CURSUL 4

ELEMENTE FUNDAMENTALE DE FIZICĂ CUANTICĂ

4.1 **INTRODUCERE**

Teoria cuantică a apărut în primul sfert al secolului XX ca o necesitate a soluţionării, cel puţin parţiale, a unui bagaj imens de întrebări, dobândit în urma cercetărilor experimentale şi ale căror răspunsuri nu puteau fi găsite în spiritul doctrinei fizicii clasice.

Astfel, pentru a explica radiaţia *cavităţii corp negru*, s-a impus o idee cu totul neobişnuită, la acea vreme, exprimată prin *ipoteza cuantelor*, emisă de ***Planck***, în 1900; efectul fotoelectric a presupus *ipoteza fotonilor*, introdusă de ***Einstein***, în 1905; ***Bohr***, în 1913, enunţă celebrele *postulate*, pentru a interpreta spectrele de linii emise de atomi; ***Sommerfeld***, în 1915, introduce *condiţiile de cuantificare* pentru a explica comportarea atomilor aflaţi în câmpuri externe; *principiul de corespondenţă*, introdus de Bohr, a stat la baza unor analogii între teoriile clasică şi cuantică, permiţând extragerea unor informaţii noi despre intensităţile şi polarizarea liniilor spectrale emise de atomi şi ca o împăcare a doctrinelor ondulatorie şi corpusculară, filosoful şi fizicianul francez ***Louis Victor de Broglie*** introduce *unda asociată* oricărei microparticule cuantice, ce avea să ducă la *teoria dualismului undă-corpuscul*. Toate aceste *concepte noi* au reuşit fie să explice unele rezultate experimentale anterioare introducerii lor (radiaţia corpului negru, frecvenţele liniilor spectrale emise de atomi, efectul fotoelectric), fie să impună confirmări experimentale ulterioare (experienţele *Franck-Hertz*, în 1914, experienţele *Stern-Gerlach*, efectuate în 1921 şi 1922, efectul *Compton*, în 1923, experienţele *Davisson şi Germer*, în 1927,etc.). Se impunea, aşadar, elaborarea uneinoi discipline fizice, care să se dezvolte în baza acestor noi concepte şi care să constituie o teorie coerentă asupra legilor fundamentale ce guvernează comportarea lumii microscopice, definită de microsisteme, cum ar fi particulele elementare, nucleele atomilor, atomii, moleculele sau, într-o oarecare măsură, sistemele atomice mai mari, ca de exemplu cristalele.

Astfel, a apărut ***fizica cuantică***, cu componentele sale de bază: *mecanica cuantică, teoria cuantică asupra substanţei şi radiaţiei, teoria cuantică a câmpului electromagnetic, teoria cuantică relativistă a electronului, electrodinamica cuantică*.

* ***Mecanica cuantică*** a fost organizată ca o disciplină nouă, prin preluarea vechii teorii a cuantelor de către ***Max Born, Werner Heisenberg, Paul Jordan şi Paul A. M. Dirac***. În urma unei analize critice a teoriei cuantelor, s-a adoptat şi dezvoltat punctul de vedere al lui Heisenberg, conform căruia *într-o teorie fizică este necesar să se considere mărimile fizice observabile, cele neobservabile pot lipsi*. Au fost puse, astfel, bazele ***mecanicii cuantice matriceale***.

* În aceeaşi perioadă, fizicianul austriac ***Erwin Schrödinger*** generalizează noţiunea de *undă asociată*, stabilind o ecuaţie de *propagare* a *undei de Broglie*, punând astfel bazele ***mecanicii cuantice ondulatorii***.

* Tot ***Schrödinger*** arată, în 1926, că *mecanica cuantică ondulatorie şi mecanica cuantică matriceală sunt formulări echivalente ale unei teorii cuantice generale*. Ideea este preluată de ***P. A. M. Dirac*** care elaborează, între anii 1927-1930, ***formalismul general al teoriei cuantice***. Apare, astfel, ***teoria cuantică nerelativistă a particulelor materiale.***

* Interacţia sistemelor de particule materiale cu câmpul electromagnetic, în aproximaţia nerelativistă, a fost tratată în cadrul unui ansamblu teoretic coerent, alcătuit din teoria cuantică nerelativistă a particulelor materiale, completată cu teoria cuantică a câmpului electromagnetic şi se datorează, de asemenea, fizicienilor ***P.A.M. Dirac, P. Jordan, W. Pauli, M. Born, W. Heisenberg şi Niels Bohr***, ultimii trei ocupându-se, în special, de interpretarea acestei teorii şi de coerenţa ei internă.

Anul 1928 a marcat elaborarea, de către Dirac, ***a teoriei cuantice relativiste a electronului***, preluată mai târziu de ***Richard Feynman***, pe de o parte, şi de ***J. Schwinger*** şi ***S. Tomonaga***, pe de altă parte, care expun două formulări exchivalente (echivalenţa a fost demonstrată de ***A. Dyson***) ale ***electrodinamicii cuantice***.

Caracteristica fundamentală a fizicii cuantice constă în faptul că este o teorie esenţial statistică, în cadrul căreia statistica nu se aplică numai ansamblului de microparticule, ci şi fiecăreia dintre particulele elementare.

Într-adevăr, ***Max Born*** a arătat prima oară că *unda asociată de Broglie reclamă o interpretare statistică*. De exemplu, fotonul ajuns la suprafaţa de separaţie a două medii, ori se reflectă, ori se refractă. În cazul fasciculului de lumină însă, numărul fotonilor este foarte mare, astfel că o fracţiune din acest număr se va reflecta, în timp ce o altă fracţiune se va refracta, *fără a putea însă specifica ce se întâmplă cu fiecare foton în parte*. Concluzia care se desprinde din acest exemplu este că *afirmaţiile asupra comportării particulelor cuantice nu pot avea decât caracter statistic*.

4.2. SISTEM CUANTIC, OBSERVABILE, MĂSURARE, SEMNIFICAŢIA FUNCŢIEI DE UNDĂ Ψ

Vom înţelege prin ***sistem cuantic*** *"un ansamblu de particule cuantice*", în sensul definiţiei enunţate în capitolul anterior. Sistemele cuantice cele mai uzuale sunt alcătuite din particule elementare, nuclee, protoni, fotoni, neutroni, electroni, atomi, molecule, etc. Toate acestea sunt ***microparticule*** sau ***particule cuantice***, pentru care ***starea***, în sensul clasic al cunoaşterii concomitente a tuturor coordonatelor şi impulsurilor, şi-a pierdut semnificaţia, în virtutea relaţiilor Heisenberg, care afirmă imposibilitatea principială de a determina simultan, cu precizie oricât de mare, orice pereche de variabile canonic conjugate: coordonată-impuls, energie-timp, etc. În mecanica cuantică, numărul mărimilor ce pot fi definite simultan este mult redus, comparativ cu mecanica clasică. Mărimile fizice simultan măsurabile se numesc ***compatibile***. Numim ***sistem complet de mărimi fizice*** *un ansamblu de mărimi fizice compatibile (simultan măsurabile), în care nici o altă mărime fizică nu poate avea, în starea cuantică respectivă, o valoare determinată, cu excepţia cazului în care aceasta ar fi exprimată printr-o funcţie de celelalte mărimi compatibile*.

Raportarea unei stări cuantice la un sistem complet de mărimi fizice defineşte o ***descriere completă a stării***.

Operaţia de ***măsurare*** a unei mărimi fizice presupune un proces de *observaţie*, care reprezintă *procesul obiectiv de interacţie între obiectul observat şi aparatul de măsură*. Ca rezultat al acestei interacţiuni, în general, starea iniţială a obiectului considerat se perturbă şi - spre deosebire de fizica clasică, în care se presupune că această perturbare poate fi redusă oricât de mult sau chiar compensată, deci apare ca o *perturbaţie controlabilă* - în cazul sistemelor cuantice, aparatul de măsură induce în sistemul observat o *perturbaţie necontrolabilă*, care în virtutea relaţiilor Heisenberg nu poate fi redusă oricât. Această operaţie nu se poate realiza decât prin iluminarea obiectului respectiv cu un flux de fotoni, care va conduce la trecerea sistemului fizic observat într-o stare nouă, în care fiecare mărime fizică măsurabilă are o valoare determinată.

O asemenea stare se numeşte ***stare proprie a sistemului cuantic***, în raport cu sistemul complet de mărimi fizice sau ***stare proprie a sistemului complet de mărimi fizice***. Prin măsurarea simultană a mai multor mărimi fizice, ce definesc starea proprie a unui sistem complet de mărimi fizice, starea rămâne nemodificată, obţinându-se rezultate certe. *Valorile obţinute prin măsurarea mărimilor fizice ale unui sistem complet se numesc* ***valori proprii*** ale mărimilor măsurate. Corespondenţa între starea proprie şi setul de valori proprii asociat acesteia este biunivocă, starea proprie putând fi identificată prin setul de valori proprii rezultate în urma măsurării mărimilor fizice ce definesc sistemul complet al stării respective.

Numim ***observabilă*** a unui sistem cuantic *o mărime fizică măsurabilă printr-o operaţie convenabilă şi reproductibilă* (coordonata, impulsul, energia, momentul cinetic, etc.). Conform ipotezei lui de Broglie, *fiecărei microparticule aflate în mişcare, cu impulsul* $\vec{p}$ *, i se poate asocia o undă cu lungimea de undă* $\lambda = \frac{h}{p}$.

Dacă se presupune că unda asociată este undă armonică plană, funcţia de undă ce o descrie are forma (3.7):

$$\psi\left(\vec{r},t\right) = A\,exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(Et - \vec{p}\,\vec{r}\right)\right]$$

depinzând, în general, de timp şi de coordonate, *fiind o funcţie continuă, uniformă, mărginită şi cu derivate parţiale continue*. În cazul unui ansamblu de microparticule se poate defini o funcţie de undă globală, ce depinde de timp şi de coordonatele tuturor particulelor din sistem. Intensitatea I a undei asociate este - aşa cum ştim din Vol. I - proporţională cu $|\psi|^2 = A^2$ şi este funcţie de punctul geometric din spaţiu. Considerând un element de volum *dV*, în interiorul acestuia intensitatea este practic constantă. În acest caz, energia *dW*, conţinută în *dV*, este proporţională cu *I* şi cu *dV*, adică

$$dW \approx |\psi|^2 dV$$

Pe de altă parte *dW* este proporţională şi cu numărul *dN* de particule, care la rândul său, este proporţional cu *d***P**, probabilitatea ca o particulă să se găsească în *dV* şi, că ţinând seama aceasta este proporţională cu *dV*, rezultă că $|\psi|^2 dV \approx \mathbf{P}\, dV$, **P** fiind ***densitatea de probabilitate de localizare a particulei în orice domeniu din spaţiu***. Rezultă:

$$|\psi|^2 = k\,\mathbf{P} \qquad (4.1)$$

Max Born a considerat ***k=1***, rezultând astfel că *în mecanica cuantică densitatea de probabilitate de localizare a unei particule în spaţiu este egală cu modulul pătrat al funcţiei de undă*. Această constatare exprimă semnificaţia funcţiei de undă. În virtutea relaţiei (4.1), rezultă că probabilitatea de a localiza microparticula într-un volum finit *V* se obţine prin integrare:

$$\mathbf{P} = \int_V |\psi|^2 dV \qquad (4.2)$$

iar dacă *V* este volumul total al sistemului fizic considerat, particula sigur se va găsi undeva în interiorul volumului *V* şi

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1 \qquad (4.3)$$

Această relaţie reprezintă ***condiţia de normare a funcţiei de undă***, care pentru a se putea scrie presupune ca *funcţia de undă să fie integrabilă în modul pătrat*.

Deducem, astfel, că *în fizica cuantică, funcţiile de undă se aleg dintre funcţiile continue, uniforme, mărginite şi integrabile în modul pătrat.*

O proprietate care deosebeşte sistemele cuantice de cele clasice constă în aceea că *dacă un sistem cuantic se poate afla într-o succesiune de stări, descrise de funcţiile de undă* $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_n$*, sistemul se poate afla cu o anumită probabilitate şi în starea descrisă de o funcţie de undă* ψ*, care este o combinaţie liniară a acestora*

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \psi_i \tag{4.4}$$

în care c_i sunt coeficienţi complecşi, ce pot depinde, în general, de timp. Această proprietate exprimă ***principiul suprapunerii stărilor***, care pentru a fi respectat presupune ca funcţiile de undă să definească matematic o structură de spaţiu liniar, care în conformitate cu (4.3), să fie şi normat, adică *funcţiile de undă aparţin* ***spaţiilor Hilbert***.

Orice funcţie de undă se poate defini fie pe mulţimea coordonatelor (*spaţiul configuraţiilor*), fie pe mulţimea componentelor impulsurilor (*spaţiul impulsurilor*). Conform principiului suprapunerii stărilor se poate afirma că *funcţia de undă* ψ *trebuie să reprezinte o combinaţie liniară a tuturor funcţiilor proprii* $\{\psi_k\}$ *ale sistemului complet de mărimi fizice*, corespunzând seturilor de valori proprii ce pot fi obţinute cu o probabilitate nenulă, în cadrul operaţiei de măsurare. Deducem, astfel, că *în expresia (4.4), sumarea se realizează pentru toate funcţiile de undă* $\{\psi_k\}$ *ale sistemului complet de mărimi fizice*. Altfel spus, *relaţia (4.4) reprezintă dezvoltarea unei funcţii de undă* ψ *oarecare, după funcţiile de undă proprii ale sistemului complet de mărimi fizice care definesc stările cuantice*.

Pentru a ilustra principiul suprapunerii stărilor vom încerca să identificăm starea iniţială a unui foton ce a pătruns într-un nicol, al cărui plan principal face un unghi α oarecare cu planul de oscilaţie al undei electrice.

Dacă fotonul ar fi polarizat după o direcţie paralelă cu raza extraordinară, intensitatea luminii conţinute în el ar fi dirijată în întregime pe direcţia acestei axe: $I_e = I$ şi $I_0 = 0$. În mod analog, dacă fotonul s-ar găsi exclusiv în acea stare de polarizare, în care ar urma drumul undei ordinare, ar trebui să avem cu certitudine $I_0 = I$ şi $I_e = 0$. Cum dincolo de nicol, fotonul există oricare ar fi unghiul α, rezultă că vom fi obligaţi să considerăm că, înainte de a pătrunde în nicol, fotonul se afla *parţial* în prima stare de polarizare şi *parţial* în a doua sau, mai sugestiv ar fi, să admitem că, înainte de intrarea în nicol, fotonul se găseşte într-o ***stare hibridă***, rezultată din suprapunerea celor două stări, prima intrând cu ponderea $\cos^2\alpha$, iar a doua cu ponderea $\sin^2\alpha$.

Concluzia este că *sistemele cuantice posedă o particularitate, fără analog clasic, putându-se afla în stări rezultate prin suprapunerea altor stări, într-o infinitate de combinaţii ale ponderilor*. De remarcat că nicolul obligă fotonul să treacă într-una din stările ce intrau în componenţa stării iniţiale hibride. Cu alte cuvinte, interacţiunea cu aparatul de măsură a obligat sistemul să-şi aleagă una din stările componente ale stării iniţiale. *Aceste stări care compun starea iniţială şi pe care sistemul le dobândeşte ca rezultat al intervenţiei măsurării, se numesc* ***stări proprii****. Teoria nu poate preciza în care stare proprie va trece sistemul în urma interacţiei cu aparatul de măsură, însă poate estima probabilitatea de realizare a saltului într-una din stările proprii*.

Aşa cum în mecanica clasică starea mecanică a sistemului se defineşte în raport cu un anumit referenţial şi în mecanica cuantică, starea aleasă de sistemul cuantic pentru a poposi după măsurare, va fi determinată numai în raport cu un anumit montaj experimental de referinţă. Fiecare montaj experimental evidenţiază un şir de stări proprii ale sistemului cuantic, *probabilitatea ca două montaje experimentale socotite identice să trimită sistemul cuantic în aceeaşi stare proprie fiind foarte mică, dacă nu chiar nulă*.

Aşadar, formalismul matematic adecvat mecanicii cuantice va trebui să ia în considerare următoarele concluzii, care alcătuiesc *sinteza bazei experimentale a teoriei cuantice*:

- evoluţia sistemelor cuantice poate fi analizată numai statistic;
- orice stare a unui sistem cuantic trebuie concepută ca fiind realizată prin suprapunerea, într-o infinitate de moduri, a unor alte stări, în care sistemul poate ajunge ca rezultat al perturbaţiilor induse de interacţia acestuia cu aparatul de măsură.

4.3 FORMALISMUL MATEMATIC AL MECANICII CUANTICE

Aşa cum, de altfel, am avut prilejul să constatăm, legile de mişcare ale microparticulelor diferă fundamental de legile de mişcare ale corpurilor macroscopice, motiv pentru care *mecanica cuantică va trebui să-şi dezvolte propriul formalism matematic, cu caracter esenţial statistic, după o logică cât mai apropiată de aceea prin care s-a impus fizica clasică, însă într-o perfectă coerenţă şi compatibilitate cu observaţiile experimentale şi consecinţele rezultate din considerente statistice*. În plus, *acest nou formalism matematic va trebui să utilizeze mărimi care să opereze cu singularităţile introduse de prezenţa microparticulelor în domeniile de interes.*

4.3.1. OPERATORI

Să considerăm un sistem cuantic pe care îl vom supune observaţiei. Convenim să notăm o stare anume a sistemului printr-o literă - eventual indiciată - inclusă în semiparanteza $| \;\rangle$. În această accepţiune vom presupune că sistemul cuantic vizat se află iniţial în starea $|\boldsymbol{u_0}\rangle$ şi intenţionăm să-i observăm o anumită variabilă dinamică (o coordonată, o componentă a momentului cinetic, energia, o componentă a impulsului, etc.), pe care o notăm A şi pentru care va fi necesară o măsurare notată simbolic A . Această operaţie va perturba sistemul şi, drept urmare, acesta va efectua un salt în starea sa proprie $|\boldsymbol{u_A}\rangle$. În continuare vom efectua o nouă observaţie B pentru a estima o nouă variabilă dinamică B. Sistemul va suferi un nou salt, trecând în starea $|\boldsymbol{u_{BA}}\rangle$. Vom nota simbolic prin BA ansamblul operaţiilor efectuate în ordinea A,B. Vom dori, în continuare, să estimăm variabilele A şi B, în ordine inversă, pornind cu aceeaşi stare iniţială $|\boldsymbol{u_0}\rangle$ şi vom constata că starea $|\boldsymbol{u_{AB}}\rangle$ diferă, în general, de starea $|\boldsymbol{u_{BA}}\rangle$ ceea ce înseamnă că

$$\boldsymbol{AB \neq BA.} \tag{4.5}$$

Ajungem astfel la concluzia că *va trebui să asociem acestor observaţii operaţii matematice care să îndeplinească o serie de condiţii*:

- să opereze asupra stării iniţiale $|\boldsymbol{u_0}\rangle$ de aşa manieră ca, în urma efectuării operaţiei A, sistemul cuantic să dobândească starea proprie $|\boldsymbol{u_A}\rangle$;
- aplicarea succesivă a operaţiilor A şi B să depindă de ordinea în care s-au efectuat, adică să conducă, în general, la stări proprii diferite;
- să satisfacă condiţia de liniaritate impusă de principiul suprapunerii stărilor;
- să realizeze o corespondenţă între mulţimea observaţiilor ce urmăresc estimarea valorilor asociate variabilelor dinamice într-o stare dată şi mulţimea numerelor reale.

Toate aceste condiţii sunt satisfăcute de ***operatorii liniari***.

4.3.2. OPERATORII LINIARI.

*Numim **operator** o operaţie matematică, notată simbolic cu o literă marcată superior cu semnul* $\wedge$ *, ce se aplică unei funcţii* $\boldsymbol{\psi}$ *, având ca rezultat o altă funcţie* $\boldsymbol{\varphi}$*, de aceeaşi natură*. Astfel, expresia matematică

$$\boldsymbol{\varphi = \hat{F}\,\psi} \tag{4.6}$$

exprimă faptul că funcţiei ψ i-a fost aplicat operatorul $\hat{F}$, obţinându-se ca rezultat funcţia φ, depinzând de aceleaşi variabile ca şi funcţia ψ.Expresiile operatorilor conţin, în general, numere complexe. Cea mai importantă clasă de operatori o constituie *operatorii liniari*, folosiţi în mecanica cuantică datorită compatibilităţii modului în care ei operează asupra funcţiilor cu principiul suprapunerii stărilor. În acest sens, dacă ψ_1 şi ψ_2 sunt două funcţii, iar c_1 şi c_2 două constante complexe, *vom înţelege prin* ***operator liniar*** *un operator* $\hat{A}$ *care satisface condiţia numită* ***de liniaritate***:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2 \tag{4.7}$$

Printre operatorii liniari curent folosiţi se numără *operatorul de derivare, operatorul multiplicativ, laplaceianul, integrala*, etc., care operează în baza relaţiilor:

* $$j_1 = \left(\frac{d}{dx}\right)\psi = \frac{d\psi}{dx} \tag{4.8}$$

* $$j_2 = \hat{X}\psi = X\psi \tag{4.9}$$

* $$j_3 = \Delta\psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) \tag{4.10}$$

* $$j_4 = \left(\int ....dx\right)\psi(x) = \int \psi(x)dx \tag{4.11}$$

Condiţia de liniaritate este satisfăcută şi de alţi doi operatori particulari: ***operatorul identic*** sau ***unitate***, *ce lasă funcţia nemodificată* $\hat{I}\psi = \psi$ şi ***operatorul nul*** ,$\hat{0}\psi = 0$. Introducem următoarele operaţii cu operatori:

- ***suma (diferenţa) a doi operatori***: $\left(\hat{A} \pm \hat{B}\right)\psi = \hat{A}\psi \pm \hat{B}\psi$

  Se constată că această operaţie este *comutativă* şi *asociativă*.
- ***produsul*** a doi operatori *este un operator ce se obţine prin aplicarea succesivă a celor doi operatori, conform relaţiei*:

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right) \tag{4.12}$$

Produsul operatorilor este *asociativ* şi *distributiv* faţă de sumă (diferenţă).

$$\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}\right)=\left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C} \tag{4.13}$$

$$\hat{A}\left(\hat{B}\pm\hat{C}\right)=\hat{A}\hat{B}\pm\hat{A}\hat{C} \tag{4.14}$$

Nu este însă întotdeauna comutativ.

$$\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A} \tag{4.15}$$

Se verifică uşor că *produsul a doi operatori liniari este tot un operator liniar.*

- ***înmulţirea operatorului cu o constantă***:

$$c\left(\hat{A}\psi\right)=\left(c\hat{A}\right)\psi \tag{4.16}$$

Se defineşte ***comutatorul*** $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ ***a doi operatori*** $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ prin relaţia:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \tag{4.17}$$

iar *operatorii* $\hat{A}$ *şi* $\hat{B}$ *care satisfac relaţia* $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$ se numesc ***anticomutativi***. Din definiţia (4.17) rezultă câteva proprietăţi ale comutatorului:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=-\left[\hat{B},\hat{A}\right]$$

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

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

$$\left[\hat{A},\left[\hat{B},\hat{C}\right]\right]+\left[\hat{B},\left[\hat{C},\hat{A}\right]\right]+\left[\hat{C},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0$$

În sfârşit, ***puterile operatorilor*** se definesc în corelaţie cu produsul operatorilor:

$$\hat{A}^{n}\equiv\underbrace{\hat{A}\left(\hat{A}\left(\hat{A}\ldots\left(\hat{A}\psi\right)\right)\right)}_{\hat{A}\ \text{aplicat de n ori}} \tag{4.18}$$

4.3.3. VALORI ŞI FUNCŢII PROPRII ALE OPERATORILOR LINIARI

În mecanica cuantică întâlnim frecvent situaţia în care prin aplicarea operatorului $\hat{F}$ funcţiei ψ se obţine ca rezultat o funcţie de λ ori mai mare decât funcţia ψ iniţială:

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi \tag{4.19}$$

Printre aceste funcţii vom identifica o clasă de funcţii $\psi(q)$, definite pe tot domeniul de variaţie al variabilelor independente:

- în coordonate carteziene funcţia ψ să fie definită între $-\infty$ şi $+\infty$, pentru fiecare dintre variabilele x, y sau z.
- în coordonate sferice r, θ, φ, funcţia ψ să fie definită pe domeniul pentru care $r \in [0,\infty]; \theta \in [0,\pi]$, iar $\varphi \in [0,2\pi]$.
- în plus, *se impune ca funcţia ψ să fie* ***uniformă***:

$$\psi(\theta) = \psi(\theta + k \cdot 2\pi).$$

Condiţiile de mărginire, uniformitate şi continuitate impuse funcţiei pe întreg domeniul de valori al variabilelor independente au fost numite ***condiţii standard***. Pentru ca funcţia ψ să fie o funcţie de undă, pe lângă condiţiile standard va trebui ca $|\psi|^2$ să definească o densitate de probabilitate de localizare, adică *funcţia ψ să fie de pătrat integrabil.*

O astfel de funcţie care, în plus, satisface şi ecuaţia (4.19) se numeşte ***funcţie proprie a operatorului*** $\hat{F}$, *iar numărul* λ, ***valoare proprie asociată funcţiei proprii*** ψ.

Dacă funcţia ψ satisface condiţiile standard şi relaţia (4.19), *fără însă a fi de pătrat integrabil* se va numi ***funcţie proprie generalizată*** a operatorului $\hat{F}$, iar λ, ***punct al spectrului continuu*** al acestui operator. În sfârşit, *dacă funcţia ψ satisface relaţia (4.19), însă nu îndeplineşte condiţiile standard,ea nu va mai fi o funcţie proprie generalizată, iar λ nu va mai aparţine spectrului operatorului* $\hat{F}$.

Mulţimea valorilor proprii şi a punctelor spectrului continuu ale operatorului $\hat{F}$ formează ***spectrul*** *operatorului $\hat{F}$. În acest sens, valorile proprii definesc un* ***spectru discret****, iar valorile λ, a căror variaţie continuă asigură funcţiilor ψ din (4.19) condiţiile standard, definesc un* ***spectru continuu***.

4.3.4. OPERATORII HERMITICI (AUTOADJUNCŢI)

Fiecărui operator liniar $\hat{F}$ i se asociază un operator liniar $\hat{F}^{+}$ ***conjugatul complex*** al lui $\hat{F}$, $\hat{F}^{+} = \left(\hat{F}\right)^{*}$ ce satisface condiţia

$$\int \psi^{*} \hat{F} \varphi dX = \int \left(\hat{F}^{+} \psi \right)^{*} \varphi dX \qquad (4.20)$$

în care s-a notat cu $dX = dX_1 dX_2 ...$, integrarea extinzându-se pe întreg domeniul variabilelor independente $X_1, X_2, ...$. Şi în această relaţie *se impune ca funcţiile* φ *şi* ψ *să fie de pătrat integrabil.*

Dacă $\hat{F}^{+} = \hat{F}$, operatorul $\hat{F}$ se numeşte ***hermitic*** sau ***autoadjunct***.

- Vom demonstra *că un astfel de operator admite valori proprii reale*. Mai întâi, vom observa că egalitatea (4.20) devine în cazul unui operator $\hat{F}$ hermitic

$$\int \psi^{*} \hat{F} \varphi dX = \int \left(\hat{F} \psi \right)^{*} \varphi dX \qquad (4.21)$$

Considerăm o funcţie proprie φ a operatorului hermitic $\hat{F}$. $\hat{F} \varphi = \lambda \varphi$

apoi, în baza hermiticităţii operatorului $\hat{F}$ şi a relaţiei (4.20), putem scrie:

$$\int \psi^{*} F \varphi dX = \int \varphi^{*} F \varphi dX = \lambda \int \varphi^{*} \varphi dX$$

$$\int \left(\hat{F} \psi \right)^{*} \varphi dX = \int \left(\hat{F} \varphi \right)^{*} \varphi dX = \lambda^{*} \int \varphi^{*} \varphi dX$$

În baza relaţiei (4.21), membrii din stânga acestor egalităţi sunt egali, astfel că se obţine $\lambda = \lambda^{*}$ *relaţie care arată că* λ *este real*.

- Vom demonstra acum că *produsul* $\hat{F}\hat{G}$ *a doi operatori hermitici comutativi, este hermitic*.Într-adevăr,

$$\int \psi^{*} \hat{F} \hat{G} \varphi dX = \int \psi^{*} \hat{F} \left(\hat{G} \varphi \right) dX$$

şi întrucât $\hat{F}$ şi $\hat{G}$ sunt hermitici,

$$\int \psi^* \hat{F}(G\varphi)dX = \int \left(\hat{F}\psi\right)^* \hat{G}\,\varphi\, dX = \int \left(\hat{G}\,\hat{F}\,\psi\right)^* \varphi\, dX$$

Pe de altă parte, $\hat{F}$ şi $\hat{G}$ comută, deci:

$$\int \psi^* (\hat{F}\,\hat{G})\varphi\, dX = \int [(\hat{F}\,\hat{G})\psi]^* \varphi\, dX$$

ceea ce era de demonstrat.

Considerăm un şir de funcţii reale $u_1(x), u_2(x),...$ *integrabile* şi *de pătrat integrabil* pe un domeniu finit $a<x<b$ sau infinit. Vom numi ***produs scalar*** a două dintre funcţiile şirului relaţia:

$$(u_m, u_n) = \int_a^b u_m(x) u_n(x) dx \qquad (4.22)$$

Dacă produsul scalar a două funcţii este nul, funcţiile se numesc ***ortogonale***. Dacă *în plus*,

$$\int_a^b u_n^2(x) dx = 1 \qquad \forall n = 1, 2, 3,... \qquad (4.23)$$

şirul funcţiilor $\{u_k\}$ *se numeşte ortonormat, iar condiţia (4.23) se numeşte* ***condiţie de normare***. În cazul *când şirul* $\{u_k\}$ *este alcătuit din funcţii complexe, condiţia de normare devine*: $\int_a^b |u_n|^2 dx = 0$ *iar cea de ortogonalitate*

$$\int_a^b u_m^*(x) u_n(x) dx = 0 \qquad m \neq n$$

- *Dacă* $u_1, u_2,..., u_n,...$ *este un şir de funcţii proprii ale unui operator hermitic care admit valori proprii distincte, aparţinând unui spectru discret, două funcţii oarecare ale acestui şir sunt reciproc ortogonale.*

  Într-adevăr, prin ipoteză, avem:

$$\int u_m^* \hat{F} u_n dx = \int (\hat{F} u_m)^* u_n dx \qquad (4.24)$$

şi ecuaţiile cu valori proprii ale operatorului $\hat{F}$:

$$\begin{aligned} \hat{F} u_m &= \lambda_m u_m \\ \hat{F} u_n &= \lambda_n u_n \quad ; \ \lambda_m \neq \lambda_n \end{aligned} \qquad (4.25)$$

Introducând (4.25) în (4.24), obţinem:

$$\lambda_n \int u_m^* u_n dx = \lambda_m \int u_m^* u_n dx$$

din care

$$(\lambda_n - \lambda_m)\int u_m^* u_n dx = 0$$

şi cum $\lambda_n \neq \lambda_m$, rezultă:

$$\int u_m^* u_n dx = 0$$

4.3.5. DEGENERAREA

Există situaţii în care unei valori proprii a operatorului $\hat{F}$ îi corespund mai multe funcţii proprii, cazuri în care ne confruntăm cu o ***degenerescenţă***. În cazul degenerescenţei, funcţiile proprii nu sunt întotdeauna ortogonale, căci din relaţia $(\lambda_n - \lambda_m)\int u_m^* u_n dx = 0$ pentru $\lambda_n = \lambda_m$ poate rezulta $\int u_m^* u_n dx \neq 0$. Să considerăm un şir de n funcţii proprii $u_1, u_2, ..., u_n, ...$ ale operatorului $\hat{F}$. Spunem că aceste funcţii sunt ***liniar dependente*** dacă pentru orice valoare a variabilei independente există constantele $c_1, c_2, ..., c_n$ nu toate nule, astfel încât să avem ***combinaţia liniară*** $c_1u_1 + c_2u_2 + ... + c_nu_n = 0$. Dacă această relaţie presupune în mod necesar anularea tuturor coeficienţilor $c_1, c_2, ..., c_n$, funcţiile proprii se numesc ***liniar independente*** şi vor fi distincte.

Să presupunem, acum, că o anumită valoare proprie a operatorului $\hat{F}$, λ_n este degenerată. Există deci mai multe funcţii proprii $u_{n_1}, u_{n_2}, ..., u_{n_k}$ distincte ce corespund aceleaşi valori proprii λ_n. În acest caz, *k* se numeşte ***ordin de degenerescenţă***, însă nu totdeauna aceste funcţii proprii vor fi ortogonale. Există, totuşi, posibilitatea să construim cu aceste funcţii proprii noi funcţii proprii care să fie ortonormate, căutând coeficienţi noi care să satisfacă împreună cu noile funcţii proprii combinaţia liniară cerută pentru această operaţie. Exemplificăm acest procedeu pentru două funcţii proprii u_1, u_2, liniar independente, ale operatorului $\hat{F}$ asociate aceleiaşi valori $\lambda, \hat{F}u_1 = \lambda u_1,\ \hat{F}u_2 = \lambda_2$ cu care formăm combinaţia liniară:

$$u = c_1u_1 + c_2u_2$$

Cum u_1, u_2 sunt liniar independente această combinaţie liniară nu se va anula identic, însă va defini o nouă funcţie proprie a operatorului $\hat{F}$:

$$\hat{F}u = \hat{F}(c_1u_1 + c_2u_2) = c_1\hat{F}u_1 + c_2\hat{F}u_2 = \lambda u$$

În baza acestei constatări, deducem că funcţia $w_1 = \alpha u_1$, cu α constantă - în general complexă - va fi o nouă funcţie proprie a operatorului $\hat{F}$, ce va satisface condiţia de normare pentru o valoare α care urmează a fi precizată. Impunem aşadar condiţia de normare pentru w_1:

$$|\alpha|^2 \int u_1^* u_1 dx = 1 \qquad (4.26)$$

Obţinem $|\alpha| = \dfrac{1}{\sqrt{\int u_1^* u_1 dx}}$ şi funcţia $w_1 = \dfrac{u_1}{\sqrt{\int u_1^* u_1 dx}}$ va fi normată.

Considerăm în continuare combinaţia liniară $v = \beta w_1 + u_2$ şi căutăm valoarea lui β care să asigure ortogonalitatea funcţiilor w_1 şi v:

$$0 = \int w_1^* v dx = \beta \int w_1^* w_1 dx + \int w_1^* u_2 dx = \beta + \int w_1^* u_2 dx$$

Evident, valoarea $\beta = -\int w_1^* u_2 dx$ asigură ortogonalitatea funcţiilor v şi w_1, dar nu şi normarea funcţiei v, pe care o vom norma prin procedeul folosit pentru normarea funcţiei u_1. Rezultă, astfel, funcţia normată:

$$w_2 = \frac{v}{\sqrt{\int v_2^* v_2 dx}}$$

S-au obţinut, în acest mod - plecând de la funcţiile proprii u_1, u_2 - funcţiile w_1 şi w_2 ortogonale şi normate. În concluzie, *se poate aranja ca funcţiile proprii ale operatorilor hermitici să fie ortogonale, chiar şi în cazul degenerării, construind un număr de combinaţii liniare egal cu gradul de degenerescenţă.*

4.3.6. DEZVOLTAREA ÎN SERIE DE FUNCŢII PROPRII ORTONORMATE

O funcţie $\psi(x)$ continuă şi de pătrat integrabil poate fi dezvoltată în serie după funcţiile proprii ortonormate şi de pătrat integrabil ale unui operator hermitic care manifestă un spectru discret de valori proprii. Vom considera funcţia complexă $\psi(x)$ de pătrat integrabil şi şirul de funcţii proprii ortonormate ale unui operator hermitic $u_1(x), u_2(x), ..., u_n(x), ...$ de asemenea de pătrat integrabil, corespunzând unui spectru discret de valori proprii ale operatorului. Presupunem că funcţia $\psi(x)$ poate fi reprezentată prin seria

$$\psi(x) = c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + ... + c_n u_n(x) + ... \qquad (4.27)$$

şi că suma seriei converge către $\psi(x)$, astfel că se poate integra termen cu termen.

Coeficienţii $\{ c_k \}$ se pot calcula înmulţind relaţia (4.27) cu u_k^* şi integrând:

$$\int \psi u_k^* dx = c_1 \int u_1 u_k^* dx + c_2 \int u_2 u_k^* dx + ... \tag{4.28}$$

Ca urmare a ortonormării funcţiilor proprii, singura integrală nenulă în membrul drept este aceea care înmulţeşte pe c_k, astfel că:

$$c_k = \int \psi u_k^* dx \tag{4.29}$$

Coeficienţii c_k astfel determinaţi se numesc ***coeficienţi Fourier ai funcţiei $\psi(x)$, în raport cu sistemul ortogonal***

$$u_1(x), u_2(x), ..., u_n(x), ...$$

Întrebarea care se pune este *"cu ce eroare se aproximează funcţia $\psi(x)$, dacă se reţin în dezvoltare primii n termeni ai seriei?"*

Procedând astfel, vom scrie:

$$S_n(x) = \sum_{k=1}^{n} c_k u_k(x) \tag{4.30}$$

$$\psi(x) = S_n(x) + R_n(x) \tag{4.31}$$

în care $R_n(x)$ este eroarea produsă prin aproximarea funcţiei la o sumă finită S_n. Se consideră ca o cea mai bună aproximaţie aceea pentru care

$$\lim_{n\to\infty} \int |R_n(x)|^2 dx = \lim_{n\to\infty} |\psi(x) - S_n(x)|^2 dx = 0 \tag{4.32}$$

$$\lim_{n\to\infty} \int \left| \psi(x) - \sum_{k=1}^{n} c_k u_k(x) \right|^2 dx = 0 \tag{4.33}$$

Prin dezvoltarea integrantului se obţine:

$$\begin{aligned} \int \left| \psi - \sum_{k=1}^{n} c_k u_k \right|^2 dx &\equiv \int (\psi - \sum_{k=1}^{n} c_k u_k)(\psi - \sum_{k=1}^{n} c_k u_k)^* dx = \\ &= \int \psi^* \psi \, dx - \sum_{k=1}^{n} c_k^* \int u_k^* \psi \, dx - \sum_{k=1}^{n} c_k \int \psi^* u_k \, dx + \\ &+ \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} c_k c_l^* \int u_k^* u_l dx = \int \psi^* \psi \, dx - \\ &- 2\sum_{k=1}^{n} c_k^* c_k + \sum_{k=1}^{n} c_k^* c_k = \int \psi^* \psi \, dx - \sum_{k=1}^{n} c_k^* c_k \end{aligned} \tag{4.34}$$

adică

$$\int \left| \psi - \sum_{k=1}^{n} c_k u_k \right|^2 dx = \int |\psi|^2 dx - \sum_{k=1}^{n} |c_k|^2 \tag{4.35}$$

Rezultă pentru ***eroarea pătratică medie***:

$$\int \left| R_n(x) \right|^2 dx = \int \left| \psi(x) \right|^2 dx - \sum_{k=1}^{n} \left| c_k \right|^2 \tag{4.36}$$

Condiţia (4.32) impune condiţia:

$$\int \left| \psi \right|^2 dx = \left| c_1 \right|^2 + \left| c_2 \right|^2 + ... + \left| c_n \right|^2 + ... \tag{4.37}$$

Aşadar, *dacă* (4.37) *există, convergenţa seriei este asigurată, iar sistemul ortonormat se numeşte* ***complet*** *sau* ***închis***, denumire motivată de faptul că în baza ultimei relaţii nu se poate adăuga şirului de funcţii ortonormate $u_k(x)$ nici o altă funcţie $\varphi_k(x)$ ortogonală cu funcţiile sistemului, fără a elimina una dintre acestea, întrucât

$$\int \left| \psi \right|^2 dx = \sum_{k=1}^{\infty} \left| c_k \right|^2 = 1 \tag{4.38}$$

Această relaţie se numeşte ***"de închidere"***, "***de completitudine***" sau "***relaţia Parseval***" şi *este verificată atunci când sumarea vizează întregul spectru discret al sistemului complet.Un operator hermitic care admite un sistem complet ortonormat de funcţii proprii se numeşte* ***observabilă cuantică***.

4.4. VARIABILELE DINAMICE ÎN MECANICA CUANTICĂ. POSTULATELE MECANICII CUANTICE

Mecanica clasică numeşte ***variabilă dinamică*** mărimi cum ar fi: *coordonatele particulei, impulsul, componentele momentului cinetic, energia*.
Mecanica cuantică foloseşte aceleaşi variabile dinamice ca şi cea clasică, cărora însă *le asociază,* în baza unuia dintre postulatele fundamentale*, operatori hermitici*. Enunţăm deci ***primul postulat al mecanicii cuantice***: *"fiecărei variabile dinamice a mecanicii clasice trebuie să-i corespundă în mecanica cuantică un operator liniar hermitic."* Astfel:

- ***operatorul coordonată*** $\hat{x}$ *transformă funcţia* $\psi(x)$ *în produsul* $x\psi(x)$*;*
- expresia ***operatorului impuls*** o vom alege $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$, pentru a fi compatibilă cu ecuaţia diferenţială pe care o satisface funcţia de undă asociată microparticulei în mişcare cu impulsul $\vec{p}$;
- ***operatorul momentului cinetic*** se alege prin analogie cu definiţia clasică $\hat{\vec{L}} \equiv \frac{\hbar}{i}\hat{\vec{r}} \times \nabla$ şi scriind produsul vectorial al operatorilor $\hat{\vec{r}}$ şi ∇ sub formă

dedeterminant, se pot identifica ***operatorii proiecţiilor momentului cinetic*** $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$.Avem:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)$$
$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right) \qquad (4.39)$$
$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$$

- ***operatorul hamiltonian*** $\hat{H}$ rezultă şi el dacă se ţine seama că hamiltoniana
- clasică reprezintă suma între energia cinetică $\frac{p^2}{2m}$ şi energia potenţială $U(\vec{r})$,
- astfel că pentru acest operator se obţine expresia:

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(\vec{r}) \qquad (4.40)$$

4.4.1. VALORI PROPRII ŞI FUNCŢII PROPRII ALE OPERATORILOR CUANTICI ASOCIAŢI IMPULSULUI, MOMENTULUI CINETIC ŞI ENERGIEI.

Spre deosebire de mecanica clasică, în cadrul căreia starea sistemului fizic era definită de valorile coordonatelor şi impulsurilor, adică de nişte numere reale, *în mecanica cuantică starea sistemului cuantic (la un anumit moment) este descrisă de o funcţie complexă* care "în sine" nu are semnificaţie fizică, ci numai prin *pătratul modulului, ce reprezintă* din punct de vedere statistic*, o* ***densitate de probabilitate de localizare a microparticulei****.*

O altă deosebire fundamentală *se referă la variabilele dinamice. Acestea descriu mişcarea şi clasic şi cuantic, numai că, în timp ce clasic sunt evaluate numeric, în mecanica cuantică li se asociază mărimi abstracte - operatori liniari şi hermitici*. Corelarea valorilor numerice clasice ale variabilelor dinamice cu operatorii asociaţi se face în baza unui ***al doilea postulat al mecanicii cuantice***: *"în urma efectuării unei măsurări a observabilei* ***A****, ce caracterizează starea descrisă de funcţia proprie* ψ_i *a operatorului* $\hat{A}$ *asociat acestei observabile, se obţine cu certitudine ca rezultat valoarea proprie a operatorului hermitic* $\hat{A}$*".*

Pentru o mai bună intuire a corelării operatorilor cu valorile numerice stabilite prin măsurători, ne-am putea imagina asocierea vectorilor - entităţi matematice mai generale - cu valorile numerice ale proiecţiilor acestora, pe axele de coordonate. În timp ce vectorilor le corespund operaţii specifice, proiecţiile pe axe presupun doar operaţiile algebrice obişnuite. *În mecanica cuantică se impune, în mod curent, rezolvarea* ***ecuaţiei cu valori proprii pentru energie***

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{4.41}$$

şi, dacă se ţine seama de (4.41), se obţine forma explicită

$$-\frac{h^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi \tag{4.42}$$

Ecuaţia cu valori proprii a energiei are sens numai pentru stările numite ***staţionare****, când energia potenţială nu depinde de timp şi energia totală E se conservă*. Pentru a stabili setul de funcţii proprii ale operatorului hamiltonian se integrează această ecuaţie diferenţială de ordinul II, cu derivate parţiale şi se aleg acele soluţii care îndeplinesc condiţiile standard. *Valorile proprii ale energiei ce corespund acestor funcţii proprii alcătuiesc* ***spectrul energetic*** *al particulei, în câmpul de forţe creat de potenţialul* ***U(x, y, z).*** Acest spectru poate fi discret sau continuu. În primul caz, funcţiile proprii vor fi notate cu ψ_i, iar valorile proprii corespunzătoare cu λ_i. În cazul spectrului continuu, valoarea proprie λ apare în soluţie ca un parametru cu variaţie continuă. Vom proceda, în cele ce urmează, la o analiză sumară a ecuaţiilor cu valori proprii ale unor ***observabile cuantice fundamentale***: *impuls, moment cinetic şi energie*.

1.IMPULSUL îl vom analiza printr-o proiecţie oarecare, să zicem p_x căreia i se asociază operatorul $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. *Ecuaţia cu valori proprii* capătă forma:

$$-i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx} = p\psi(x) \tag{4.43}$$

în care $\psi(x)$ *sunt funcţiile proprii*, *iar valorile lui* ***p*** vor defini *spectrul valorilor proprii*. Ecuaţia se integrează imediat, rezultând soluţia

$$\psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{4.44}$$

în care ***A*** *este o constantă a cărei valoare se obţine impunând funcţiei* $\psi(x)$ *condiţia de normare*. De remarcat că *această soluţie este acceptabilă pentru orice valoare reală a lui* ***p***.Într-adevăr, dacă ***p*** ar avea o valoare complexă, ***p=a+ib****,* atunci din (4.44) rezultă $\psi(x) \to \infty$, pentru $x \to \pm\infty$ şi *o astfel de soluţie este inacceptabilă fizic*.

În concluzie, *spectrul valorilor proprii ale impulsului este continuu (necuantificat) şi nedegenerat, întrucât unei valori proprii* p *îi corespunde o singură funcţie proprie* $\psi(x)$.

Pentru determinarea ***constantei de normare A***, care nu depinde de x, dar care poate depinde de p, vom face apel la ***distribuţia δ a lui Dirac*** (introdusă în lucrarea *Capitole fundamentale ale fizicii clasice*, Vol.I, pag.49) şi *ţinând seama de ortonormarea funcţiilor proprii*, vom putea scrie:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,p')\psi(x,p)dx=\delta(p-p') \tag{4.45}$$

sau, în conformitate cu (4.44), $A^*(p')A(p)\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}dx=\delta(p-p')$ sau

$$A^*(p')A(p)\cdot 2\pi\hbar\delta(p-p')=\delta(p-p')$$

Ecuaţia nu se poate împărţi cu $\delta(p-p')$, întrucât *această funcţie este singulară*; integrăm după p şi ţinem seama că pentru $p\neq p'$, $\delta(p-p')=0$. Se obţine:

$$2\pi\hbar A^*(p')\int_{-\infty}^{\infty}A(p)\delta(p-p')dp=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(p-p')dp=1$$

Rezultă $2\pi\hbar\left|A(p')\right|^2=1$ din care deducem $\left|A(p')\right|=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ ceea ce echivalează cu $A(p')=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\alpha}$. *Factorul de fază* $e^{i\alpha}$ *poate fi considerat egal cu **1**, fără a implica consecinţe fizice*. Se remarcă faptul că A *nu depinde impuls*, aşa că putem scrie acum soluţia sub formă finală:

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p\cdot x} \tag{4.46}$$

2. MOMENTUL CINETIC. Definit clasic prin relaţia

$$\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}=\begin{vmatrix}\vec{i} & \vec{j} & \vec{k}\\ x & y & z\\ p_x & p_y & p_z\end{vmatrix} \tag{4.47}$$

momentul cinetic va fi descris de un operator hermitic $\hat{\vec{L}}$, în legătură cu care *se* *definesc* ***operatorii proiecţiilor momentului cinetic*** *pe axe*, conţinuţi în relaţiile (4.39): $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$; $\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$; $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ şi ***operatorul pătratului momentului cinetic***

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{4.48}$$

Vom aborda analiza ecuaţiilor cu valori proprii pentru aceşti operatori în coordonate sferice:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi; \quad y = r\cos\theta\cos\varphi; \quad z = r\cos\theta \tag{4.49}$$

sau, invers:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}; \quad \theta = \arccos\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}; \quad \varphi = arctg\frac{y}{x} \tag{4.50}$$

în cadrul căreia $r \in [0,\infty)$; $\theta \in [0,\pi]$; $\varphi \in [0,2\pi]$.

Considerăm funcţia $\psi = \psi(x, y, z)$:

$$d\psi = \frac{\partial\psi}{\partial x}dx + \frac{\partial\psi}{\partial y}dy + \frac{\partial\psi}{\partial z}dz \tag{4.51}$$

Avem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} &= \frac{\partial\psi}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\cdot\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\cdot\frac{\partial z}{\partial\varphi} = \\ &= -\frac{\partial\psi}{\partial x}r\sin\theta\sin\varphi + \frac{\partial\psi}{\partial y}r\sin\theta\cos\varphi = x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x} \end{aligned} \tag{4.52}$$

În baza relaţiei (4.48), putem observa că:

$$\hat{L}_z\psi = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial Y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) \tag{4.53}$$

sau, încă:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{4.54}$$

Calculăm $\dfrac{\partial\psi}{\partial\theta}$:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = ctg\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} + y\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) - tg\theta\cdot z\cdot\frac{\partial\psi}{\partial z} \tag{4.55}$$

Relaţiile anterioare ne permit să observăm că:

$$\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\psi = \hbar\left[iz\frac{\partial\psi}{\partial y} + z\frac{\partial\psi}{\partial x} - (x + iy)\frac{\partial\psi}{\partial z}\right] \tag{4.56}$$

Remarcând că

$$x+iy=r\,sin\,\theta(cos\,\varphi+i\,sin\,\varphi)=re^{i\varphi}\,sin\,\theta \tag{4.57}$$

şi $z=r\,cos\theta$, calculăm

$$\left(\hat{L}_x+i\,\hat{L}_y\right)\psi=\hbar e^{i\varphi}\left(ire^{-i\varphi}\,cos\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial y}+re^{-i\varphi}\,cos\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial x}-r\,sin\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)=$$

$$=\hbar e^{i\varphi}\left[i(x-iy)ctg\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial x}+(x-iy)ctg\,\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x}-r\,sin\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\right]=$$

$$=\hbar e^{i\varphi}\left[ctg\,\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}+y\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)-tg\,\theta\cdot z\cdot\frac{\partial\psi}{\partial z}+ictg\,\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y}-y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right]$$

în care folosim relaţia(4.55),obţinând pentru operatorul sumă $\hat{L}_x+i\,\hat{L}_y$ expresia:

$$\hat{L}_x+i\,\hat{L}_y=\hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}+ictg\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{4.58}$$

În mod analog, găsim expresia diferenţei

$$\hat{L}_x-i\,\hat{L}_y=-\hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-ictg\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{4.59}$$

Scriem apoi că

$$\begin{aligned}\hat{L}^2&=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2=\frac{1}{2}\left(\hat{L}_x+i\,\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x-i\,\hat{L}_y\right)+\\&+\frac{1}{2}\left(\hat{L}_x-i\,\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x+i\,\hat{L}_y\right)+\hat{L}_z^2\end{aligned} \tag{4.60}$$

şi ţinem seama de relaţiile (4.54), (4.58) şi (4.59). Se obţine:

$$\left(\hat{L}_x+i\,\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x-i\,\hat{L}_y\right)\psi=$$

$$=-\hbar^2e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+ictg\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left\{e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta}-ictg\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right)\right\}=$$

$$=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}+ctg\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}+ctg^2\theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+i\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right)$$

Procedând analog, rezultă: $\left(\hat{L}_x-i\,\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x+i\,\hat{L}_y\right)\psi=$

$$=-\frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}+ctg\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}+ctg^2\theta\frac{\partial^2\psi}{\partial j^2}-i\frac{\partial\psi}{\partial j}\right)$$

Introducem în (4.60) şi găsim expresia operatorului $\hat{L}^2$:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \tag{4.61}$$

sau, sub formă restrânsă:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{sin\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \tag{4.62}$$

Între parantezele acolade apare *partea unghiulară a operatorului lui Laplace în coordonate sferice*, numită ***operatorul*** $\boldsymbol{\Omega(\theta,\varphi)}$ ***al lui Legendre***. Scriem aşadar:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Omega(\theta,\varphi) \tag{4.63}$$

Ecuaţia cu valori proprii asociată operatorului $\hat{L}^2$ este:

$$\hat{L}^2\,Y(\theta,\varphi) = \omega^2 Y(\theta,\varphi) \tag{4.64}$$

în care *s-a notat cu* ω^2 *valorile proprii ale operatorului* $\hat{L}^2$. Ecuaţia se scrie sub forma echivalentă:

$$\hat{\Omega}Y(\theta,\varphi) + \frac{\omega^2}{\hbar^2}Y(\theta,\varphi) = 0 \tag{4.65}$$

Această ecuaţie admite soluţii ce satisfac condiţiile standard de mărginire, uniformitate şi continuitate, *numai pentru valori proprii discrete, de forma*

$$\omega = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad (l \in N) \tag{4.66}$$

şi *arată că valorile proprii ale operatorului* $\hat{L}$ *sunt cuantificate*, spectrul valorilor proprii este discret, ceea ce înseamnă că *la o măsură a mărimii momentului cinetic al unei particule se pot obţine numai valori prezise de* (4.66).
Introducând (4.66) în (4.65), se obţine ecuaţia funcţiilor sferice:

$$\hat{\Omega}Y(\theta,\varphi) + l(l+1)Y(\theta,\varphi) = 0 \tag{4.67}$$

cu soluţii de forma:

$$Y(\theta,\varphi) = P_{lm_l}(cos\theta)\Phi_{m_l}(\varphi) \tag{4.68}$$

în care P_{lm_l} sunt ***polinoamele Legendre***, depinzând de numerele cuantice l şi m_l, $Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$ sunt ***funcţiile sferice*** *ce reprezintă chiar funcţiile proprii ale operatorului moment cinetic,* iar $\Phi_{m_l}(\varphi)$ *sunt funcţiile proprii ale operatorului*

$\hat{L}_z$ care verifică ecuaţia cu valori proprii:

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = \mu\Phi(\varphi) \tag{4.69}$$

sau

$$-i\hbar\frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = \mu\Phi(\varphi) \tag{4.70}$$

care admite soluţia

$$\Phi(\varphi) = Ne^{\frac{i}{\hbar}\mu\varphi} \tag{4.71}$$

pentru care impunem ***condiţia de uniformitate*** $\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$ de unde, rezultă $e^{\frac{i}{\hbar}\cdot 2\pi\mu} = 1$ şi cum, în general, $e^{i\cdot 2m_l\pi} = 1 \quad (m_l \in Z)$ va trebui să considerăm,

$$\mu = m_l\hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l) \tag{4.72}$$

Această ecuaţie arată *că valorile proprii ale operatorului* $\hat{L}_z$ *sunt cuantificate*, cu alte cuvinte, *proiecţiile momentului cinetic de-a lungul unei direcţii oarecare* ***Oz*** *pot lua numai valorile discrete* $\pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar, ..., \pm l\hbar$.

Constanta N rezultă din condiţia de normare

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi)\Phi(\varphi)d\varphi = 1 \tag{4.73}$$

şi are valoarea $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, astfel că (4.71) se poate scrie în final:

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\varphi} \tag{4.74}$$

În definitiv, (4.68) se scrie:

$$Y(\theta,\varphi) = P_{lm_l}(\cos\theta)\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\varphi} \tag{4.75}$$

3. OPERATORUL ENERGIEI (OPERATORUL HAMILTONIAN).

Operatorul hamiltonian $\hat{H}$ exprimat prin (2.40) *este un operator hermitic*.
Într-adevăr, operatorul lui Laplace Δ este un operator hermitic:

$$\int_\infty \left(\varphi^*\Delta\psi - \psi\Delta\varphi^*\right)dV = \int_{\Sigma_\infty}\left(\varphi^*\nabla\psi - \psi\nabla\varphi^*\right)d\vec{S} = 0$$

întrucât pentru $\vec{r} \to \infty$, funcţiile de undă φ^* şi ψ se anulează pe suprafaţa $\sum_\infty$ de la infinit. De asemenea, funcţia $U(\vec{r})$ fiind reală, operatorul asociat $\hat{U}(\vec{r})$ este hermitic. $(\psi, U\varphi) = (U\psi, \varphi)$.

Ecuaţia cu valori proprii a energiei $\hat{H}\psi = E\psi$ se numeşte ***ecuaţia lui Schrödinger***:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{4.76}$$

Funcţia proprie ψ*, care se anulează pentru* $\vec{r} \to \infty$*, reprezintă o stare* ***legată,*** *iar aceea care nu se anulează descrie o stare* ***nelegată****.*
Pentru a efectua o analiză a naturii stărilor (legate sau nelegate) vom considera - pentru simplificarea calculelor - *cazul unidimensional* în cadrul căruia ecuaţia (4.76) devine:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0 \tag{4.77}$$

Considerăm, de asemenea, că există şi au valori finite limitele:

$$\lim_{x \to -\infty} U(x) = U_- \text{ şi } \lim_{x \to \infty} U(x) = U_+ \tag{4.78}$$

astfel încât $U_- > U_+$. Dacă E reprezintă *energia totală a microparticulei*, deosebim trei cazuri de interes:

a) $E > U_-$ *pentru orice* x. Ecuaţia (4.77) devine:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{4.79}$$

Cantitatea $\frac{2m}{\hbar^2}(E - U)$ este pozitivă şi pentru $k \in R$, o notăm cu k^2, astfel că ecuaţia devine: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$, cu soluţii de forma:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \tag{4.80}$$

$$\psi(x) = A\sin(kx + \varphi) \tag{4.81}$$

sau

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \tag{4.82}$$

Nici una dintre aceste soluţii nu se anulează la $\pm\infty$ şi *vor descrie stări nelegate, astfel că spectrul valorilor proprii va fi continuu şi degenerat.*

b) $E < U_+$ pentru orice x.

Vom nota acum $\frac{2m}{\hbar^2}(U-E) \equiv k^2 \quad (k \in R)$ şi ecuaţia (4.79) devine:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \tag{4.83}$$

cu soluţii de forma

$$\psi(x) = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx} \tag{4.84}$$

care pentru $x \to -\infty, C_1 \neq 0, C_2 = 0$ sau pentru $x \to \infty, C_1 = 0, C_2 \neq 0$ se anulează, desemnând *stări legate* cu un spectru al valorilor proprii *discret şi nedegenerat*.

c) $U_+ < E < U_-$ *pentru orice* x. Acest caz include cazurile anterioare, pentru valori ale energiilor situate la capetele intervalului (U_+, U_-).

4.4.2. VALORILE MEDII ÎN MECANICA CUANTICĂ

Să presupunem un sistem cuantic într-o stare ψ rezultată din suprapunerea stărilor descrise de funcţiile ψ_1 şi ψ_2, ce corespund valorilor proprii λ_1 şi λ_2. Dacă sistemul s-ar afla în starea ψ_1 ar rezulta prin măsurarea observabilei valoarea λ_1 şi valoarea λ_2 dacă s-ar afla în starea descrisă de funcţia proprie ψ_2.

În starea $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ măsurătorile - care în concepţia clasică ar conduce la o valoare cuprinsă între λ_1 şi λ_2 - *în mecanica cuantică nu vor conduce la o altă valoare în afara valorilor* λ_1 *sau* λ_2.*Nu se poate prevede însă care dintre rezultate va rezulta prin efectuarea măsurării*. Dirac a formulat astfel aceste constatări: *"în general, când se observă un sistem atomic oarecare pregătit într-un anumit fel şi care, în consecinţă, se află într-o stare definită, rezultatul nu poate fi prezis cu certitudine, ci se vor obţine în urma măsurătorilor repetate rezultate diferite, în condiţii experimentale identice."* Dacă măsurătoarea se repetă de un număr foarte mare de ori se va obţine un rezultat ce corespunde unei anumite stări la un număr de măsurători care raportat la numărul total al măsurătorilor va defini o fracţiune bine determinată şi totdeauna aceeaşi. Cu alte cuvinte, *la fiecare repetare a experimentului, acest rezultat particular se va obţine cu o probabi litate bine definită.*

Teoria permite calculul probabilităţii de realizare a unei anumite stări şi, odată cunoscută această probabilitate, se poate trece la calculul ***valorilor medii***.

Prin definiţie, ***valoarea medie a coordonatei x*** se calculează cu formula:

$$\bar{x} = \frac{\int x\psi^*(x)\psi(x)dx}{\int \psi^*(x)\psi(x)dx} \tag{4.85}$$

sau, dacă funcţia de undă este normată la unitate,

$$\overline{x} = \int x\psi^*(x)\psi(x)dx \tag{4.86}$$

Trecând la cazul *spaţiului de configuraţie*, ***valoarea medie a coordonatei*** $\boldsymbol{q_k}$ va fi:

$$\overline{q_k} = \int \psi^*(q_1, q_2,..., q_f)\hat{q}_k\, \psi(q_1, q_2,..., q_f)dq_1...dq_f \tag{4.87}$$

Prin analogie cu (4.86) se poate postula pentru ***media*** $\overline{p}_x$ ***a proiecţiei*** p_x ***a impul - sului*** definită de operatorul $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, formula

$$\overline{p_x} = \int \psi^*(x)\hat{p}_x\, \psi(x)dx = \int \psi^*(x)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi(x)dx = \frac{\hbar}{i}\int \psi^*(x)\frac{d\psi}{dx}dx$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int \psi^*(x)\frac{d\psi}{dx}dx \tag{4.88}$$

care în cazul spaţiului de configuraţie se scrie separat pentru fiecare coordonată generalizată

$$\overline{p_{q_k}} = \int \psi^*(q_1, q_2,..., q_f)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_k}\right)\psi^*(q_1, q_2,..., q_f)dx \tag{4.89}$$

Media unei funcţii F*, depinzând de coordonatele şi impulsurile canonice,*

$$\overline{F} = \int \psi^*(q_1, q_2,.., q_f)\hat{F}(q_1, q_2,.., q_f; p_1, p_{2,...,} p_f)\, \psi(q_1, q_2,.., q_f)\, d\Omega_q \tag{4.90}$$

în care $d\Omega_1 = dq_1dq_2...dq_f$ este ***elementul de volum din spaţiul de configuraţie***, $\boldsymbol{f}$ reprezintă ***numărul gradelor de libertate*** iar *funcţia* $\boldsymbol{\psi}$ *este normată la unitate*.

Aceste formule de calcul ale valorilor medii au fost scrise în baza unui ***"al treilea postulat al mecanicii cuantice"*** care se enunţă astfel: *în orice stare descrisă de funcţia de undă normată* $\boldsymbol{\psi(q_1, q_2,..., q_f)}$ *valoarea previzibilă a variabilei dina - mice* $\boldsymbol{F(q_1, q_2,..., q_f; p_1, p_{2,...,} p_f)}$ *se exprimă prin formula:*

$$\overline{F} = \int \psi^*\, \hat{F}\, \psi\, d\,\Omega_q \tag{4.91}$$

Deducem următoarele ***proprietăţi ale valorii medii cuantice*:**

- Valoarea medie a unei constante este ea însăşi constantă;
- Dacă într-o anumită stare, valoarea medie a observabilei $\hat{F}$ este $\overline{F}$, iar a observabilei $\hat{G}$ este $\overline{G}$, valoarea medie a sumei $\overline{F+G}$ este egală cu suma $\overline{F}+\overline{G}$ a valorilor medii $\overline{F}$ şi $\overline{G}$.

De remarcat că *dacă se cunoaşte funcţia de undă care descrie starea unui sistem, la un anumit moment, cu ajutorul relaţiei* (2.91), *se pot estima valorile medii ale tuturor , mărimilor mecanice*. Rezultă că *mecanica cuantică poate descrie complet mişcarea, însă numai statistic, fiind o teorie prin esenţă statistică*.

➢ Dacă funcţia ψ caracterizează o anumită stare, funcţia $c\psi$, în care c este un număr, caracterizează aceeaşi stare, însă *pentru calculul valorii medii a observabilei* $\hat{F}$*, în această nouă stare, va trebui să folosim formula în care funcţia* $c\psi$ *nu mai este normată la unitate*:

$$\overline{F} = \frac{\int \psi^* \hat{F} \psi \, d\Omega_q}{\int \psi^* \psi \, d\Omega_q} = \frac{\int (c\psi)^* \hat{F} (c\psi) d\Omega_q}{\int (c\psi)^* (c\psi) d\Omega_q} \tag{4.92}$$

Presupunem acum o variabilă dinamică descrisă de operatorul $\hat{F}$, caracterizat de funcţiile proprii $\psi_1, \psi_2, ...$ şi de valorile proprii $\lambda_1, \lambda_2, ...$ ce alcătuiesc un spectru discret.

Considerăm un sistem cuantic în starea descrisă de funcţia ψ, care nu este funcţie proprie a operatorului $\hat{F}$. Valoarea medie a observabilei F în starea ψ se scrie:

$$\overline{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi \, d\Omega_q \tag{4.93}$$

cu condiţia ca ψ să fie normată: $\int \psi^* \psi \, d\Omega_q = 1$

Dezvoltăm funcţia ψ *în serie de funcţii proprii ale operatorului* $\hat{F}$ *:*

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k \tag{4.94}$$

Obţinem expresia valorii medii a observabilei F

$$\begin{aligned} \overline{F} &= \int \left(\sum_k c_k^* \psi_k^* \right) \hat{F} \left(\sum_k c_k \psi_k \right) d\Omega_q = \\ &= c_1^* c_1 \lambda_1^2 \int \psi_1^* \psi_1 d\Omega_q + c_1^* c_2 \lambda_1 \lambda_2 \int \psi_1^* \psi_2 d\Omega_q + ... \\ &\quad + c_k^* c_l \int \psi_k^* \psi_l d\Omega_q + ... \\ &= c_1^* c_1 \lambda_1^2 \int \psi_1^* \psi_1 d\Omega_q + c_1^* c_2 \lambda_1 \lambda_2 \int \psi_1^* \psi_2 d\Omega_q + ... \\ &\quad + c_k^* c_l \int \psi_k^* \psi_l d\Omega_q + ... \end{aligned} \tag{4.95}$$

în care ţinem seama de condiţiile de ortonormare ale funcţiilor proprii ψ_k:

$$\int \psi_k^* \psi_l d\Omega_q = \begin{cases} 1, & k = l \\ 0, & k \neq l \end{cases} \tag{4.96}$$

Rezultă

$$\overline{F} = |c_1|^2 \lambda_1 + |c_2|^2 \lambda_2 + ... + |c_k|^2 \lambda_k + ... \tag{4.97}$$

Cum funcţia ψ a fost presupusă normată, putem scrie:

$$1=\int \psi^* \psi \, d\Omega_q = \sum_{k,l} c_k^* c_l \int \psi_k^* \psi_l \, d\Omega_q = \sum_k |c_k|^2 \tag{4.98}$$

şi notând $w_i = |c_i|^2$, obţinem:

$$\overline{F} = \sum_k \lambda_k w_k \tag{4.99}$$

şi

$$\sum_k w_k = 1 \tag{4.100}$$

Aceste relaţii arată că *pătratele modulelor coeficienţilor dezvoltării în serie a funcţiei de undă* ψ *după funcţiile proprii ale operatorului* $\hat{F}$ *reprezintă probabilităţile ca la o măsurare a observabilei* F *să obţinem ca rezultat una din valorile proprii* $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_l, ...$. *Mai exact vom obţine valoarea* λ_i *cu probabilitatea* w_i.

4.4.3. RELAŢII DE COMUTARE

După cum am arătat cu altă ocazie, *mecanica cuantică postulează că valoarea unei observabile cuantice este valoarea proprie corespunzătoare funcţiei proprii* ψ *a operatorului asociat observabilei respective*. Ne interesează *în ce măsură două sau mai multe mărimi mecanice pot avea simultan valori determinate*.

Ştim sigur că *două mărimi mecanice A şi B au valori determinate independent una de cealaltă, dacă se află în stările descrise de funcţiile proprii ale operatorilor* $\hat{A}$ *şi* $\hat{B}$. Evident, *mărimile vor avea simultan valori determinate dacă starea sistemului cuantic este descrisă de funcţia proprie* ψ *comună celor doi operatori.*

- O astfel de funcţie este funcţia:

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + yp_y + zp_z)} \tag{4.101}$$

care este o funcţie proprie a operatorilor $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$, cu valorile proprii p_x, p_y şi respectiv p_z. Aceasta înseamnă *că proiecţiile impulsului pe axele de coordonate pot fi măsurate concomitent*.

- *Condiţia necesară şi suficientă ca doi operatori să comute este ca ei să admită funcţii proprii comune.*

Într-adevăr, să considerăm doi operatori $\hat{A}$ şi $\hat{B}$, care admit aceeaşi funcţie proprie ψ. Scriem ecuaţiile cu valori proprii:

$$\hat{A}\psi = \alpha\psi \quad \text{şi} \quad \hat{B}\psi = \beta\psi \tag{4.102}$$

Avem $\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) = \beta\hat{A}\psi = \beta\alpha\psi$ şi, $\hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}(\hat{A}\psi) = \alpha\hat{B}\psi = \alpha\beta\psi$

Demonstraţia *necesităţii* e evidentă.

Suficienţa o vom demonstra *presupunând o stare nedegenerată* (în care unei valori proprii îi corespunde o singură funcţie proprie): fie ψ şi α funcţia proprie, respectiv valoarea proprie a operatorului $\hat{A}$. Presupunem, în plus, că operatorii $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ comută. Scriem, deci: $\hat{A}\psi = \alpha\psi$ **şi** $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ şi obţinem o relaţie *ce arată că funcţia* $\hat{B}\psi$ *este o valoare proprie a operatorului* $\hat{A}$*, cu valoarea proprie* α.

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) = \hat{B}\hat{A}\psi = \alpha\hat{B}\psi$$

Însă, de asemenea, ψ este şi ea o funcţie proprie a operatorului $\hat{A}$, cu aceeaşi valoare proprie, α. Ca urmare, *cele două funcţii proprii vor diferi printr-un factor constant:* $\hat{B}\psi = \beta\psi$ *,relaţie ce exprimă faptul că funcţia* ψ *este funcţie proprie şi pentru operatorul* $\hat{B}$*, cu valoarea proprie* β.

- Verificăm acum, în baza constatării că $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ admit aceeaşi funcţie proprie ψ, că doi dintre aceşti operatori comută întotdeauna.

Într-adevăr, $\hat{p}_x\hat{p}_y\psi = -\hbar^2\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}$, $\hat{p}_y\hat{p}_x\psi = -\hbar^2\dfrac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x} = -\hbar^2\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}$.

Se observă că $\hat{p}_x\hat{p}_y\psi = \hat{p}_y\hat{p}_x\psi$ ceea ce este echivalent cu $\left[\hat{p}_x, \hat{p}_y\right] = 0$.

Analog, se verifică şi celelalte două relaţii: $\left[\hat{p}_x, \hat{p}_z\right] = 0$ şi $\left[\hat{p}_y, \hat{p}_z\right] = 0$

- Un exemplu de *operatori necomutativi* este exemplul *operatorilor coordonată* $\hat{x}$ *şi proiecţie impuls* $\hat{p}_y$.

Avem $\hat{x}\hat{p}_y\psi = \dfrac{\hbar}{i}x\dfrac{\partial\psi}{\partial y}$; $\hat{p}_y\hat{x}\psi = \dfrac{\hbar}{i}x\dfrac{\partial\psi}{\partial y}$ .Din aceste relaţii, rezultă $\left[\hat{x}, \hat{p}_y\right] = 0$.

Deci *coordonata şi proiecţia impulsului asociată acesteia comută*.

Calculăm $\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right]$.Avem: $\hat{x}\,\hat{p}_x\,\psi = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \psi}{\partial y}$ şi $\hat{p}_x\,\hat{x}\,\psi = -i\hbar\left(\psi + x\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$.

Obţinem astfel,

$$\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = \frac{\hbar}{i} \quad (\neq 0) \tag{4.103}$$

Analog, obţinem şi relaţiile celelalte: $\left[\hat{p}_y, \hat{y}\right] = \left[\hat{p}_z, \hat{z}\right] = \frac{\hbar}{i}$

4.4.4. ASPECTUL CUANTIC AL RELAŢIILOR DE INCERTITUDINE

Prezentăm o abordare a relaţiilor Heisenberg, din punctul de vedere al mecanicii cuantice, pornind cu formula abaterii pătratice medii

$$\overline{\varepsilon_k^2} = \overline{\left(a_k - \overline{a}\right)^2} = \overline{a_k^2} - \left(\overline{a}\right)^2 = \overline{\left(\Delta a\right)^2} \tag{4.104}$$

în care a_k reprezintă *valorile obţinute în urma măsurătorilor repetate*, efectuate asupra unei observabile fizice oarecare A, iar $\overline{a}$ *valoarea medie a tuturor valorilor individuale obţinute prin aceste măsurători.*

Dacă observabilele de interes sunt coordonata x şi proiecţia p_x a impulsului

$$\overline{\left(\Delta x\right)^2} = \overline{x^2} - (\overline{x})^2 \quad \text{şi} \quad \overline{\left(\Delta p_x\right)^2} = \overline{p_x^2} - \left(\overline{p_x}\right)^2 \tag{4.105}$$

Fără a restrânge generalitatea expunerii, *vom alege referenţialul cu originea în punctul de abscisă* $\overline{x} = 0$ *şi care se deplasează cu viteza* v_x *pe direcţia* x, astfel încât $\overline{v}_x = \frac{\overline{p_x}}{m} = 0$. Aceasta înseamnă că se obţine $\overline{p}_x = 0$. În acest referenţial, în conformitate cu (4.105), rezultă

$$\overline{\left(\Delta x\right)^2} = \overline{x^2} \quad \text{şi} \quad \overline{\left(\Delta p_x\right)^2} = \overline{p_x^2} \tag{4.106}$$

Calculăm aceste abateri pătratice medii după prescripţiile cuantice

$$\overline{x^2} = \int \psi^* x^2 \psi \, dx$$

$$\overline{p_x^2} = \int \psi^* \,\hat{p}_x^2 \psi \, dx = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx$$

şi considerăm inegalitatea evidentă

$$\int \left|\alpha x \psi + \beta \frac{d\psi}{dx}\right|^2 dx \geq 0 \tag{4.107}$$

în care α şi β sunt variabile auxiliare reale.

Avem:

$$\left|\alpha x\psi + \beta\frac{d\psi}{dx}\right|^2 = \left(\alpha x\psi + \beta\frac{d\psi}{dx}\right)\cdot\left(\alpha x\psi^* + \beta\frac{d\psi^*}{dx}\right) = \tag{4.108}$$
$$= \alpha^2 x^2 |\psi|^2 + \alpha\beta x\frac{d}{dx}|\psi|^2 + \beta^2\frac{d\psi^*}{dx}\cdot\frac{d\psi}{dx}$$

Cu notaţiile

$$A \equiv \int x^2|\psi|^2 dx,\ B = -\int x\frac{d}{dx}\left(|\psi|^2\right)dx,\ C = \int\frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx}dx$$

inegalitatea (4.107) devine:

$$A\alpha^2 - B\alpha\beta + C\beta^2 \geq 0 \quad cu\ A > 0 \tag{4.109}$$

Cum α şi β sunt reale oarecare, $A>0$ şi condiţia impusă de (4.109) ca trinomul de gradul II în α să fie pozitiv, pentru oricare α real, cere ca $B^2 - 4AC \leq 0$ sau echivalent, $4AC \geq B^2$. Considerând că ψ este normată la unitate şi integrând prin părţi, obţinem: $B = -\int x\frac{d}{dx}\left(\psi^*\psi\right)dx = -\left(x\psi^*\psi\right)\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int\psi^*\psi\,dx$.

Primul termen al sumei se anulează pentru că funcţia ψ de pătrat integrabil scade spre zero, mult mai rapid cu creşterea lui x, iar al doilea termen este egal cu 1. Rezultă $B=1$. Procedând la o integrare prin părţi, se obţine pentru C:

$$C = \int\frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx}dx = \left(\psi^*\frac{d\psi}{dx}\right)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}dx = \frac{1}{\hbar^2}\overline{p_x^2}$$. Rezultă,

$$\left(\Delta p_x^2\right) = \overline{p_x^2} = \hbar^2 C\,,\quad \overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = A \quad şi$$

$$\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p_x)^2} = \hbar^2 AC = \frac{\hbar^2}{4}\cdot 4AC \geq \frac{\hbar^2 B^2}{4} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

sau, echivalent

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}\cdot\sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{4.110}$$

Un raţionament analog conduce şi la celelalte două relaţii

$$\sqrt{\overline{(\Delta y)^2}}\cdot\sqrt{\overline{(\Delta p_y)^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\sqrt{\overline{(\Delta z)^2}}\cdot\sqrt{\overline{(\Delta p_z)^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$