (6.3) având o valoare mai mare datorită razei de acțiune a forțelor nucleare. Pentru ca datele obținute să fie în concordanță cu cele prezise de teorie este necesar ca $V = 50$ MeV, iar $W = 5$ MeV.

O altă caracteristică descrisă de modelul optic este modul în care secțiunea totală de interacție (de absorbție și împrăștiere) σ_T variază în funcție de dimensiunea nucleară. σ_T variază lent cu energia pentru fiecare nucleu existând maxime largi. Aceste maxime pot fi înțelese ca niște rezonanțe care apar atunci când lungimea de undă a particulei incidente este cuprinsă de un număr întreg de ori în lărgimea gropii de potențial. Deoarece timpul de împrăștiere este de ordinul a $\Delta t \sim 10^{-22}$ s există o incertitudine în energie $\Delta E \sim h/\Delta t \sim 10$ MeV. Spunem ca starea are lărgimea $\Gamma = 10$ MeV.

6.4.6 Reacții directe

Reacțiile directe sunt caracterizate de o singură ciocnire pe care o suferă particula incidentă cu un nucleon din interiorul nucleului. Ciocnirea are loc normal la suprafața nucleului, deoarece dacă particula ar pătrunde mai mult în interiorul nucleului va suferi ciocniri multiple, fapt ce ar duce la formarea nucleului compus. Nucleonul excitat pe un nivel energetic superior (ciocnire inelastică) poate suferi reacție de tip pick-up (p, d). O altă posibilitate este aceea că un nucleon din particula incidentă poate fi captat pe o stare energetică (d, n). În orice formă reacția duce la popularea nivelelor slab excitate ale nucleului. Implicând o singură ciocnire cu un singur nucleon astfel de reacții pot fi tratate teoretic cu ajutorul modelului în pături al nucleului. Principala sursă de informații în acest caz este dată de variația secțiunii de împrăștiere $d\sigma/d\Omega$ în funcție de unghiul de împrăștiere θ .

Fie o particulă incidentă cu impulsul \vec{p}_i care interacționează cu un nucleu din care rezultă o particulă cu impulsul \vec{p}_f care face unghiul θ cu direcția de mișcare a particulei incidente. Fie \vec{q} impulsul transferat nucleului (Fig. 6.17).

Mărimea lui \vec{q} este dependentă de unghiul de împrăștiere θ :

$$q^2 = p_i^2 + p_f^2 - 2p_i p_f \cos \theta \quad (6.105)$$

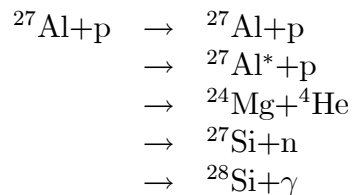
Momentul cinetic transferat este cuantificat și nu poate lua decât

Figura 6.17: Interacția directă în urma căreia nucleului i se transferă impulsul $\vec{q} = \vec{p}_i - \vec{p}_f$

valorile $[l(l+1)]^{1/2} \hbar$ unde l este numărul cuantic orbital. Când nucleul este excitat conservarea momentului cinetic restricționează valorile pe care le poate lua l . O altă limitare este impusă de conservarea parității, care impune ca diferența dintre paritățile celor două stări să fie $(-1)^l$.

6.4.7 Reacții cu formare de nucleu compus

Acest tip de reacții sunt caracterizate de faptul că are loc captura particulei incidente de către nucleul țintă. Particula care pătrunde în interiorul nucleului suferă mai multe ciocniri, după care nucleul compus se dezintegrează prin emiterea unei particule. Un exemplu tipic pentru acest tip de reacție este următorul proces:



Diferitele moduri de dezintegrare poartă numele de canale de dezintegrare și includ împrăștiere elastică, împrăștierea inelastică precum și dezintegrări radioactive.

Energia de excitare a nucleului compus este egală cu suma dintre energia de legătură E_b și energia cinetică a particulei incidente E_c (datorită masei mari a nucleului țintă se poate neglija energia cinetică pe care nucleul țintă o primește de la nucleonul incident). Energia de legătură

Figura 6.18: Rezonanțe în nucleul compus

este de aproximativ 8 MeV iar energia cinetică poate lua orice valoare. În reacțiile nucleare cu neutroni această energie poate fi aproximativ egală cu zero deoarece nu există nici o barieră coulombiană. În reacțiile nucleare cu particule încărcate E_c trebuie să fie suficient de mare pentru ca particula să poată trece bariera de potențial.

Măsurarea secțiunilor eficace pentru reacții în care energia neutronilor incidenti este de câțiva MeV prezintă foarte multe rezonanțe înguste (Fig.6.18).

Rezonanțele apar atunci când energia particulei incidente corespunde stărilor excitate ale nucleului compus.

Dacă notăm cu E energia particulei incidente, cu E_R energia rezonanței, s-a găsit că în vecinătatea rezonanței secțiunea eficace pentru o reacție particulară (i) depinde de energia particulei incidente după expresia:

$$\sigma(E) = \frac{\lambda^2}{4\pi} g \frac{\Gamma_C \Gamma_i}{(E - E_R)^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2} \quad (6.106)$$

unde λ este lungimea de undă de Broglie a particulei incidente, g este un factor statistic care depinde de spinii particulelor, Γ este lărgimea la semi-înălțime. Γ_C este proporțională cu probabilitatea pentru formarea nu-

cleului compus când particula incidentă interacționează cu nucleul țintă, iar Γ_i este proporțional cu probabilitatea ca nucleul să se dezintegreze pe canalul i . Spunem că Γ_i este lărgimea parțială pentru realizarea canalului i . Lărgimea totală a rezonanței este Γ și este egală cu suma lărgimilor parțiale:

$$\Gamma = \sum \Gamma_i \quad (6.107)$$

Expresia (6.106) a dependenței secțiunii eficace de energia particulei incidente este cunoscută ca formula Breit-Wigner. Trebuie remarcat că dependența lui σ de Γ_i implică faptul că secțiunea eficace pentru diverse canale de reacție este independentă de modul de formare a nucleului compus. O altă caracteristică interesantă este că pentru $E = E_R$, σ este de ordinul de mărime al lui λ^2 . Dar $\lambda^2 \sim 1/p^2 \sim 1/E$ astfel că aceasta poate fi mult mai mare decât πR^2 unde R este raza nucleară. Astfel σ poate avea valori foarte mari. Experimental s-a determinat că Γ_i poate avea valori în intervalul 0,1 eV - 10^3 eV. Aceste nedeterminări în valorile energiei duc la incertitudini în timpul de viață al stării nucleului compus care se situează în intervalul 10^{-14} la 10^{-20} secunde.

6.4.8 Fisiunea

Fisiunea este un proces în care un nucleu greu (din regiunea uraniului) se dezintegrează în două nuclee mai ușoare cu eliberarea a doi trei neutroni cu energii foarte mari. Ea a fost descoperită de Hahn și Strassmann.

Dacă ne referim la energia de legătură pe nucleon B/A reprezentată în Fig. 6.2 se observă că dacă în regiunea în care $A \simeq 240$, $B/A = 7,6$ MeV, pentru $A \simeq 120$, $B/A = 8,5$ MeV. Aceasta înseamnă că dacă un nucleu cu numărul de masă $A = 240$ se divide în două nuclee energia de legătură a fiecărui nucleon crește cu 0,9 MeV. Astfel este eliberată o energie egală cu 216 MeV. Această energie este de 10^6 mai mare decât energia eliberată în procesele chimice.

Trebuie remarcat că pe măsură ce A crește, proporția de neutroni în nucleele stabile crește. De exemplu cel mai stabil nucleu are $A = 120$ și este ${}_{50}^{120}\text{Sn}$ cu $N/A = 0,58$ în timp ce pentru $A = 240$ cel mai stabil nucleu ${}_{94}^{240}\text{Pu}$ are $N/A = 0,61$. Acest efect este datorat creșterii energiei repulsive de tip electrostatic dintre protoni. Astfel, când are loc un proces

Figura 6.19: Reprezentarea schematică a procesului de fisiune

de fisiune există un exces de neutroni în sistem. Unii neutroni sunt emiși chiar în timpul procesului de fisiune (neutroni prompti) iar alții sunt emiși mai târziu (neutronii întârziati).

Energia eliberată în procesul de fisiune se distribuie astfel:

Energia cinetică a nucleelor obținute prin fisiune	165 ± 5 MeV
Energia radiațiilor γ emise în procesul de fisiune	7 ± 1 MeV
Energia cinetică a neutronilor	5 ± 1 MeV
Energia particulelor β emise în procesul de fisiune	7 ± 1 MeV
Radiațiile γ a produșilor de fisiune	6 ± 1 MeV
Energia netronilor emiși de produșii de fisiune	10 MeV
Total	216 MeV

Mecanismul procesului de fisiune se poate explica intuitiv considerând nucleul ca o picătură de lichid.

Nucleul (Fig. 6.19) are inițial o formă sferică, apoi el se deformează până ce are loc ruperea acestuia în două fragmente, când apar și neutroni prompti. Pentru un prim studiu calitativ al procesului de fisiune se utilizează modelul picătură al nucleului. În acest caz sunt importanți termenii care sunt legați de energia de suprafață și energia de interacție coulombiană:

$$E = a_s A^{2/3} + a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} = a'_s R^2 + a'_c \frac{Z^2}{R} \quad (6.108)$$

Figura 6.20: Energia potențială de deformare funcție de distanța de deformare - separare

Dacă nucleul este deformat energia de suprafață crește în timp ce energia datorată interacției coulombiene scade deoarece sarcinile electrice se îndepărtează unele de altele. Suma celor doi termeni crește sau descrește în funcție de valoarea Z^2/R sau Z^2/A . Bohr și Wheeler au găsit că pentru $Z^2/A > 47,8$ suma descrește prin deformarea nucleului. Astfel, nu există nici o forță care să se opună deformației din ce în ce mai accentuate a nucleului și în final a ruperii acestuia în două fragmente.

Dacă $Z^2/A < 47,8$ creșterea energiei superficiale este mai mare decât scăderea datorată micșorării energiei potențiale electrostatice. Nucleul rezistă astfel deformației. Această rezistență trebuie să aibă caracterul unei bariere de potențial, deoarece după separare cele două fragmente ajung într-o stare de energie mai mică.

În Fig. 6.20 este reprezentată energia potențială în cazul procesului de fisiune pentru un nucleu cu $A = 240$ conform modelului picăturii.

Se observă că pe măsură ce deformarea crește, crește și energia potențială datorată lucrului mecanic efectuat împotriva forțelor de atracție. Dacă deformarea crește în continuare energia potențială nu mai crește datorită faptului că forțele nucleare au o rază scurtă de acțiune; prin separarea celor două fragmente și eliberarea neutronilor prompti energia potențială a sistemului se reduce cu 216 MeV. Bariera care trebuie surmontată de cele două fragmente este de aproximativ 6 MeV. Dacă această barieră este penetrată are loc fisiunea spontană. Timpul de viață este foarte

lung pentru nucleele cu $A < 250$ (pentru ${}_{92}^{238}\text{U}$, $\tau \simeq 10^{16}$ ani) dacă nucleul nu este într-o stare excitată.

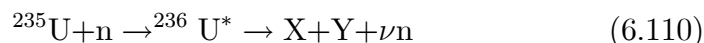
Mult mai interesant este procesul de fisiune indusă care are loc prin captura unui neutron. Există două posibilități ilustrate în cazul bombardamentului cu neutroni a uraniului natural (99,3 % ${}^{238}\text{U}$ și 0,7% ${}^{235}\text{U}$).

Când are loc procesul:



cu neutroni cu energie nulă nucleul compus se află într-o stare excitată cu energia de 5 MeV. Această energie este cu 1 MeV sub pragul barierei de potențial. Din acest motiv sunt necesari neutroni rapizi cu energia de 1 MeV pentru ca nucleul compus să ajungă pe o stare excitată de 6 MeV astfel încât bariera de potențial să fie penetrată de fragmentele de fisiune.

Din contră în cazul procesului:



unde cu X și Y am notat produșii de de fisiune iar $\nu = 2,47$ reprezintă numărul mediu de neutroni rapizi care se obțin prin fisiune, nucleul compus ajunge într-o stare excitată de aproximativ 6,4 MeV. Această energie este suficientă ca bariera de potențial să fie depășită în cursul procesului de fisiune. Atunci procesul de fisiune poate fi indus de neutroni lenți. Când se produce fisiunea cele două fragmente nu sunt egale. Astfel, pentru uraniu masele produșilor de reacție variază în jurul lui $A \simeq 95$ și $A \simeq 135$. De exemplu:



Reacțiile nucleare în lanț și reactorii nucleari

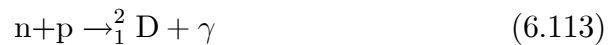
O reacție în lanț apare atunci când cei doi sau trei neutroni prompți emiși în procesul de fisiune pot să inducă o nouă fisiune. În cazul unui bloc de uraniu, reacția poate fi susținută dacă cel puțin un neutron

provenit din procesul de fisiune induce o altă fisiune. În acest caz ansamblul este critic și rezultă o explozie nucleară; dacă în cursul reacției nucleare numărul de neutroni rămâne constant avem de-a face cu o reacție nucleară controlată care se utilizează în reactorii nucleari. Dacă acest lucru nu se petrece, atunci ansamblul este unul subcritic.

În cazul armelor nucleare două mase de uraniu subcritice se unesc într-una critică.

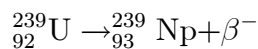
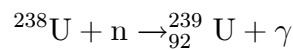
Există două tipuri de reactori: cu neutroni termici și neutroni rapizi.

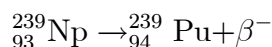
În reactorii cu neutroni termici se utilizează un procent de 0,7% de ^{235}U din uraniul natural datorită faptului că secțiunea eficace de reacție pentru neutronii termici (avînd energia 0,025 eV) este foarte mare și anume de 550 b. Neutronii de fisiune au însă energii mari (în jur de 1 MeV) și trebuie încetiniți pentru a ajunge la energii mici și să devină neutroni termici. Energia acestor neutroni este micșorată prin ciocnirile pe care le suferă aceștia în interiorul unei substanțe numită moderator a cărui masă moleculară este apropiată de cea a neutronilor (hidrogen, deuteriu, carbon). Apa, deși are un procent mare de hidrogen, are dezavantajul de a capta neutronul într-o reacție de tipul



și poate fi utilizată numai dacă combustibilul nuclear este puternic îmbogățit în ^{235}U . Alți moderatori folosiți sunt apa grea (D_2O) și grafitul (carbon). Este esențial ca procesul de fisiune să fie controlat. Aceasta se realizează cu ajutorul unor bare de control (în mod uzual realizate din bor și cadmiu a căror secțiune eficace de captură pentru neutronii termici este foarte mare). Aceste bare sunt introduse sau scoase din interiorul reactorului astfel încât să se controleze numărul de neutroni care pot induce fenomenul de fisiune.

Energia produsă (datorită energiei cinetice a fragmentelor de fisiune) este preluată de un agent de răcire care circulă în interiorul reactorului (bioxid de carbon sau apă sub presiune). În reactorii termici ^{238}U nu fisiunează ci captează neutronii, apoi emite o radiație β^- și se transformă în $^{239}_{94}\text{Pu}$



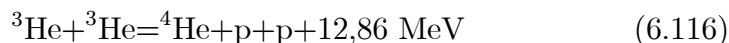


Plutoniul ${}_{94}^{239}\text{Pu}$ împreună cu ${}^{238}\text{U}$ este utilizat în reactorii cu neutroni rapizi. În acest tip de reactori nu este nevoie de moderatori deoarece se utilizează neutroni cu energii de 1 MeV iar miezul reactorului este mult mai compact. Producerea de energie este atât de mare încât ca agent de răcire trebuie utilizat natriul topit.

6.4.9 Fuziunea

Fuziunea este procesul prin care două nuclee ușoare se unesc și este eliberată o cantitate de energie. Din diagrama B/A în funcție de numărul de masă se observă că fuziunea implică nuclee ușoare care prin acest proces duc la nuclee mai grele în final obținându-se ${}^4\text{He}$ a cărui energie de legătură este foarte mare.

Reacțiile de fuziune responsabile pentru arderea hidrogenului sau ciclul hidrogenului în stele sunt:



unde β^{+} este pozitronul (o particulă cu aceeași masă ca a electronului dar cu sarcină pozitivă) și ν este neutrino o particulă cu masă foarte mică apropiată de zero.

Într-un astfel de proces patru protoni sunt convertiți într-un nucleu de heliu. Energia care rezultă în urma acestor reacții este:

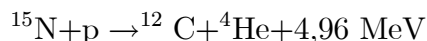
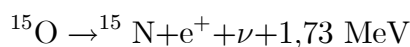
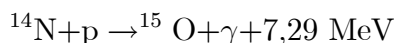
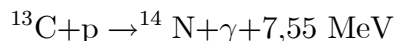
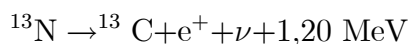
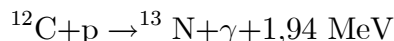
$$E = [4m_p - M({}^4\text{He}) - 2m_e] c^2 = 24,7 \text{ MeV} \quad (6.117)$$

În (6.117) nu am luat în considerare și masa neutrinelor deoarece aceasta este apropiată de zero.

Prima reacție (6.114) implică un proces de dezintegrare beta, o reacție de tipul $p+p \rightarrow {}^2\text{He} + \gamma$ fiind interzisă deoarece ${}^2\text{He}$ nu este un nucleu stabil. Această reacție este o reacție cu secțiune eficace mică. În plus

protonii trebuie să escaladeze o barieră de potențial de aproximativ 1 MeV pentru a interacționa. Astfel, temperatura în interiorul unei stele trebuie să fie de aproximativ 10^7 K pentru că energia medie a unui proton să fie în jur de 1 MeV. Datorită distribuției Boltzmann după energie și probabilității mici de penetrare a barierei de potențial a protonilor cu energii joase reacția se produce la temperatura stelară numai cu o rată foarte mică. Pentru a se obține o reacție nucleară într-un reactor nuclear ar fi nevoie de aproximativ 10^8 K.

În stele au loc și alte reacții de fuziune care duc la formarea altor elemente. Astfel, două nuclee de ^4He fuzionează formând un nucleu de ^8Be care împreună cu un alt nucleu de ^4He duc la formarea unui nucleu de ^{12}C . Ultimul nucleu joacă un rol important în producerea energiei în anumite stele printr-un alt ciclu de reacții nucleare numit ciclul carbonului:



6.5 Radioactivitatea

Radioactivitatea naturală a fost descoperită accidental de Henry Béquerell în anul 1896. Béquerell a lăsat o substanță ce conținea uraniu lângă o placă fotografică învelită în hârtie neagră. După ce a dezvoltat-o, pe placă a apărut imaginea cristalelor ce conțineau uraniul. Intensele cercetări efectuate de Béquerell, Curie și Rutherford au dus la descoperirea și a altor radionuclizi. Au fost găsite trei feluri de radiații: alfa, beta, gama. S-a constatat că radiația α constă din nuclee de heliu, radiația β din electroni (β^-) sau pozitroni (β^+), iar radiația γ este de natură electromagnetică.

În emisia α , numărul de masă A se micșorează cu 4 unități iar Z se micșorează cu două unități, în emisia β numărul de masă nu se schimbă,

în schimb Z și N variază cu o unitate. În emisia γ , nu se schimbă nici Z nici N . O astfel de transformare suferită de nucleu poartă numele de dezintegrare radioactivă.

Probabilitatea de dezintegrare dP a nucleului în intervalul de timp dt este dată de relația:

$$dP = \lambda dt \quad (6.118)$$

unde λ poartă numele de constantă de dezintegrare. Ipoteza care este făcută în cazul acestui proces este aceea că procesul este probabilistic și că el este independent de evoluția nucleului până în momentul dezintegrării.

În cazul unui compus cu N nuclee radioactive în timpul dt numărul de dezintegrări va fi NdP . Atunci, ținând cont de (6.118):

$$-dN = \lambda N dt \quad (6.119)$$

unde dN reprezintă variația numărului de nuclee. Semnul minus apare deoarece numărul de nuclee nedezintegrate scade. Integrarea ecuației diferențiale (6.119) se face considerând că la momentul $t = 0$ numărul total de nuclee este N_0 , iar la momentul t numărul de nuclee este N . Se obține:

$$N = N_0 e^{-\lambda t} \quad (6.120)$$

O mărime importantă în cazul radioactivității este activitatea unei substanțe care se definește ca numărul de dezintegrări care au loc în unitatea de timp.

$$\Lambda = \left| \frac{dN}{dT} \right| = \lambda N_0 e^{-\lambda t} = \lambda N = \Lambda e^{-\lambda t} \quad (6.121)$$

Astfel, activitatea unei surse radioactive scade exponențial cu timpul. Ca unitate de măsură pentru activitate se utilizează Béquerele care reprezintă o dezintegrare pe secundă. O altă unitate de măsură folosită este Curiul (Ci), $1 \text{ Ci} = 3,7 \times 10^{10} \text{ Bq}$.

Vor fi definite în continuare noțiunile de timp mediu de viață al unei substanțe radioactive și timpul de înjumătățire.

Timpul mediu de viață este media timpilor de viață ai nucleelor substanței radioactive. Nucleele care se dezintegrează în intervalul de timp t , $t + dt$ au timpul de viață cuprins în intervalul t și $t + dt$. Numărul acestor nuclee este:

$$|dN| = \Lambda dt = \lambda N_0 e^{-\lambda t} dt \quad (6.122)$$

Atunci:

$$\tau = \frac{1}{N_0} \int_{N_0}^0 t |dN| = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty \lambda t e^{-\lambda t} dt = \frac{1}{\lambda} \quad (6.123)$$

Ecuția (6.120) poate fi scrisă sub forma:

$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau} \quad (6.124)$$

Timpul mediu de viață poate fi interpretat ca timpul în care activitatea probei scade la $1/e$ din valoarea inițială.

Timpul de înjumătățire este perioada de timp $t_{1/2}$ în care activitatea se micșorează la jumătate din valoarea sa inițială sau perioada în care numărul de nuclee inițiale scade la jumătate. Astfel:

$$N = \frac{1}{2} N_0 = N_0 e^{-\lambda t_{1/2}} \quad (6.125)$$

de unde:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda} = 0,693\tau \quad (6.126)$$

Valorile observate pentru timpul de viață τ variază într-o gamă extrem de largă. Timpii de viață pentru anumiți emițători α sunt de ordinul a 10^{10} ani. Timpii de viață pentru emițătorii β sunt în intervalul 10^{-3} s la 10^6 ani. Timpii de viață foarte scurți se întâlnesc la emițătorii γ care pot ajunge la 10^{-15} s. Timpii de viață mai scurți sunt observați pentru nucleul compus (10^{-21} s).

De multe ori în loc să se discute despre timpul de viață se utilizează noțiunea de lărgime Γ a stării. Aceasta este legată de incertitudinea în timpul de viață. Deoarece $\Delta t \sim \tau$ din relațiile de incertitudine ale lui Heisenberg rezultă nedeterminarea în energia stării:

$$\Delta E = \hbar/\Delta t \simeq \hbar/\tau \quad (6.127)$$

Pentru nucleele stabile $\tau \rightarrow \infty$ iar $\Gamma = 0$, în timp ce în cazul în care $\tau = 10^{-21}$ s rezultă $\Gamma = 0,1$ MeV.

6.5.1 Măsurarea timpilor de viața

Modalitatea cea mai simplă pentru determinarea timpilor de viața este măsurarea activității A în funcție de timp. Apoi prin logaritmare a ecuației (6.121) rezultă:

$$\ln A = \ln \lambda N_0 - \lambda t \quad (6.128)$$

Se reprezintă grafic $\ln A$ în funcție de timp. Rezultă o dreaptă a cărei pantă este $-\lambda = -1/\tau$. Acest procedeu este potrivit dacă timpii de viața sunt cuprinși în intervalul minute - ani. Pe măsură ce timpii de viața scad sunt utilizate tehnici de măsură din ce în ce mai complicate. Pentru timpi de viața lungi:

$$A = \frac{N_0}{\tau} \approx \frac{N(t)}{\tau} \quad (6.129)$$

astfel că dacă se cunoaște cantitatea de substanță radioactivă și activitatea sa, τ poate fi determinat ușor. În multe din aceste cazuri activitatea se măsoară indirect prin măsurarea cantității produșilor de reacție.

6.6 Dezintegrarea alfa

Dezintegrarea alfa constă în eliberarea de către nucleu a unui nucleu de heliu. Ea diferă esențial de dezintegrările β și γ care duc la apariția unor particule ce nu sunt prezente în nuclee (electroni, neutrini, fotoni).

Ea apare mai ales la nucleele grele. Explicația acestui fapt este următoarea. Energia totală de legătură a particulei α este 28,3 MeV. Dar în nucleele grele energia de legătură pe nucleon este de 7 MeV. Astfel, energia de legătură a ultimilor nucleoni (2 protoni și 2 neutroni) este doar de 28 MeV iar dacă în interiorul nucleului se combină 2 protoni cu 2 neutroni pentru a forma o particulă α este eliberată o energie de 28,3 MeV mai mare decât energia de legătură a celor patru nucleoni individuali în nucleu (28 MeV). Din acest motiv rezultă că este posibil din punct de vedere energetic ca o particulă α să fie eliberată din nucleu.

Energia totală eliberată într-o dezintegrare α este:

$$Q = [M(Z, A) - M(Z - 2, A - 4) - M(^4\text{He})]c^2 \quad (6.130)$$

Deoarece numărul de neutroni și protoni nu se schimbă, energia Q dată de relația 6.130 poate fi exprimată și în funcție de energiile de legătură ale nucleului inițial, nucleului final și a particulei α .

$$Q = B(^4\text{He}) + B(Z - 2, A - 4) - B(Z, A) \quad (6.131)$$

Pentru a evalua valoarea lui Q vom utiliza modelul picăturii de lichid. Vom exprima pentru început diferența dintre energiile de legătură:

$$B(Z - 2, A - 4) - B(Z, A) = \frac{\partial B}{\partial Z} \Delta Z + \frac{\partial B}{\partial A} \Delta A = -2 \frac{\partial B}{\partial Z} - 4 \frac{\partial B}{\partial A} \quad (6.132)$$

Considerând cunoscută energia de legătură a nucleului de heliu $B(^4\text{He}) = 28,3 \text{ MeV}$:

$$Q = 28,3 - 4a_\nu + \frac{8}{3} \frac{a_s}{A^{1/3}} + 3 \frac{a_c Z}{A^{1/3}} \left(1 - \frac{Z}{3A}\right) - 4a_a \left(1 - 2\frac{Z}{A}\right)^2 \quad (6.133)$$

Substituind în expresia de mai sus valori pentru A și Z se obțin valori pozitive pentru energia Q când $A \geq 150$. De fapt pentru valori ale numărului de masă A cuprinse între valorile 150 (Sm) și 210 (Pb) au fost găsite doar câteva tipuri de nuclee radioactive α care au timpii de înjumătățire mai mari de 10^{16} ani. Aceasta se datorează energiilor mici Q_α , care reduc foarte mult posibilitatea ca particulele α să părăsească nucleul. Pentru $A > 210$ energiile tind să devină mai mari și astfel multe dintre nuclee se pot dezintegra α .

Toți emițătorii α au timpii de înjumătățire ($10^{-6} \div 10^{17} \text{ s}$) mult mai mari în comparație cu timpul necesar unei particule pentru a traversa nucleul (10^{-21} s). Trebuie remarcat că există diferențe enorme între timpii de înjumătățire. Astfel:

^{213}Po emite α cu $E_\alpha = 8,336 \text{ MeV}$ și $t_{1/2} = 4,2 \times 10^{-6} \text{ s} = 1,33 \times 10^{-13}$ ani

^{232}Th emite α cu $E_\alpha = 3,98 \text{ MeV}$ cu $t_{1/2} = 1,39 \times 10^{10}$ ani

În tabelul de mai jos sunt prezentate câteva exemple din care se observă că variațiilor enorme ale timpilor de înjumătățire le corespund

variații mult mai mici în energia particulelor α :

Emitător α	E (MeV)	T
^{212}Po	8,8	3×10^{-7} s
^{214}Po	7,7	$1,6 \times 10^{-4}$ s
^{210}Po	5,3	$1,38 \times 10^2$ zile
^{226}Ra	4,7	$1,62 \times 10^3$ ani
^{238}U	4,1	$4,5 \times 10^9$ ani

Geiger și Nuttall au măsurat constantele de dezintegrare și parcursul R_α în aer ale particulelor α . Ei au propus o relație simplă între $\log \lambda$ și R_α :

$$\log \lambda = a + b \log R_\alpha \quad (6.134)$$

O altă relație empirică găsită a fost aceea care leagă direct constanta de dezintegrare de energia particulei α :

$$\log \lambda = C - D/\sqrt{E} \quad (6.135)$$

unde C și D variază lent în funcție de Z și nu depinde de N .

O primă teorie a procesului dezintegrării α a fost dată în anul 1929 de Gamow, Condon și Gurney. Ei au presupus că particula α se formează în interiorul nucleului datorită forțelor atractive nucleare.

Datorită simetriei radiale vom scrie ecuația Schrödinger în coordonate sferice:

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E_T - V) \Psi = 0 \quad (6.136)$$

unde operatorul Laplacian are forma:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (6.137)$$

Atunci, funcția de stare se poate scrie ca un produs între o parte radială care depinde de distanța r și o parte unghiulară care depinde de unghiurile θ și φ și care este dată de funcțiile sferice $Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

$$\Psi = f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (6.138)$$

Introducând (6.138) în (6.136) ecuația satisfăcută de partea radială a funcției de stare este:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[(E_T - V) - \frac{l(l+1)}{2mr^2} \hbar^2 \right] f(r) = 0 \quad (6.139)$$

Făcând substituția:

$$u = rf \quad (6.140)$$

ecuația (6.139) devine:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[(E_T - V) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u &= 0 \\ \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_T - \left(V + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right) \right] & \end{aligned} \quad (6.141)$$

Ecuația (6.141) este similară ecuației Schrödinger unidimensionale în care energia potențială este înlocuită cu expresia:

$$V(r) + \frac{l(l+1)}{2mr^2} \hbar^2 \quad (6.142)$$

Termenul $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ are dimensiunea unei energii. Numitorul este un moment de inerție iar numărătorul este un moment cinetic la pătrat. El poate fi considerat ca o energie de rotație asociată cu mișcarea particulelor în jurul centrului lor de masă. Acest termen poartă numele de potențial centrifugal și are ca efect creșterea barierei potențiale a nucleului. Pentru particulele încărcate care ciocnesc nucleul energia centrifugală acționează în sensul diminuării probabilității de penetrare și în cazul interacției care implică momente orbitale mari efectul ei poate fi apreciabil. În cazul dezintegrării α efectul barierei centrifugale este mic. În Fig. 6.21 este prezentată forma barierei de potențial pe care particula α trebuie să o traverseze.

Astfel, luând $Z \simeq 90$ și $R_0 \simeq 10^{-14}$ m:

$$\left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_0^2} \right] : \left[\frac{zZe^2}{R_0} \right] \simeq 0,002l(l+1)$$

Din acest motiv vom limita discuția la situația în care $l = 0$ caz în care bariera de potențial se reduce la bariera de potențial coulombiană.

Figura 6.21: Bariera de potențial în cazul dezintegrării α

Pentru un nucleu cu raza R înălțimea barierei de potențial pentru o particulă încărcată este:

$$V_m = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

unde ze este sarcina particulei considerate.

Astfel, pentru un proton incident pe ^{238}U înălțimea barierei de potențial este $V_m = 13,02$ MeV în timp ce pentru o particulă α înălțimea barierei este $V_c = 23,97$ MeV

Vom calcula transparența barierei de potențial cu formulă

$$T = \exp \left\{ -\frac{2}{h} \int_R^b [2m(V - E)]^{\frac{1}{2}} dr \right\} \quad (6.143)$$

unde V este înălțimea acesteia, integrala realizându-se între limitele R și b , marcate în Fig. 6.21. Integrala de la exponent poartă numele de factorul Gamow și se notează cu G :

$$G = \left(\frac{8m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \int_R^b \left(\frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right)^{\frac{1}{2}} dr = \left(\frac{2Zze^2 m}{\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \int_R^b \left(\frac{1}{r} - E \frac{4\pi\epsilon_0}{Zze^2} \right)^{\frac{1}{2}} dr$$

$$G = \left(\frac{2Zze^2 mb}{\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\arccos \left(\frac{R}{b} \right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{R}{b} - \frac{R^2}{b^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (6.144)$$

unde

$$b = \frac{Zze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{E} \quad (6.145)$$

Expresia lui G se simplifică pentru $E \ll V_m$ și pentru $b \gg R$

$$\left[\arccos \left(\frac{R}{b} \right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{R}{b} - \frac{R^2}{b^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \longrightarrow \frac{\pi}{2} - \left(\frac{R}{b} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.146)$$

Atunci $G \simeq A - BR^{\frac{1}{2}}$, unde

$$A = \left(\frac{\pi Zze^2 m}{2\epsilon_0 \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.147)$$

$$B = \left(\frac{2Zze^2 m}{\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \quad (6.148)$$

Dacă nu se ține cont de dependența de raza nucleului în (6.144) termenul din paranteza dreaptă este egal cu 1. Atunci:

$$G = \left(\frac{2Zze^2 mb}{\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.149)$$

În acest fel G este determinat cu o aproximație de 30%. Numeric acest factor este (cu b în cm)

$$G \simeq 4,7 \times 10^6 (Zb)^{\frac{1}{2}} \quad (6.150)$$

Vom încerca să găsim o legătură între λ și T în cazul dezintegrării α . Probabilitatea că după o ciocnire particula să rămână în interiorul nucleului este $(1 - T)$. După n ciocniri această probabilitate este

$$P_n = (1 - T)^n = e^{n \ln(1-T)} \quad (6.151)$$

Deoarece T este mic:

$$\ln(1 - T) \simeq -T$$

Atunci:

$$P_n = e^{-nT} \quad (6.152)$$

Timpul mediu de traversare a nucleului este:

$$t_0 = \frac{2R}{v}$$

unde v este viteza particulei α . Astfel în timpul t au loc n ciocniri:

$$n = \frac{t}{t_0} = \frac{v}{aR}t$$

și

$$P_n = e^{-(v/2R)Tt} \quad (6.153)$$

Dacă N_0 este numărul total de nuclee la momentul inițial atunci după timpul t numărul de nuclee nedezintegrate este:

$$N_0 P_n = N_0 \exp\left(-\frac{v}{2R}Tt\right)$$

Notăm cu $N = N_0 P_n$ numărul de nuclee care nu se dezintegrează. Astfel:

$$N = N_0 e^{-(v/2R)Tt} \quad (6.154)$$

Comparând relațiile (6.120) și (6.154) rezultă:

$$\lambda = \frac{v}{2R}T = \lambda_0 T$$

(De exemplu în timpul mediu de viața al lui ^{238}U , $\tau = 6,5 \times 10^{19}$ ani, numărul de ciocniri a particulei α este $n \simeq 10^{38}$).

Atunci, ținând cont de (6.121) rezultă:

$$\lambda = \lambda_0 e^{-G} \simeq 10^{21} \exp\left[-\left(\frac{2Zze^2mb}{\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \quad (6.155)$$

Atunci λ depinde de b deci și de energia cinetică E . Logaritmând:

$$\log_{10} \lambda = 21 - \frac{\sqrt{2mze^2}}{(2\pi\varepsilon_0)2,303\hbar} \frac{Z}{\sqrt{E}}^{-\frac{1}{2}} = 21 - 1,0941 \frac{Z}{\sqrt{E}} \quad (6.156)$$

Astfel se regăsește relația 6.135.

O altă caracteristică a dezintegrării α este că particulele α emise de nuclee nu sunt monoenergetice. În cele mai multe din cazuri ele se

Figura 6.22: Schema de dezintegrare a ^{239}Pu

constituie în grupuri cu energii bine determinate. Din formula (6.156) rezultă că probabilitatea de dezintegrare α crește cu creșterea energiei. Ne așteptăm ca particulele cu energii mari să treacă mai ușor prin bariera de potențial. Ca exemplu vom prezenta schema de dezintegrare α a nucleului de ^{239}Pu în ^{235}U . Timpul de înjumătățire este 24360 ani.

Tranziția	Energia particulei α (MeV)	Intensitatea relativă
α_1	5,147	72,5%
α_2	5,134	16,8%
α_2	5,096	10,7%

Schema de dezintegrare este prezentată în Fig. 6.22

6.7 Dezintegrarea beta

6.7.1 Moduri de dezintegrare beta

Termenul de dezintegrare β cuprinde toate modurile de dezintegrare în care numărul atomic Z se schimbă cu o unitate, în timp ce numărul de masă rămâne constant. O astfel de transformare cuprinde nu numai dezintegrarea β^+ și β^- , dar și captura electronică.

Figura 6.23: Reprezentarea schematică a procesului de dezintegrare β . a) dezintegrarea β^- , b) dezintegrarea β^+ , c) captură electronică

În dezintegrarea β^- , un electron este emis de nucleu și sarcina nucleului se schimbă de la Ze la $(Z + 1)e$. În cazul unei astfel de dezintegrări, elementul este deplasat cu o poziție în dreapta sistemului periodic.

În dezintegrarea β^+ este emis un pozitron și sarcina nucleului scade de la Ze la $(Z - 1)e$, iar elementul este deplasat cu o poziție în stânga în sistemul periodic.

În cazul capturii electronice nucleul absoarbe unul din electronii de pe o pătura electronică și astfel sarcina sa se modifică de la valoarea Ze la valoarea $(Z - 1)e$. Atomul rămâne neutru, dar va fi într-o stare excitată, deoarece are un electron lipsă în pătura electronică. Captura electronică cea mai probabilă este aceea de pe patura K , deoarece un electron de pe o astfel de pătură este mult mai aproape de nucleu față de cazul în care s-ar afla pe pătura L sau M . Golul care apare în pătura electronică datorită capturii determină emisia unei radiații X caracteristice elementului respectiv.

Spectrul energetic al radiației β este continuu și se termină la o valoare maximă. Valoarea maximă a energiei reprezintă energia ce se eliberează în dezintegrarea β .

Cele trei moduri de dezintegrare β sunt arătate în Fig. 6.23.

În dezintegrarea β^- , masa nucleului inițial $M(Z, A) - Zm_e$ se descompune în masa nucleului ce se obține $M(Z + 1, A) - (Z + 1)m_e$ și masa

particulei β^- (electronului). Energia degajată este:

$$Q_{\beta^-} = \{[M(Z, A) - Zm_e] - [M(Z + 1, A) - (Z + 1)m_e + m_e]\} c^2$$

$$Q_{\beta^-} = [M(Z, A) - M(Z + 1, A)] c^2 \quad (6.157)$$

În dezintegrarea β^+ , această relație nu se aplică, deoarece dacă sarcina nucleară crește cu o unitate, un electron trebuie să fie emis pentru a păstra neutralitatea atomului. Masa nucleului inițial $M(Z, A) - Zm_e$ se descompune în masa nucleului rezultat $M(Z - 1, A) - (Z - 1)m_e$ și a unui pozitron de masă m_e . Energia degajată este:

$$Q_{\beta^+} = \{[M(Z, A) - Zm_e] - [M(Z - 1, A) - (Z - 1)m_e + m_e]\} c^2$$

adică:

$$Q_{\beta^+} = [M(Z, A) - M(Z - 1, A) - 2m_e] c^2 \quad (6.158)$$

În captura electronica (CE) masa nucleului inițial $M(Z, A) - Zm_e$ și a electronului captat determină masa nucleului rezultat.

$$Q_{CE} = \{[M(Z, A) - Zm_e + m_e] - [M(Z - 1, A) - (Z - 1)m_e]\} c^2$$

$$Q_{CE} = [M(Z, A) - M(Z - 1, A)] c^2 \quad (6.159)$$

Toate aceste trei procese au loc dacă Q este pozitiv. Această condiție este îndeplinită în cazul dezintegrării β^- și a capturii electronice când masa atomului inițial depășește masa atomului final. Pentru a avea loc o dezintegrare β^+ diferența dintre masele celor doi atomi trebuie să fie mai mare decât $2m_e$.

6.7.2 Spectrul de energie al particulei β emise

Așa cum este prezentată în Fig. 6.24 spectrul energetic al particulelor β emise este continuu și se termină la o energie maximă E_m care este foarte apropiată de energia de reacție Q .

Figura 6.24: Distribuția numărului de particule β în funcție de energie

Faptul că particulele β sunt emise cu un spectru continuu de energii a reprezentat o mare dificultate în înțelegerea și explicarea procesului de dezintegrare β luându-se în considerare chiar abandonarea legii conservării energiei.

O modalitate de a depăși impasul a fost prima dată făcută de Pauli. Deoarece nu s-a putut da o explicație corespunzătoare spectrului de energie al particulelor β , Pauli a presupus că în cursul dezintegrării apare o a treia particulă electric neutră, cu masă și momentul magnetic foarte mic. Această particulă poartă numele de neutrino și ea preia diferența de energie $E_m - E$, unde E este energia particulei β .

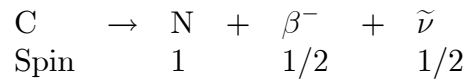
6.7.3 Neutrino

Dacă un neutrino este emis simultan cu particulele β în dezintegrarea β^\pm și are o anumită energie, iar masa este egală cu zero, viteza trebuie să fie egală cu cea a luminii. Experimental s-a demonstrat că masa de repaus a neutrinului este foarte mică: $m_\nu c^2 < 250$ eV (adică masa neutrinului este mai mică decât 0,05% din masa electronului).

Deoarece experimentele calorimetrice și altele au eșuat în demonstrarea faptului că dezintegrarea β este acompaniată de o altă particulă, se poate trage concluzia că dacă particula există, ea poate avea doar o interacție extrem de slabă cu materia.

Presupunând că legea de conservare a momentului cinetic este variabilă, s-a stabilit că spinul neutrinului este $s = 1/2$. În dezintegrarea

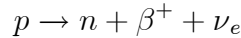
β , numărul de masă A nu se schimbă. Atunci, numărul cuantic al momentului cinetic al întregului nucleu nu se schimbă de la un întreg la un semiîntreg și viceversa. Deoarece particula β are spinul $1/2$ rezultă că și neutrino trebuie să aibă un spin semîntreg. Studiul dezintegrărilor β arată că numai valoarea $1/2$ este permisă. Un exemplu al unui astfel de proces este:



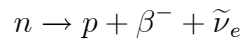
Trebuie remarcat faptul că neutrino și fotonul au masa nulă și momentul magnetic nul. Ei diferă prin spin și deci prin tipul de statistică cuantică care descrie comportarea lor. Neutrinii având spinul semîntreg sunt fermioni, iar fotonii, având spinul 1, sunt bozoni.

Există însă două tipuri de neutrino (fiecare având antiparticula respectivă).

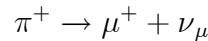
-beta-neutrino ν_e emis în dezintegrarea β^+ :



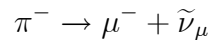
-beta-antineutrino emis în dezintegrarea β^- :



-miu-neutrino emis în dezintegrarea $\pi^+ \rightarrow \mu^+$:



-miu-antineutrino emis în dezintegrarea $\pi^- \rightarrow \mu^-$:



Procesul de dezintegrare β în care ei apar poate fi privit ca o transformare a protonului în neutron sau invers, procesele având loc în interiorul nucleului. Timpul de viață al unui neutron legat în interiorul nucleului nu are nici o legătură cu timpul mediu de viață al unui neutron liber. ($\tau = 1,01 \times 10^3$ s). În concordanță cu teoria Heisenberg-Yukawa, neutronii legați își petrec o parte din timp ca protoni și nu sunt susceptibili a se dezintegra ca neutroni liberi. Nu există nici o legătură între timpii de viață ai nucleelor ce suferă dezintegrarea β și timpul de viață al neutronilor liberi.

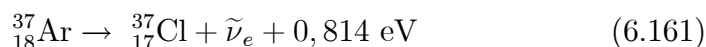
6.7.4 Metodele de punere în evidență a neutrinilor

Chiar metodele indirecte de punere în evidență a neutrinilor sunt complicate și dificil de realizat. Detectarea unor particule fără masă, fără moment magnetic și care intră în reacții datorită unei interacții extrem de slabe, pune probleme deosebite.

Metoda energiei de recul Metoda constă în punerea în evidență a energiei de recul a nucleului care se obține în urma capturii electronice. Dacă nu ar mai fi emisă nici o particulă nucleul nu ar trebui să aibă nici o energie de recul. Dacă se emite un neutrino atunci energia de recul a nucleului este dată de relația:

$$E_R = \frac{p_\nu^2}{2Am_n} = \frac{E_0^2}{2Am_n c^2} \quad (6.160)$$

unde $p_\nu = E_0/c$ este impulsul relativist al neutrinelui, E_0 este energia neutrinelui, A este numărul de masă iar m_n este masa unui nucleon. Pentru obținerea unei energii de recul mai mari este necesar ca numărul de masă să fie cât mai mic. S-a pus în evidență energia de recul a nucleului în procesul de captură:



Energia de recul este 9,6 eV. Reacția de mai sus are avantajul că utilizează o sursă gazoasă, iar produsul final se obține în starea fundamentală. Viteza ionilor a fost determinată prin metoda timpului de zbor și s-a găsit că viteza acestora este în concordanță cu predicția teoretică făcută pe baza existenței neutrinelui.

Metoda reacției inverse Metoda constă în punerea în evidență a reacției inverse:

$$p^+ + \tilde{\nu}_e \rightarrow n + \beta^+ \quad (6.162)$$

Aceasta este o reacție ce poate fi inițiată numai de antineutrini liberi, secțiunea eficace de interacție fiind de ordinul a 10^{-43} cm^2 . Pentru ca această reacție să se producă este nevoie de un flux foarte puternic de antineutrini ($10^{13} \tilde{\nu}_e \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$). O astfel de experiență a fost realizată la reactorul Savannah River unde neutrinii au căzut asupra a două vase cu

apă (ce conțineau 3×10^{26} ținte) în care a fost dizolvat CdCl. Într-un astfel de experiment au avut loc trei fenomene:

a) crearea unei particule β^+ care este încetinită și care se combină cu un electron dintr-o pătură a unui atom.

b) emiterea a două cuante γ fiecare cu 0,511 MeV care traversează ținta în direcții opuse și sunt înregistrate prin coincidență cu ajutorul a doi detectori cu scintilație așezați de o parte și de alta a țintei.

c) producerea unui neutron ce se mișcă lent și care produce o ionizare puternică și care după mai multe ciocniri este captat de Cd (la aproximativ $10 \mu s$ de la producerea sa). Captarea neutronului în Cd duce la excitarea nucleului și la emisia unor cuante γ . Astfel, au fost puse în evidență mai multe cuante γ (a căror energie totală este 9,1 MeV) după $10 \mu s$ de la apariția celor două cuante γ emise prin anihilarea pozitronului. Secțiunea eficace de interacție găsită experimental a fost:

$$\sigma_{\text{exp}} = (0,94 \pm 0,13) \times 10^{-43} \text{ cm}^2$$

în concordanță cu valoarea calculată:

$$\sigma_{\text{th}} = (1,07 \pm 0,07) \times 10^{-43} \text{ cm}^2$$

6.7.5 Teoria dezintegrării β

Teoria a fost fundamentată de Fermi, care a pornit de la analogia cu emisia unei radiații electromagnetice, ca urmare a unei tranziții a unui electron din norul electronic de pe un nivel pe altul. Emisia radiației γ este tratată cu ajutorul teoriei perturbațiilor în termenii unei probabilități de tranziție în unitatea de timp din starea inițială în starea finală. Fotonul nu este un constituent gata produs al atomului, el apare în momentul tranziției electronului de pe un nivel energetic pe altul. El apare datorită interacției atomului cu câmpul electromagnetic. Matematic această interacție este descrisă cu ajutorul unui operator Hamilton care caracterizează tranziția atomului din starea inițială în cea finală.

Într-un mod similar dezintegrarea β :

$$\begin{aligned} n &\rightarrow p^+ + \beta^- + \tilde{\nu} \\ p^+ &\rightarrow n + \beta^+ + \nu \end{aligned}$$

poate fi reprezentată prin crearea de leptoni (electroni, pozitroni, neutrini și antineutrini). Procesul de dezintegrare β este considerat ca rezultat al

unei interacții a nucleonilor nucleului cu câmpul electroneutrino: nucleoul trece în cealaltă stare (din proton în neutron și invers) cu generarea unui electron (pozitron) și antineutrino (neutrino). Interacția aceasta poartă numele de interacție slabă.

Hamiltonianul de interacție H (în forma unui operator de energie) duce sistemul din starea inițială i într-una din mai multe stări finale posibile prin crearea de leptoni (electroni și neutrini) prin intermediul interacției slabe. Tăria acestei interacții este dată de elementul de matrice:

$$H_{fi} = \int \Psi_i^* H \Psi_f d\Omega \quad (6.163)$$

Notăm cu $\rho(E_f)$ densitatea stărilor accesibile sistemului după ce are loc dezintegrarea:

$$\rho(E_f) = \frac{dn}{dE_0} \quad (6.164)$$

Atunci probabilitatea de tranziție în unitatea de timp este, conform regulii de aur a mecanicii cuantice:

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_f) |H_{fi}|^2 \quad (6.165)$$

Astfel, problema determinării probabilității de tranziție se reduce la calculul densității de stări și a elementului de matrice H_{fi} .

Densitatea de stări

Vom determina mai întâi densitatea de stări. Dacă impulsul electronilor emiși corespunzător intervalului energetic dE_0 din vecinătatea E_f este în intervalul $p, p + dp$, rezultă că W_{fi} exprimă probabilitatea ca particulele β emise în unitatea de timp să aibă impulsul în intervalul amintit. Atunci formula (6.165) poate fi scrisă în termenii unei funcții de distribuție după impulsuri $N(p)dp$:

$$N(p)dp = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{dn}{dE_0} |H_{fi}|^2 \quad (6.166)$$

Din punct de vedere fizic, ne imaginăm procesul ca unul în care nucleul (aflat în starea i) se transformă sub acțiunea unei perturbații slabe într-un alt nucleu plus un electron și un neutrino care reprezintă câmpul electro-neutrino. Nucleul final va avea o energie de recul, energia rămasă fiind împărțită între electron și neutrino în diverse moduri. Conform principiului Heisenberg între nedeterminarea în poziția pe axa Ox

și nedeterminarea în componenta impulsului pe această direcție există relația:

$$\Delta x \Delta p_x \simeq h \quad (6.167)$$

Există relații similare și pentru componentele după axele Oy și Oz. Astfel, în spațiul fazelor cu șase dimensiuni determinat de (x, y, z, p_x, p_y, p_z) un electron se poate afla în elementul de volum:

$$dx dy dz dp_x dp_y dp_z \simeq h^3 \quad (6.168)$$

Acest volum este volumul minim din spațiul fazelor care poate fi ocupat de un electron. Presupunem că electronul este localizat în volumul din spațiul tridimensional V și are impulsul în intervalul $(p, p + dp)$. Deoarece în spațiul fazelor electronul ocupă un volum h^3 numărul de stări pe care acesta le poate ocupa este:

$$dn_e = V \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} \quad (6.169)$$

În mod analog se poate calcula numărul de stări ale neutrinilor:

$$dn_\nu = V \frac{4\pi p_\nu^2 dp_\nu}{h^3} \quad (6.170)$$

Numărul de stări din spațiul câmpului electroneutrinic va fi:

$$dn = dn_e dn_\nu \quad (6.171)$$

Densitatea de stări este:

$$\frac{dn}{dE_0} = \frac{16\pi^2 V^2}{h^6} p^2 p_\nu^2 \frac{dp_\nu}{dE_0} dp \quad (6.172)$$

În relația (6.172) impulsul neutrino este:

$$p_\nu = \frac{E_\nu}{c} \quad (6.173)$$

Neglijând energia de recul a nucleului obținut, energia de dezintegrare E_0 se împarte între electron și neutrino:

$$E_0 = E + E_\nu \quad (6.174)$$

Relația (6.173) devine:

$$p_\nu = \frac{1}{c}(E_0 - E) \quad (6.175)$$

iar:

$$p_\nu^2 \frac{dp_\nu}{dE_0} = \frac{1}{c^3}(E_0 - E)^2 \quad (6.176)$$

astfel că relația (6.172) se scrie:

$$\frac{dn}{dE_0} = \frac{16\pi^2 V^2}{c^3 h^6} p^2 (E_0 - E)^2 dp \quad (6.177)$$

Elementul de matrice

Elementul de matrice este:

$$H_{fi} = \int \Psi_f^* H \Psi_i d\Omega \quad (6.178)$$

Ψ_i este funcția de stare a stării inițiale a sistemului. Ea este chiar funcția de stare a nucleului inițial pe care o vom nota cu ψ_i . Ψ_f este funcția de stare a stării finale. Ea este un produs dintre funcția de stare a nucleului final ψ_f și funcțiile de stare a neutrinelui $\varphi_\nu(\vec{r})$ și electronului $\varphi_e(\vec{r})$.

$$\psi_f \varphi_e(\vec{r}) \varphi_\nu(\vec{r}) \quad (6.179)$$

Elementul de matrice dat de (6.178) se poate exprima ca:

$$H_{fi} = g \int [\psi_f^* \varphi_e^* \varphi_\nu^*(r)] M \psi_i d\Omega \quad (6.180)$$

unde g este o constantă fundamentală empirică numită constantă de cuplare Fermi și care are valoarea $g = 1,41 \times 10^{-49} \text{ erg cm}^3 = 0,9 \times 10^{-4} \text{ MeV fm}^3$, iar M este un operator adimensional care provine din operatorul Hamilton.

Constanta de cuplare Fermi exprimă puterea de interacție a radiației β . Caracterul ei amintește de constanta gravitațională și de constanta de structură fină.

Vom simplifica elementul de matrice H_{fi} . Deoarece interacția dintre nucleu și leptoni este foarte mică, undele asociate leptonilor sunt nedistorsionate datorită câmpului nuclear și putem să le considerăm unde plane

(Se neglijează efectul câmpului coulombian al nucleului). Atunci:

$$\varphi_e(\vec{r}) = N_e e^{i\vec{K}_e \vec{r}} \quad (6.181)$$

$$\varphi_\nu(r) = N_\nu e^{i\vec{K}_\nu \vec{r}} \quad (6.182)$$

unde \vec{K}_e și \vec{K}_ν reprezintă vectorii de undă. Dacă normăm funcțiile de stare în interiorul volumului V se găsește că:

$$N_e = N_\nu = V^{-1/2} \quad (6.183)$$

Funcțiile de stare ψ_i și ψ_f sunt diferite de zero numai în interiorul nucleului. Din acest motiv integrala se extinde numai peste volumul nucleului V . Deoarece extinderea nucleului este mică în comparație cu volumul în care leptonii pot fi localizați, dezvoltăm funcțiile de undă $\varphi_e(\vec{r})$ și $\varphi_\nu(\vec{r})$ în jurul originii $\vec{r} = 0$:

$$\varphi_e(\vec{r}) = V^{-1/2} \left[1 + i(\vec{K}_e \vec{r}) + \dots \right] \quad (6.184)$$

$$\varphi_\nu(\vec{r}) = V^{-1/2} \left[1 + i(\vec{K}_\nu \vec{r}) + \dots \right] \quad (6.185)$$

Este suficient să considerăm doar primul termen în fiecare serie:

$$\varphi_e(0) = \varphi_\nu(0) = V^{-1/2} \quad (6.186)$$

deoarece următorul termen este de 50 de ori mai mic. Astfel:

$$H_{fi} = g\varphi_e^*(0) \varphi_\nu^*(0) \int \psi_f^* M \psi_i d\Omega = g\varphi_e^*(0) \varphi_\nu^*(0) M_{fi} \quad (6.187)$$

Atunci:

$$H_{fi} = \frac{g}{V} M_{fi} \quad (6.188)$$

unde cantitățile necunoscute ψ_e , M și ψ_i au fost grupate într-un element de matrice M_{fi} . Acest element este o integrală în care intervine funcția de stare a nucleului inițial și funcția de stare a nucleului final. În cazul unei tranziții permise el este aproximativ 1 și este independent de energia electronului, în timp ce pentru tranzițiile interzise este egal cu zero.

Substituind în (6.166) densitatea de stări (6.177) și elementul H_{fi} în final se ajunge la:

$$N(p)dp = \frac{g^2}{2\pi^3 c^3 \hbar^7} |M_{fi}|^2 (E_0 - E)^2 p^2 dp \quad (6.189)$$

Acestei formule trebuie să i se adauge un factor de corecție pentru a lua în considerație interacțiunea coulombiană dintre particula β și nucleu. Datorită interacției coulombiene cu nucleul, viteza și deci și energia particulei β^- este micșorată, în timp ce pentru particula β^+ viteza și energia cresc. Acest fapt afectează forma spectrului de energie precum și probabilitatea de dezintegrare. Comparând situația unei dezintegrări β^- cu o dezintegrare β^+ apare paradoxal faptul că efectul interacției coulombiene servește la stimularea emisiei β^- și nu stimulează emisia β^+ . Această influență este caracterizată cu ajutorul funcției Fermi $F(E, Z)$

$$N(p)dp = \frac{g^2}{2\pi^3 c^3 \hbar^7} |M_{fi}|^2 F(E, Z) (E_0 - E)^2 p^2 dp \quad (6.190)$$

Astfel, atunci când se studiază spectrul de energie al particulelor β^+ și β^- impulsul și energia acestora sunt altele decât la momentul inițial. Astfel, pentru particulele β^+ impulsul este mai mic la creare, și atunci densitatea de stări este mai mică fapt ce face ca probabilitatea de tranziție să fie mai mică.

Schimbarea impulsului particulelor β datorită câmpului coulombian este mai mare când particula are impuls mic. În consecință, influența interacției coulombiene este mai mare la începutul spectrului de energie. Putem considera că această perturbare schimbă funcția de stare a electronului. Aceasta face necesară modificarea elementului $|H_{fi}|^2$ astfel încât acesta să conțină funcția de stare a electronului $|\varphi_e(0)|_Z^2$ modificată de sarcina nucleară. Astfel, noul element de matrice $|H_{fi}|^2$ se scrie ca:

$$|H_{fi}|^2 = g^2 |\varphi_c(0)|_Z^2 |\varphi_\nu(0)|^2 |M_{fi}|^2 \quad (6.191)$$

În acest fel factorul de corecție $F(E, Z)$ poate fi definit astfel:

$$F(E, Z) = \frac{|\varphi_e(0)|_Z^2}{|\varphi_e(0)|^2} \quad (6.192)$$

Funcția Fermi ia valorile:

$$\begin{aligned} F &\geq 1, \text{ pentru emisia } \beta^- \\ F &\leq 1, \text{ pentru emisia } \beta^+ \end{aligned}$$

Expresia explicită a lui F este complicată existând formule și tabele pentru diverse energii.

6.7.6 Constanta de dezintegrare β

Constanta de dezintegrare λ este egală cu probabilitatea de emisie a unei particule β cu o energie între 0 și E_0 care corespunde impulsului maxim p_m :

$$\lambda = \int_0^{p_m} N(p) dp = \frac{g^2}{2\pi^3 c^3 \hbar^7} \int_0^{p_m} |M_{fi}|^2 F(E, Z) (E_0 - E)^2 p^2 dp \quad (6.193)$$

Este convenabil ca această integrală să fie făcută referindu-ne la energia totală a particulei β raportată la energia de repaus a acesteia. Astfel se introduc mărimile:

$$W = \frac{E + m_e c^2}{m_e c^2} \quad (6.194)$$

$$W_0 = \frac{E_0 + m_e c^2}{m_e c^2} \quad (6.195)$$

Atunci (6.193) devine:

$$\lambda = \frac{m^5 g^2 c^4 |M_{if}|^2}{2\pi^3 \hbar^7} \int_1^{W_0} F(Z, W) (W^2 - 1)^{1/2} (W - W_0)^2 W dW \quad (6.196)$$

sau:

$$\lambda = \frac{|M_{if}|^2}{\tau_0} f(E_0, Z) \quad (6.197)$$

unde:

$$f(E_0, Z) = \int_1^{W_0} F(Z, W) (W^2 - 1)^{1/2} (W - W_0)^2 W dW$$

a fost evaluată numeric de Feenberg și Trigg pentru diverse valori ale lui Z și E_0 , iar:

$$\tau_0 = \frac{2\pi^3 \hbar^7}{m_e^5 c^4 g^2} = 7000 \text{ s} \quad (6.198)$$

poartă numele de constanta universală de timp a dezintegrării β .

6.7.7 Violarea conservării parității

În fizica macroscopică există o serie de legi de conservare care sunt respectate: legea conservării energiei, legea de conservare a momentului cinetic, legea de conservare a impulsului. În fizica atomică și nucleară alături de aceste legi funcționează și legea conservării parității. Aceasta este o consecință a faptului că potențialele care sunt implicate în fizica atomică și nucleară sunt invariante la operația de oglindire. Aceasta face ca operatorul Hamilton asociat acestor interacții să fie invariant la reflexia coordonatelor spațiale față de origine. Această operație este notată simbolic cu $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Operația de reflexie față de origine este echivalentă cu o serie de reflexii succesive față de planele xOy, xOz, yOz. Pentru simplificare în continuare vom considera efectul reflexiei doar într-un plan ca într-o oglindă plană. Astfel:

$$H(\vec{r}) = H(-\vec{r}) \quad (6.199)$$

Spunem că H este un scalar. O astfel de mărime se deosebește de un pseudoscalar care-și schimbă semnul după operația de reflexie. Invarianța discutată mai sus face ca funcțiile proprii asociate operatorului Hamilton să aibă o paritate bine determinată iar paritatea totală inițială și finală este aceeași (paritatea se conservă).

Dacă un sistem are o paritate bine determinată el este identic cu imaginea sa în oglindă. Dacă paritatea se conservă imaginea unui experiment real apare în oglindă.

În lumea macroscopică în general sistemele nu sunt invariante la operația de oglindire. O elice nu coincide cu imaginea sa în oglindă și spunem că are o elicitate bine determinată. Chiar sisteme extrem de mici precum moleculele organice posedă o elicitate bine definită.

Un exemplu este prezentat în Fig. 6.25 în care un ac magnetic este deviat cu ajutorul unui câmp magnetic creat de un curent liniar. În experimentul real polul nord este deviat înspre cititor. În cazul experimentului reflectat polul nord ar trebui deviat în sens invers. Astfel, acest experiment pare a viola legea conservării parității deoarece în experimentul din oglindă acul magnetic ar trebui să devieze dinspre cititor (în sens invers experimentului real).

Dacă studiem experimentul la scară microscopică trebuie să ținem cont de curenții moleculari care produc câmpul magnetic. În oglindă sensul acestor curenți este invers sensului curenților din acul magnetic

Figura 6.25: a) Imaginea în oglindă a unui magnet când nu se iau în considerație curenții moleculari din interiorul său b) Imaginea în oglindă a unui magnet când se iau în considerație curenții moleculari din interiorul său

real, astfel că în oglindă polii acului magnetic se schimbă. Atunci imaginea experimentului în oglindă poate fi realizată în practică. Rezultă astfel că la nivel microscopic legea de conservare a parității este valabilă.

Vreme îndelungată legea conservării parității a fost considerată valabilă. Pentru interacțiunile electromagnetice și interacțiunile tari legea a fost demonstrată experimental. Totuși în 1956 studiindu-se dezintegrarea mezonilor K s-a observat că aceștia în unele scheme de dezintegrare se comportă ca particule pare iar în alte scheme se comportă ca particule impare. Tot în 1956 Lee și Young au arătat că se poate elabora o teorie a dezintegrării β fără a se lua în considerație conservarea parității în cazul interacțiilor slabe (Lee T. D, Young C. N. , Phys Rev. 104 p 254, 1956). Lee și Young au sugerat că punerea în evidență a neconservării parității se poate face în studiul dezintegrării β a unor nuclee polarizate.

În celebrul experiment al lui Wu din 1957 a fost măsurată distribuția unghiulară a electronilor emiși de nucleele polarizate de ^{60}Co . În Fig. 6.26 este arătat experimentul real și cel oglindit.

Proba utilizată a fost un nitrat de cobalt în care s-a realizat o orientare a momentelor cinetice nucleare cu ajutorul unui câmp magnetic. S-a observat experimental că mai mulți electroni au fost emiși în direcție

Figura 6.26: Emisia beta în cazul experimentului real și a celui oglindit

opusă vectorului moment cinetic al nucleelor. În oglindă se observă că electronii sunt emiși în direcția momentului cinetic. Experimentul oglindit nu poate fi realizat deoarece rezultatul său ar fi în contradicție cu rezultatele experimentului real. Astfel, observarea acestei asimetrii în experimentul real, constituie o demonstrație că legea conservării parității nu este valabilă. Experimentul a fost dificil de realizat din două motive: a) sunt necesare câmpuri magnetice foarte mari 10^5 Oe b) sunt necesare temperaturi extrem de mici ($\sim 0,1$ K). Câmpurile magnetice mari și temperaturile foarte mici sunt necesare pentru ca energia de interacție a nucleului cu câmpul magnetic să fie cel puțin egală cu energia de agitație termică. În acea vreme nu s-au putut obține direct câmpuri de o astfel de valoare (astăzi ele sunt obținute cu ajutorul supraconductorilor). Din acest motiv s-au folosit substanțe paramagnetice deoarece electronii acestora crează în zona nucleului câmpuri de 10^5 Oe. Aceste câmpuri vor fi orientate paralel dacă se polarizează momentele magnetice ale electronilor atomici (lucru care se realizează cu ajutorul unor câmpuri în jur de 100 Oe). Răcirea se poate face până la 4,2 K cu ajutorul heliului lichid, apoi până la 0,01 K prin metoda demagnetizării adiabatice. Rezultatele experimentului sunt arătate în Fig. 6.27.

Pentru măsurarea gradului de asimetrie s-au folosit doi contori γ cu

Figura 6.27: Rezultatul experimentului lui Wu cu privire al emisia particulelor beta provenite din nuclee polarizate

crystal de NaI. Din Fig. 6.27 se observă că electronii sunt emiși preponderent în direcția opusă momentului cinetic al nucleului. Mărimea asimetriei scade treptat în timp (8 minute) fapt datorat micșorării gradului de polarizare al nucleelor pe măsura încălzirii probei datorată căldurii provenite din mediul exterior și celei datorate dezintegrării β . Distribuția unghiulară a electronilor emiși a fost caracterizată cu ajutorul funcției:

$$f(\theta) = A(1 + \cos\theta) \quad (6.200)$$

Din punct de vedere matematic această neconservare a parității înseamnă că hamiltonianul care corespunde interacției slabe are două componente: una scalară $H_{\beta s}$ și una pseudoscalară $H_{\beta p}$:

$$H = H_{\beta s} + H_{\beta p} \quad (6.201)$$

6.8 Dezintegrarea gama

6.8.1 Tranziții de dipol și tranziții multipolare

Nucleele prezintă o mulțime de stări excitate caracterizate de energia E , momentul cinetic (prin intermediul numărului cuantic J) și paritatea $P = \pm 1$. El poate ajunge într-o astfel de stare dacă are loc o dezintegrare

Figura 6.28: a) Emisia unui foton b) Absorbția unui foton

alfa sau beta. Apoi nucleul se dezexcită în starea fundamentală prin emisia unui foton. Procesul poartă numele de dezintegrare gama. El este analog cu cel al emisieii radiației de către un atom. Dar cum intervalul dintre nivelele energetice ale nucleului este mult mai mare decât cel din atom lungimile de undă corespunzătoare celor două situații vor diferi foarte mult ($\lambda \sim 10^{-7}$ m pentru atom și $\lambda \sim 10^{-12} - 10^{-13}$ m pentru nucleu). Lungimea de undă poate fi comparată cu raza atomică ($R_{atom} \simeq 10^{-10}$ m) și raza nucleară ($R_{nucleu} \simeq 10^{-14}$ m):

$$\left(\frac{R}{\lambda}\right)_{atom} = 10^{-3} \quad \text{și} \quad \left(\frac{R}{\lambda}\right)_{nucleu} = 10^{-1} - 10^{-3}$$

Diferența dintre aceste rapoarte are implicații profunde în sensul că pentru atomi trebuie considerată în general doar emisia de dipol în timp ce pentru nucleu apar mai multe tipuri de radiații multipolare.

Radiația de tip electric dipolar (notată cu $E1$ în fizica nucleară) reprezintă echivalentul cuantic al radiației produse în mod clasic de un dipol oscilant. Pentru o particulă cu sarcină e având vectorul de poziție \vec{r} , momentul electric de dipol este $e\vec{r}$, iar probabilitatea cuantică de tranziție dipolară între două stări este legată de elementul de matrice:

$$M_{if} = \int u_i^* e\vec{r} u_f dv \quad (6.202)$$

Formula de mai sus se aplică de exemplu pentru tranziția unui proton între două stări. Tranziția este reprezentată în Fig. 6.28a; în Fig. 6.28b este prezentată absorbția unui foton.

Se calculează probabilitatea de tranziție T care este proporțională cu $|M_{if}|^2$ și se obține:

$$T(E1) \sim \frac{1}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left(\frac{E_\lambda}{\hbar c}\right)^3 |M_{if}|^2 \quad (6.203)$$

Deoarece elementul de matrice este de ordinul lui eR unde R este raza nucleului iar $E_\gamma = hc/\lambda$ atunci:

$$T(E1) \sim \frac{R^2}{\lambda^3} \quad (6.204)$$

Cum timpul mediu de viață al stării este invers proporțional cu probabilitatea de tranziție atunci acesta este proporțional cu λ^3 sau E^{-3} .

O altă posibilitate de a se obține radiație gama este emisia de cuadripol. Probabilitatea unei astfel de tranziții este proporțională cu elementul de matrice dintre cele două stări pentru operatorul moment de cuadripol. Acesta are ordinul de mărime eR^2 . Astfel probabilitatea de tranziție este:

$$T(E2) \sim \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left(\frac{E_\lambda}{\hbar c}\right)^5 R^4 \sim \frac{R^4}{\lambda^5} \quad (6.205)$$

În mod analog probabilitatea de tranziție pentru celelalte momente multipolare are forma:

$$T(EL) \sim \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \left(\frac{E_\lambda}{\hbar c}\right)^{2L+1} R^{2L} \sim \frac{R^{2L}}{\lambda^{2L+1}} \quad (6.206)$$

Dacă se pornește de la expresiile de mai sus putem evalua raportul:

$$\frac{T(EL+1)}{T(EL)} \sim \left(\frac{R}{\lambda}\right)^2 \quad (6.207)$$

În cazul nucleului acest raport este de ordinul $10^{-2} - 10^{-4}$ în comparație cu 10^{-6} pentru atom. De aici rezultă faptul că în fizica atomică radiația multipolară are o importanță foarte mică.

În afară de radiația datorată tranzițiilor de multipol există o radiație ce apare datorită oscilațiilor multipolilor magnetici. În mecanica cuantică probabilitatea de tranziție depinde de elementele de matrice care implică mai degrabă curenți decât sarcini elementare. Considerând $j = ev$ unde v este viteza unui nucleon în nucleu, ordinul de mărime al elementului de matrice poate fi estimat înlocuind pe e cu ev/c în expresiile care dau probabilitățile de tranziție. Pentru evaluarea acestei expresii vom utiliza

Figura 6.29: Diagrama Weisskopf a timpilor de înjumătățire funcție de energia radiației gama pentru tranziții de diverși multipoli în cazul unui nucleu cu $A = 100$

relația de incertitudine a lui Heisenberg $\Delta p \Delta x \simeq \hbar$ unde $\Delta p \simeq m_p v$ iar $\Delta x \simeq R$. Atunci $v/c \simeq \hbar/m_p R c$. Există în plus și o contribuție datorată momentelor magnetice intrinseci ale nucleonilor. Din acest motiv probabilitățile de tranziție multipolare electrice și magnetice sunt legate printr-o relație de forma:

$$T(ML) = 10 \left(\frac{\hbar}{m_p R c} \right)^2 T(EL) \quad (6.208)$$

Ecuția (6.208) a fost obținută în anul 1950 de Weisskopf care a adăugat o constantă multiplicativă care depinde de L . Având în vedere legătura dintre probabilitățile de tranziție și timpii de înjumătățire $t_{1/2} = \ln 2/T$ pot fi trasate curbele care dau timpii de înjumătățire pentru diverse tranziții multipolare în funcție de energia radiațiilor γ emise (Fig. 6.29).

6.8.2 Reguli de selecție

Pentru a se obține însă o radiație multipolară este necesar ca elementul de matrice care intervine în expresia probabilității de tranziție să nu fie nul. Aceasta depinde de natura funcției de stare și de simetria operatorului respectiv. De exemplu pentru tranziția $M1$ operatorul este $e\vec{r}$. Acesta are o paritate egală cu -1 . Este de așteptat ca radiația emisă să reflecte această proprietate de simetrie și să fie caracterizată de un moment cinetic al cărui număr cuantic să fie $L = 1$ și să aibă o paritate egală cu -1 . De altfel se observă că pe direcția Oz componenta lui $e\vec{r}$ este $ez = er \cos \theta \sim erY_{10}(\cos \theta)$ care este o funcție proprie a operatorului moment cinetic cu $L = 1$ și are paritatea egală cu -1 . Este emis un foton 1^- . În plus momentul cinetic și paritatea trebuie să se conserve în aceste tranziții. Astfel, pentru ca tranziția de dipol să aibă loc este necesar ca $\Delta J = \pm 1$. Este interzisă tranziția dintre două stări pentru care numărul cuantic J corespunzător momentului cinetic este nul datorită faptului că radiația emisă are un moment cinetic al cărui număr cuantic este $L = 1$. Deoarece paritatea fotonului emis este -1 atunci $P_f = -P_i$. Acestea sunt regulile de selecție în cazul tranziției de dipol electric.

Pentru tranziția de dipol magnetic deoarece operatorul moment magnetic este legat de operatorul moment cinetic $\vec{r} \times \vec{p}$ fotonul emis are paritatea $+1$ (operatorul este un operator par adică el nu se schimbă la trecerea $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$). Din acest motiv față de cazul tranziției de dipol electric singura schimbare constă în faptul că $P_f = P_i$.

În cazul tranziției electrice de multipol intervine operatorul $3z^2 - r^2 \sim r^2 Y_{20}$, astfel că paritatea fotonului emis este $P = +1$. Mai mult momentului cinetic al acestuia îi corespunde numărul cuantic $L = 2$, astfel că este emis un foton 2^+ într-o astfel de tranziție. Regula de selecție pentru numărul cuantic J este $\Delta J = \pm 2$. Și în acest caz $P_f = P_i$.

Legătura dintre timpii de înjumătățire și energia radiației γ emisă urmează în general predicțiile teoretice. Dacă o stare se poate dezintegra printr-o radiație de multipol de ordin mare timpii de înjumătățire sunt foarte mari. De exemplu timpul de înjumătățire al stării $11/2^-$ a ^{131}Xe care se dezintegrează în starea fundamentală $3/2^+$ printr-o tranziție $M4$ este de 11,8 zile. Spunem despre astfel de stări (al căror timp de înjumătățire este mai mare de 1 s) ca fiind stări izomere. Ele apar în regiunile în care stările excitate de energie mică au momente cinetice mari; revenirea în starea fundamentală fiind posibilă doar prin tranziții de multipol de ordin

înalt. Este de remarcat ca multe tranziții $E2$ au timpi de viață mult mai scurți decât cei prezși cu ajutorul modeului în pături uniparticulă. Un exemplu este cazul ^{180}Hf pentru care timpii de înjumătățire sunt de două ori mai mici decât cei prezși. Acest lucru nu poate fi înțeles decât dacă se consideră contribuția proceselor colective la probabilitatea de tranziție.

6.8.3 Conversia internă

În mod frecvent în procesul de dezintegrare γ sunt observați electroni emiși cu energia:

$$E = E_\gamma - W_i \quad (6.209)$$

unde E_γ este energia fotonilor emiși, iar W_i se referă la energia de legătură a electronilor de pe pătura i (K, L, M, \dots) ai atomului din care face parte nucleul. Acest fenomen poate fi privit ca un efect fotoelectric intern. Deși acest proces se poate petrece el are loc cu o probabilitate foarte mică. Explicația fenomenului constă în faptul că energia de tranziție este transferată direct electronului prin interacții electromagnetice de la nucleu. Acest proces poartă numele de conversie internă și este un alt mod de dezexcitare nucleară. Probabilitatea de tranziție T dintr-o stare excitată în altă stare are forma:

$$T = T_\gamma + T_c \quad (6.210)$$

unde T_γ este probabilitatea de dezintegrare prin emisia unui foton iar T_c este probabilitatea de dezintegrare prin conversie internă. Se poate defini un coeficient de conversie internă:

$$\alpha = \frac{T_c}{T_\gamma} = \frac{N_c}{N_\gamma} \quad (6.211)$$

unde N_c și N_γ sunt numărul de electroni, respectiv numărul de particule gama emise în unitatea de timp. Menționăm că α depinde de ordinul de multipol al tranziției.

Există și o altă formă a conversiei interne și anume aceea a producerii de perechi electron - pozitron. Acest fenomen se produce când energia de dezintegrare este mai mare decât $2m_e c^2 = 1,02 \text{ MeV}$. Un exemplu este dezintegrarea ^{16}O din starea $6,06 \text{ MeV}$ (0^+) în starea fundamentală (0^+). Regulile de selecție interzic apariția unei tranziții în care să apară

un foton. Tranzițiile $0^+ \rightarrow 0^+$ nu pot avea loc decât printr-un proces de conversie internă sau dacă energia este suficientă pentru apariția unei perechi electron-pozitron. Pentru tranziția $0 \rightarrow 0$ cu schimbarea parității cel mai probabil mod de realizare este acela în care are loc emisia a două particule γ , E_1 și M_1 .

Bibliografie

- [1] B. H. Bransden, C. J. Joachain, *Fizica atomului și moleculei*, (traducere din limba engleza), Editura Tehnică, București, 1998
- [2] B. H. Bransden, *Introducere în mecanica cuantică*, (traducere din limba engleza), Editura Tehnică, București, 1995
- [3] Bena Rodica-Eleonora , *Fizică cuantică*, Editura Credis, București, 2001
- [4] Cornelia Moțoc, *Fizică vol I, II*, Editura All, București, 1996
- [5] Constantin Vrejoiu, *Electrodinamică și teoria relativității*, Editura didactică și pedagogică, București, 1993
- [6] Eugen Hecht, *Optics*, Adison-Wesley, 1998
- [7] K. Heyde, *Basic Ideas and Concepts in Nuclear Physics*, IOP Publishing, Ltd. 1994
- [8] Feynmann R., *Fizică Modernă, Vol I, II,III (traducere din limba engleză)*, Editura Tehnică, București, 1970
- [9] N. Kalitéevski, *Optiqué ondulatoire*, Édition Mir, Moscou, 1970
- [10] L. Landau, E. Lifchitz, *Mécanique quantique*, Édition Mir, Moscou, 1967
- [11] K. N. Muhin, *Fizică nucleară experimentală*, (traducere din limba rusă), Editura Tehnică, București, 1981
- [12] G. Moasil, *Fizica pentru ingineri Vol II*, Editura Tehnică, București, 1967

- [13] I. M. Popescu, *Fizică, Vol. I, II*, Editura Didactică și Pedagogică, București, 1982
- [14] Paul Sterian, Mircea Stan, *Fizică*, Editura Didactică și Pedagogică, București, 1985
- [15] S. Sivoukhine, *Physique atomique et nucléaire*, Édition Mir, Moscou, 1986
- [16] T. Crețu, *Fizică*, Editura Tehnică, București, 1996
- [17] Viorica Florescu , *Cuantică*, București, 1979
- [18] S. Țițeica, *Mecanică Cuantică*, Editura Academiei Române, București, 1984