

CURSUL 8

FORMULAREA CUANTICĂ A UNOR PROBLEME FUNDAMENTALE ALE FIZICII CLASICE

1. ASPECTUL CUANTIC ÎN DESCRIERE *SCHRÖDINGER*

Așa cum semnalam cu altă ocazie, *descrierea Schrödinger* - echivalentă de altfel cu celelalte descrieri cuantice - permite o abordare matematică mult simplificată și oferă posibilitatea unor interpretări mai directe a rezultatelor, ceea ce o recomandă pentru expunerile teoretice cu caracter didactic. Acesta e motivul pentru care în cele ce urmează vom folosi formalismul Schrödinger cu precădere fără însă a abandona alte formalisme care – ocazional – se dovedesc a fi mai potrivite.

1.1 DESCRIEREA SCHRÖDINGER PENTRU PARTICULA CUANTICĂ ÎN CÂMP DE FORȚE EXTERN

Vom considera în cele ce urmează o particulă cuantică ce evoluează într-un câmp de forțe ce derivă din energia potențială $U = U(\vec{r})$ independentă de timp. Evoluția acestei microparticule va fi descrisă de o funcție de undă $\Psi(\vec{r}, t)$ soluție a ecuației Schrödinger dependente de timp

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(\vec{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (8.1)$$

Căutăm pentru această ecuație o soluție particulară de forma:

$$\Psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) \cdot f(t) \quad (8.2)$$

Introducem în ecuație și obținem

$$\frac{1}{u} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + U(\vec{r})u \right] = i\hbar \cdot \frac{1}{f} \frac{df}{dt} \quad (8.3)$$

Se observă că membrul stâng al acestei ecuații depinde numai de $\vec{r}$ în timp ce membrul drept depinde numai de timp. O astfel de egalitate va fi posibilă numai dacă ambii membrii sunt egali cu o constantă, în general complexă, pe care o vom nota cu C astfel că va rezulta sistemul format din ecuațiile

$$i\hbar \frac{df}{dt} = Cf \quad (8.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + U(\vec{r})u = Cu \quad (8.5)$$

Ecuația (8.4) admite prin integrare, soluția:

$$f(t) = f_0 e^{-\frac{i}{\hbar} C t} \quad (8.6)$$

în care f_0 este o constantă de integrare. Rezolvarea ecuației (8.5) presupune să se cunoască $U(\vec{r})$. Cazul cel mai simplu pentru noi este acela al particulei libere (pe care deja l-am studiat) în care $U(\vec{r}) = U_0 = \text{const}$.

Am văzut că în acest caz obținem soluții de forma

$$u(\vec{r}) = a e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} \quad (8.7)$$

Înlocuind această soluție în (3.5) și presupunând $u \neq 0$ rezultă

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} + U_0 = C \quad (8.8)$$

Această relație reprezintă o condiție impusă vectorului $\vec{p}$ pentru ca soluția particu -

lară presupusă (8.7) să satisfacă ecuația (8.5) pentru particula liberă.

Vectorul $\vec{p}$ poate fi real sau complex. Funcțiile $u(\vec{r})$ vor trebui să fie mărginite în întreg spațiul pentru a asigura astfel mărginirea funcțiilor Ψ care trebuie să fie integrabile în modul pătrat. Mărginirea funcțiilor $u(\vec{r})$ impune ca vectorul $\vec{p}$ să fie real.

Într-adevăr, $e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p_y y} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p_z z} = e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{\lambda} p_{\lambda} \cdot \lambda}$ în care λ desemnează coordonatele x, y și z . Presupunem că $\frac{p_{\lambda}}{\hbar} = \alpha + i\beta$ astfel că $e^{\frac{i}{\hbar}p_{\lambda}\lambda} = e^{i\alpha\lambda} \cdot e^{-\beta\lambda}$.

Se observă că pentru orice valoare a lui λ , $e^{i\lambda\alpha}$ este mărginită în modul, în schimb $e^{-\beta\lambda} \rightarrow \infty$ și anume

- pentru $\beta > 0$ când $\lambda \rightarrow -\infty$
- pentru $\beta < 0$ când $\lambda \rightarrow \infty$

Singura posibilitate este $\beta = 0$ ceea ce presupune ca p_{λ} să fie real rezultând astfel $\vec{p}$ real. Desprindem astfel în virtutea relației (8.8) semnificația fizică a constantei C ca fiind *energia totală a particulei libere* pe care o vom nota în continuare cu E și observăm că $U_0 \leq E < \infty$.

Vom admite că nu numai în cazul particulei libere ci în general ecuația care stabilește valorile posibile ale energiei unei particule aflate într-un câmp de forțe ce derivă din energia potențială $U(\vec{r})$, este

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u + U(\vec{r})u = Eu \quad (8.9)$$

Și în acest caz funcțiile $u(\vec{r})$ vor trebui să satisfacă anumite condiții numite **de regularitate** pentru a asigura funcției Ψ proprietățile de mărginire și de integrabilitate în modul pătrat.

Ecuația (8.9) este chiar *ecuația Schrödinger independentă de timp*.

Vom înțelege prin **colectiv statistic** ansamblul format din sistemul cuantic supus investigației, condițiile fizice în care acesta evoluează (liber sau în prezența interacțiilor) și din totalitatea condițiilor experimentale bine determinate în care această evoluție se produce. Vom admite că funcțiile de undă $\Psi(\vec{r}, t)$ soluții ale ecuației Schrödinger temporale (8.1) de forma

$$\Psi(\vec{r}, t) = u_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (8.10)$$

descriu colective statistice în câmp de forțe, caracterizate prin energie E bine determinată. Aceasta înseamnă că în urma fiecărei măsurări a energiei sistemului cuantic va rezulta valoarea E .

Ecuația lui Schrödinger independentă de timp admite soluții oricare ar fi t , însă nu orice soluție a acestei ecuații prezintă interes fizic ci numai acelea ce satisfac anumite condiții:

i) să fie continue și cu derivate parțiale continue în toate punctele spațiului în care U nu este singulară;

ii) să fie uniforme, adică să asocieze fiecărui punct din spațiu o valoare determinată;

iii) să fie mărginite în întreg spațiul.

Se observă că funcțiile $u(\vec{r})$ nu trebuiesc să fie integrabile în modul pătrat condiție impusă doar soluțiilor $\Psi(\vec{r}, t)$ ale ecuației temporale. Există și situații în care această condiție este îndeplinită dar nu este o condiție impusă. Dacă am impune această condiție nu am mai obține un sistem complet de soluții pentru ecuația Schrödinger independentă de timp. Funcțiile $u(\vec{r})$ care satisfac (8.9) în condițiile i) – iii) se numesc **funcții proprii ale energiei**, iar valorile E bine determinate corespunzând acestor funcții proprii se numesc **valori proprii**, totalitatea valorilor proprii alcătuind

un **spectru** al valorilor proprii care după cum am semnalat cu altă ocazie poate fi **discret**, **continuu** sau **mixt**.

Spectrul discret este alcătuit dintr-un șir de valori proprii discrete $\{E_i\}$ ale energiei.

Un astfel de spectru îl vom întâlni când vom rezolva ecuația cu valori proprii a operatorului hamiltonian în cazul oscilatorului armonic.

Spectrul valorilor proprii se numește **degenerat** când conține valori proprii E degenerate. Spunem că o valoare proprie E este **multiplă** sau **degenerată** dacă îi corespund mai multe funcții proprii liniar independente.

Fie E_n o valoare proprie p – **degenerată**. Asta înseamnă că acestei valori proprii îi corespund p funcții proprii $u_{n1}, u_{n2}, \dots, u_{np}$ liniar independente. În general, funcțiile proprii corespunzând aceleiași valori proprii nu sunt ortogonale dar li se pot asocia funcții proprii ortogonale.

Spunem despre un sistem de funcții proprii ortonormat că este **complet** dacă orice funcție ce satisface condițiile de regularitate printre care și aceea de descreștere rapidă la infinit poate fi dezvoltată în serie după funcțiile proprii ale sistemului.

$$f(\vec{r}) = \sum_n c_n u_n(\vec{r}) \quad (8.11)$$

Convergența seriei din dreapta către f nu se impune decât în medie pătratică. Vom considera însă în cazurile de interes fizic, că această convergență este asigurată punct cu punct, astfel că

$$c_n = \int_{\vec{r}} u_n^*(\vec{r}) f(\vec{r}) d\vec{r} \quad (8.12)$$

Proprietatea de completitudine este exprimată de **relația de completitudine** sau de **închidere** $\int_{\vec{r}} |f|^2 d\vec{r} = \sum_n |c_n|^2$.

Într-adevăr,

$$\begin{aligned}\int_{\vec{r}} |f|^2 d\vec{r} &= \int_{\vec{r}} f^* f d\vec{r} = \int_{\vec{r}} \left(\sum_n c_n^* u_n^* \right) \left(\sum_j c_j u_j \right) d\vec{r} = \sum_j \sum_n c_n^* c_j \int_{\vec{r}} u_n^* u_j d\vec{r} = \\ &= \sum_{j,n} c_n^* c_j \delta_{nj} = \sum_n |c_n|^2\end{aligned}\quad (8.13)$$

Dacă mai considerăm încă o funcție $g(\vec{r}) = \sum_j d_j u_j(\vec{r})$ se obține, că

$$\int_{\vec{r}} f^* g d\vec{r} = \sum_n c_n^* d_n \quad (8.14)$$

Spectrul continuu este acela ce conține valori proprii ale energiei ce acoperă un interval. Exemplul îl oferă particula liberă cu energia $E \in [U_0, \infty)$.

Spectrul mixt este format din zone acoperite de spectrul discret și zone acoperite de spectrul continuu. Un astfel de exemplu îl oferă câmpul de forțe columbian prin energiile stărilor staționare în care se găsesc electronii pe orbite și ale căror valori formează o zonă de spectru discret. Ionizând atomul, electronul obținut în urma ionizării devine particulă liberă și manifestă un spectru continuu al valorilor proprii ale energiei. Soluția generală a ecuației (8.1) se caută sub forma unei suprapunerii de soluții particulare de forma (8.10).

Vom considera deci o dezvoltare a funcției de undă ψ după funcțiile proprii u_k ale energiei:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k A_k(t) u_k(\vec{r}) \quad (8.15)$$

Introducem această expresie în ecuația (8.1), o înmulțim cu $u_j^*(\vec{r})$ apoi integrăm ambii membrii ai acestei ecuații pe tot spațiul și ținem seama ortogonalitatea funcțiilor $\{u_i\}$. Se obține

$$i\hbar \frac{dA_j(t)}{dt} = E_j A_j(t) \quad (8.16)$$

care admite pentru coeficienții $A_k(t)$ soluțiile

$$A_k(t) = A_k^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \quad (8.17)$$

astfel că soluția generală a ecuației Schrödinger temporare pentru particula cuantică care evoluează în câmp de forțe ce derivă din energia potențială $U(\vec{r})$ constantă

în timp se scrie:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k A_k^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} u_k(\vec{r}) \quad (8.18)$$

Coeficienții $A_k^{(0)}$ se determină din condițiile inițiale și presupun cunoașterea funcției $\Psi(\vec{r}, 0)$:

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \sum_k A_k^{(0)} u_k(\vec{r}) \quad (8.19)$$

Rezultă în baza proprietăților de ortonormare a funcțiilor proprii ale energiei,

$$A_k^{(0)} = \int_{\vec{r}} u_k^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, 0) d\vec{r} \quad (8.20)$$

și

$$\int_{\vec{r}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = \sum_k |A_k(t)|^2 = \sum_k |A_k^{(0)}|^2 = 1 \quad (8.21)$$

Am stabilit că funcția $\Psi(\vec{r}, t)$ exprimată prin relația (8.10) descria starea sistemului în care energia totală avea valoarea E . Să estimăm acum energia sistemului în starea descrisă de funcția $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k A_k(t) u_k(\vec{r})$. Pentru a realiza acest demers vom

considera din nou ecuația lui Schrödinger pe care o vom înmulți cu Ψ^* apoi vom integra ambii membrii ai egalității obținute pe întreg spațiul coordonatelor. Se obține:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\vec{r}} \Psi^* \Delta \Psi d\vec{r} + \int_{\vec{r}} U(\vec{r}) \Psi^* \Psi d\vec{r} = i\hbar \int_{\vec{r}} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} d\vec{r} \quad (8.22)$$

Ținând seama de relațiile

$$\text{i) } \overline{p_\lambda^2} = -\hbar^2 \int_{\vec{r}} \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda^2} d\vec{r} \quad \lambda = x, y \text{ sau } z$$

$$\text{ii) } \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{\sum_{\lambda} \overline{p_\lambda^2}}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\vec{r}} \psi^* \Delta \psi d\vec{r}$$

$$\text{iii) } \overline{U(\vec{r})} = \int_{\vec{r}} U(\vec{r}) |\psi|^2 d\vec{r}$$

$$\text{iv) } \overline{\frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r})} = i\hbar \int_{\vec{r}} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} d\vec{r}$$

$$\text{v) } A_k(t) = A_k^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$$

$$\text{vi) } \frac{dA_k(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E_k A_k(t)$$

și observând că $\overline{\frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r})} = \overline{E}$ rezultă relația

$$\overline{E} = \sum_k E_k |A_k(t)|^2 \quad (8.23)$$

care arată că $\overline{E}$ este constantă în timp. În plus, avem

$$\sum_k |A_k(t)|^2 = 1 \text{ și} \quad (8.24)$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k A_k(t) u_k(\vec{r}) \quad (8.25)$$

Comparând aceste rezultate cu situația din statistică referitoare la variabila aleatorie z care ia valorile z_i cu probabilitățile P_i

$$z = \sum_i z_i P_i \quad (8.26)$$

$$\sum P_i = 1 \quad (8.27)$$

și oprindu-ne atenția asupra variabilei aleatorii E care manifestă valorile posibile E_k constatăm că în baza acestor relații statistice – și mecanica cuantică fiind o disciplină

esențial statistică – se ajunge la concluzia că *probabilitatea ca energia sistemului să ia valoarea E_k este $P_{E_k} = |A_k(t)|^2$* . Distingem ***două cazuri***:

i) dacă E_k este *nedegenerată*

$$P_{E_k} = |A_k^{(0)}|^2 \quad (8.28)$$

ii) dacă E_k este *degenerată*

$$P_{E_k} = \sum_k |A_k(t)|^2 \quad (8.29)$$

A_k fiind *coeficientul asociat valorii proprii E_k* . Se observă că *aceste probabilități sunt independente de timp*. În concluzie, energia sistemului descris de $\Psi(\vec{r}, t)$ soluție a ecuației Schrödinger pentru particula cuantică care evoluează în câmp de forțe ce derivă din energia potențială U constantă în timp, nu este bine determinată ci numai *statistic determinată*.

Un caz particular al problemei îl constituie ***cazul stărilor staționare***. O stare staționară este descrisă de funcția

$$\Psi(\vec{r}, t) = u_m(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} = \sum_n A_n^{(0)} u_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \text{ în care } A_n^{(0)} = \delta_{nm}$$

Probabilitatea de realizare a valorii proprii E_n este:

$$P_{E_n} = |A_n^{(0)}|^2 = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{pentru } E_n = E_m \\ 0 & \text{pentru } E_n \neq E_m \end{cases}$$

Rezultă așadar că în starea descrisă de funcția proprie u_m se va obține prin măsură -

rea energiei particulei *cu certitudine valoarea E_m , o altă valoare $E_n \neq E_m$ fiind exclusă*. Ajungem din nou la concluzia semnalată de altfel și cu alte ocazii că *într-o stare staționară particula cuantică manifestă o valoare a energiei bine determinată*.

1.2 SOLUȚII ALE ECUAȚIILOR SCHRÖDINGER ÎN CAZURI PARTICULARE DE INTERES

Dependența de $\vec{r}$ a energiei potențiale ce caracterizează câmpul de forțe în care evoluează o particulă cuantică stabilește comportarea acesteia descrisă de funcția de undă $\Psi(\vec{r}, t)$ soluție a ecuației Schrödinger temporale. În această secțiune însă, vom analiza câteva cazuri de interes fizic în care ne vom ocupa de rezolvarea ecuației cu valori proprii ale energiei (8.9) care definește spectrul energetic și cuantificarea unor mărimi fizice cum ar fi: pulsația, impulsul sau momentul cinetic. Vom aborda *treapta de potențial* și *bariera de potențial* (cu explicarea *efectului tunel*) ce se pot interpune în calea unei particule libere care se deplasează rectiliniu și uniform în direcția axei Ox , *groapa* cu pereții infiniți și aceea cu pereții finiți, *oscilatorul armonic cuantic* și *problema câmpului central coulumbian*.

Toate aceste cazuri sunt modele idealizate ale unor situații fizice concrete. Astfel *efectul tunel* explică emisia la rece a electronilor dintr-un metal, dezintegrarea α sau funcționarea diodelor tunel, *groapa de potențial* a fost folosită de Sommerfeld în explicarea proprietăților metalelor, *oscilatorul armonic* explică radiația termică sau difuzia luminii, *câmpul central coulumbian* îl întâlnim la atomul de hidrogen ,etc.

1.2.1 TREAPTA (SALTUL) DE POTENȚIAL.

Analizăm evoluția unei particule de masă m care se deplasează rectiliniu după o direcție pe care o vom considera drept axă Ox într-un câmp de forțe ce derivă dintr-o

energie potențială $U(x)$ de forma: $U(x) = \begin{cases} 0 & \text{pentru } x < 0 \\ U_0 & \text{pentru } x \geq 0 \end{cases}$

Se constată că în $x=0$, funcția potențial $U(x)$ prezintă un salt ce definește o treaptă de înălțime U_0 și care separă semiplanul superior în două regiuni: regiunea I din care vine particula ca particulă liberă cu o anumită energie cinetică E_c și regiunea II în care particula—în afara energiei cinetice E_c —va suporta efectul unei energii potențiale constante U_0 .

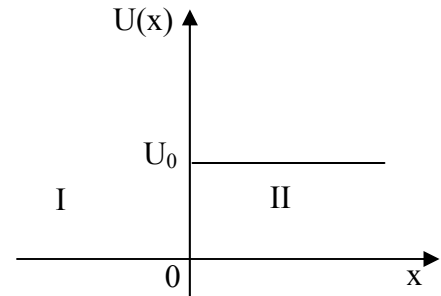


Figura 8.1

- **Sub aspect clasic**, energia totală a particulei, va fi:

$$E = E_c = \frac{mv_I^2}{2}, \text{ în regiunea I ;}$$

$$E = E_c + U_0 = \frac{mv_{II}^2}{2} + U_0, \text{ în regiunea II.}$$

Conservarea energiei stabilește că $v_{II} = \sqrt{v_I^2 - \frac{2U_0}{m}}$. Distingem **două cazuri** :

$$\text{i) } \frac{mv_I^2}{2} > U_0$$

În acest caz, particula pătrunde în regiunea II și se va propaga în continuare în direcția x cu viteză diminuată, $v_{II} < v_I$.

$$\text{ii) } \frac{mv_I^2}{2} < U_0$$

Această situație nu este compatibilă cu o propagare în continuare și particula se va reflecta pe limita $x=0$ a treptei de potențial întorcându-se în regiunea I.

- **Sub aspect cuantic**, vom nota cu $u_I(x)$ și respectiv $u_2(x)$ funcțiile proprii ale energiei ce descriu evoluția particulei în regiunile I și II care verifică ecuațiile cu valori proprii (8.9) ale energiei scrise pentru fiecare dintre cele două regiuni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_1}{dx^2} = E u_1, \text{ pentru } x < 0 \quad (8.30)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_2}{dx^2} + U_0 u_2 = E u_2, \text{ pentru } x \geq 0. \quad (8.31)$$

Vom folosi notațiile

$$k_1^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (8.32)$$

$$k_2^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \quad (8.33)$$

astfel că ecuația (8.30) se scrie $\frac{d^2 u_1}{dx^2} + k_1^2 u_1 = 0$ și admite soluții de forma:

$$u_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (8.34)$$

A_1 și B_1 fiind constante ce vor rezulta impunând funcției u , **condițiile de regularitate** aceasta însemnând *mărginire, continuitate* și să admită *derivate continue*.

- *Primul termen* din (8.34) conține *factorul de fază* $e^{ik_1 x}$ ce evidențiază o *propagare în sensul pozitiv al axei Ox* și îl vom atribui *undei asociate microparticulei incidentă pe treaptă în poziția $x=0$ ce marchează limita distribuției potențialului* (unda progresivă), coeficientul A_1 reprezentând *amplitudinea* acestei unde asociate.

- *Termenul al doilea* evidențiază *propagarea în sensul negativ al axei Ox* a undei reflectate pe limita $x=0$ a treptei de potențial (undă regresivă), B_1 fiind *amplitudinea* acestei unde. Cum B_1 este în general diferit de A_1 în mod necesar se evidențiază un **coeficient de reflexie** $r = \frac{B_1}{A_1}$. Rezolvarea ecuației (8.31) presupune considerarea a

două situații:

1. $E > U_0$

În acest caz $k_2^2 > 0$. Ecuația caracteristică va admite soluțiile $\pm ik_2$, astfel că

$$u_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \quad (8.35)$$

Și în acest caz *primul termen descrie unda progresivă în regiunea II*.

Al doilea termen reprezentând unda regresivă în această regiune este lipsit de semnificație fizică întrucât, regiunea II fiind infinită nu ne putem confrunta cu o reflexie, motiv pentru care în mod necesar $B_2 = 0$. Unda descrisă de $u_2(x)$ fiind o undă transmisă cu amplitudinea A_2 vom introduce și un coeficient de transmisie

$t = \frac{A_2}{A_1}$. Pentru exprimarea coeficienților A_1, A_2, B_1 scriem condițiile la limita $x=0$

$$u_1(0) = u_2(0) \quad (8.36)$$

$$\left. \frac{du_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{du_2}{dx} \right|_{x=0} \quad (8.37)$$

din care rezultă relațiile:

$$A_1 + B_1 = A_2 \quad (8.38)$$

$$k_1(A_1 - B_1) = k_2 A_2 \quad (8.39)$$

Sistemul format din aceste două ecuații, conține trei necunoscute astfel încât vom exprima amplitudinile undelor reflectată și transmisă în funcție de amplitudinea unei incidente. Obținem

$$A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1; \quad B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1. \quad (3.40)$$

Rezultă pentru r și t expresiile

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}; \quad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (8.41)$$

care permit exprimarea reflectanței $R = r^2$ și a transmitanței $T = t^2$. Se verifică și cuantic conservarea energiei

$$R + T = 1 \quad (8.42)$$

2. $E < U_0$

În acest caz $E - U_0 < 0$ și vom nota

$$E - U \equiv -k^2 \quad (8.43)$$

Ecuția (8.31) devine:

$$\frac{d^2 u_2}{dx^2} - k^2 u_2 = 0 \quad (8.44)$$

și admite soluții de forma

$$u_2(x) = Ce^{kx} + De^{-kx} \quad (8.45)$$

Mărginirea la infinit a funcției $u_2(x)$ presupune în mod necesar $C=0$. Ne confruntăm însă cu o densitate de probabilitate de localizare a microparticulei în regiunea II diferită de zero dar care va descrește exponențial cu creșterea lui x .

$$P_2 = |u_2(x)|^2 = |D|^2 e^{-2kx} \quad (8.46)$$

Descreșterea va fi cu atât mai pronunțată cu cât diferența $U_0 - E$ va fi mai mare. Acest aspect evidențiază o comportare cuantică a microparticulei diferită de cea clasică în care regiunea II este total inaccesibilă microparticulei. Observăm așadar că din punctul de vedere cuantic există o șansă de localiza microparticula în regiunea II în apropierea lui $x=0$. Această șansă este cu atât mai semnificativă cu cât energia cinetică a microparticulei este mai mare și cu cât evaluarea ei se consideră într-un punct mai apropiat de $x=0$.

1.2.2 BARIERA DE POTENȚIAL . EFECTUL TUNEL

Considerăm o microparticulă de masă m care se deplasează în direcția axei Ox și întâlnește în $x=0$ o barieră de potențial dreptunghiulară definită de funcția

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{pentru } x < 0 \text{ și } x > a \\ U_0 & \text{pentru } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

reprezentată în figura 8.2. Presupunem că particula se mișcă în sensul pozitiv al axei Ox și atinge limita $x=0$ a barierei cu energia cinetică

$$E_0 = E.$$

-**Sub aspect clasic**, particula poate ajunge în regiunea III numai dacă $E > U_0$.

Pentru $E < U_0$ (ca și în cazul treptei de înălțime U_0) ea se reflectă în $x=0$.

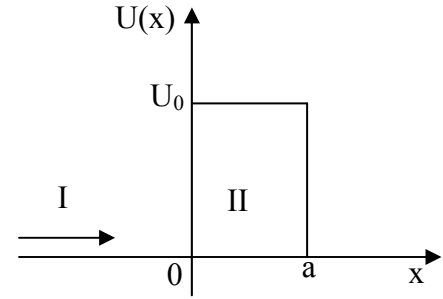


Figura 8.2

-**Sub aspect cuantic** unda incidentă se poate reflecta sau poate străpunge bariera prin **efect tunel** pătrunzând în regiunea III. În acest caz bariera va fi devenit *transparentă*. *Străpungerea barierei este condiționată de extinderea acesteia și de energia microparticulei*. Pentru o barieră suficient de extinsă sau o microparticulă cu energie cinetică suficient de mică, efectul barierei va fi același cu al saltului de potențial. Nu vom mai relua discutarea cazului $E > U_0$ întrucât această discuție nu va aduce ceva nou față de problema saltului de potențial. Așa cum am semnalat, cazul $E < U_0$ devine însă interesant de aceea vom rezolva ecuația lui Schrödinger independentă de timp în acest caz pentru fiecare dintre cele trei regiuni:

$$\frac{d^2 u_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E u_1 = 0 \quad \text{pentru } x < 0$$

$$\frac{d^2 u_2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) u_2 = 0 \quad \text{pentru } 0 < x < a$$

$$\frac{d^2 u_3}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E u_3 = 0 \quad \text{pentru } x > a$$

Vom nota $\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv k^2$; $\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \equiv \alpha^2$

obținând astfel soluțiile:

$$\begin{aligned} u_1(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & ; & \quad x < 0 \\ u_2(x) &= A_2 e^{\alpha x} + B_2 e^{-\alpha x} & ; & \quad 0 \leq x \leq a \\ u_3(x) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} & ; & \quad x > a \end{aligned}$$

Primul termen din $u_1(x)$ corespunde unei progresive ce se propagă spre barieră iar termenul al doilea, unei regresive reflectate. Cum în regiunea III nu există undă regresivă rezultă în mod necesar $B_3 = 0$. Impunem condițiile la limitele 0 și a:

$$\begin{aligned} u_1|_{x=0} &= u_2|_{x=0} & ; & \quad \frac{du_1}{dx}\bigg|_{x=0} = \frac{du_2}{dx}\bigg|_{x=0} \\ u_2|_{x=a} &= u_3|_{x=a} & ; & \quad \frac{du_2}{dx}\bigg|_{x=a} = \frac{du_3}{dx}\bigg|_{x=a} \end{aligned}$$

Vom obține ecuațiile:

$$\begin{aligned} \text{i) } & A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ \text{ii) } & ik(A_1 - B_1) = \alpha(A_2 - B_2) \\ \text{iii) } & A_2 e^{\alpha a} + B_2 e^{-\alpha a} = A_3 e^{ika} \\ \text{iv) } & \alpha(A_2 e^{\alpha a} - B_2 e^{-\alpha a}) = ikA_3 e^{ika} \end{aligned}$$

Împărțind prin A_1 aceste ecuații și introducând notațiile

$$b_1 \equiv \frac{B_1}{A_1} ; a_2 = \frac{A_2}{A_1} ; b_2 = \frac{B_2}{A_1} ; a_3 = \frac{A_3}{A_1} ; n = \frac{\alpha}{k}$$

ecuațiile devin:

$$\begin{aligned} \text{i}_1. & 1 + b_1 = a_2 + b_2 \\ \text{ii}_1. & i - ib_1 = na_2 - nb_2 \\ \text{iii}_1. & a_2 e^{\alpha a} + b_2 e^{-\alpha a} = a_3 e^{ika} \\ \text{iv}_1. & n(a_2 e^{\alpha a} - b_2 e^{-\alpha a}) = ia_3 e^{ika} \end{aligned}$$

Introducem *transparența* D a barierei ca fiind *raportul între intensitatea undeii în regiunea III care a reușit să treacă prin barieră și intensitatea undeii incidente*

$$D \equiv \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |a_3|^2 \quad (8.47)$$

Pentru a stabili expresia *transparenței* ca funcție de mărimile presupuse cunoscute m , U_0 , E , a înmulțim ecuația i_1 cu unitatea imaginară $i = \sqrt{-1}$ și o adunăm la ecuația ii_1 obținând relația

$$2i = (n + i)a_2 - (n - i)b_2 \quad (8.48)$$

Înmulțim apoi iii_1 cu i și scăzând rezultatul din iv_1 , rezultă:

$$(n - 1)e^{\alpha a} a_2 - (n + i)e^{-\alpha a} b_2 = 0 \quad (8.49)$$

Rezolvăm sistemul format din ultimele două ecuații și găsim

$$a_2 = \frac{2i(n + i)e^{-\alpha a}}{(n + i)^2 e^{-\alpha a} - (n - i)^2 e^{\alpha a}} \quad (8.50)$$

$$b_2 = \frac{2i(n - i)e^{\alpha a}}{(n + i)^2 e^{-\alpha a} - (n - i)^2 e^{\alpha a}} \quad (8.51)$$

Introducem aceste expresii în iii_1 și obținem expresia pentru a_3 :

$$a_3 = \frac{4ni}{(n + i)^2 e^{-\alpha a} - (n - i)^2 e^{\alpha a}} e^{-ika} \quad (8.52)$$

Valorile $\alpha a \equiv \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} a$ sunt de regulă mult mai mari decât unu astfel că vom neglija termenul de la numitor care conține factorul $e^{-\alpha a}$. Aproximăm astfel a_3 prin expresia

$$a_3 \approx -\frac{4nie^{-ika}}{(n - i)^2} e^{-\alpha a} \quad (8.53)$$

astfel că (8.47) se va scrie

$$D \approx \frac{16n^2}{(n^2 + 1)^2} e^{-2\alpha a} \quad (8.54)$$

în care $n^2 = \frac{U_0 - E}{E} = \frac{U_0}{E} - 1$. Se constată că factorul $D_0 \equiv \frac{16n^2}{(n^2 + 1)^2}$ este de ordinul unității, rezultând în definitiv,

$$D \approx e^{-2\alpha a} = \exp\left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right] \quad (8.55)$$

Această expresie evidențiază o scădere semnificativă a transparenței cu creșterea masei m a particulei. Efectul tunel este absurd din punctul de vedere clasic neavând corespondent în fizica clasică. Explicarea cuantică a efectului tunel se bazează pe principiul de incertitudine în virtutea căruia - din punctul de vedere cuantic - energia totală a particulei nu poate fi considerată ca sumă între energia cinetică și cea potențială întrucât aceasta ar însemna că la un același moment energia cinetică - și implicit impulsul p al microparticulei - și energia potențială - deci implicit poziția x a acesteia - ar avea (simultan deci) valori precizate, situație exclusă de principiul de incertitudine care stabilește că impulsul și poziția variabilei conjugate canonic în fizica clasică sunt observabile incompatibile în teoria cuantică. În acest sens, dacă energia cinetică a microparticulei este precizată la un anumit moment, în acel moment nu se poate afirma nimic despre valoarea energiei potențiale.

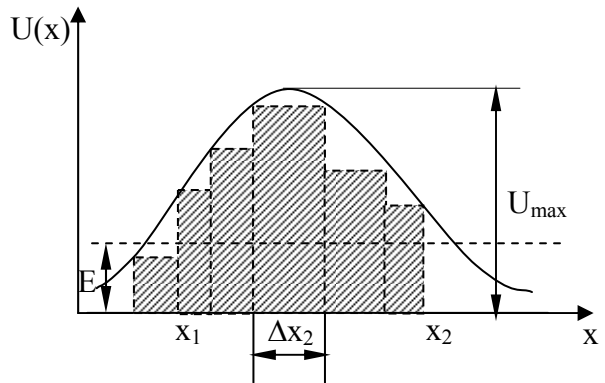


Figura 8.3

Bariera de potențial dreptunghiulară este însă numai un model simplificat de barieră, care permite să se considere o barieră de potențial de o formă oarecare cum ar fi aceea

prezentată în figura 8.3 ca o succesiune de bariere dreptunghiulare de lăţimi Δx_i şi având înălţimile $U(x_i)$. Particula incidentă cu energia $E < U(x)$ va întâmpina bariere numai în regiunea delimitată de x_1 şi x_2 .

Considerând în expresia (8.55) şi factorul D_0 obţinem pentru *transparenţa* D_i a barierei definite de zona Δx_i expresia $D_i = D_{0i} e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U(x_i)-E)} \cdot \Delta x_i}$.

Un raţionament simplu efectuat în baza observaţiei că amplitudinea unei incidente pe bariera i este egală cu aceea rezultată din bariera $i-1$ prin efect tunel, arată că transparenţa totală a celor n bariere conţinute în zona (x_1, x_2) rezultă ca fiind produsul transparenţelor celor n bariere:

$$D = D_{01} \cdot D_{02} \cdots D_{0n} e^{-\frac{2}{\hbar} \sum_{i=1}^n \sqrt{2m[U(x_i)-E]} \cdot \Delta x_i} \quad (8.56)$$

Prin divizarea din ce în ce mai fină a intervalului (x_1, x_2) şi notând

$$D_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} (D_{01} \cdot D_{02} \cdots D_{0n})$$

se obţine în definitiv printr-un proces de trecere la limită în (8.56), expresia *transparenţei* D a barierei de formă oarecare definită de funcţia $U(x)$.

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x)-E]} dx} \quad (8.57)$$

1.2.3 GROAPA DE POTENŢIAL CU PEREŢII INFINIŢI

Vom considera acum o *groapă de potenţial* definită de o distribuţie unidimensională a potenţialului de forma:

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{pentru } x < 0 \text{ şi } x > a \\ 0 & \text{pentru } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

O particulă cuantică de masă m și energie E se mișcă liber în cadrul limitelor $x=0$ și $x=a$.

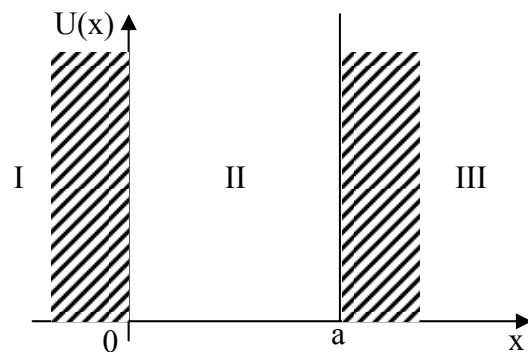


Figura 8.4

Sub aspect clasic, energia particulei ce evoluează în acest câmp de forțe poate avea orice valoare. *Cuantic*, expresiile energiilor posibile vor rezulta prin rezolvarea ecuației Schrödinger ca valori

proprii ale operatorului hamiltonian observând că în regiunile I și II funcțiile de undă sunt nule, în timp ce în regiunea II funcția de undă $u_2(x)$ va trebui să satisfacă ecuația Schrödinger independentă de timp

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_2}{dx^2} = E u_2. \quad (8.58)$$

Notăm $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$ și obținem ecuația $\frac{d^2 u_2}{dx^2} + k^2 u_2 = 0$ cu soluția oscilantă ,

$$u_2(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (8.59)$$

în care constantele A și B sunt arbitrare ce vor rezulta impunând condițiile de continuitate $u_1|_{x=0} = u_2|_{x=0} = 0$ și $u_2|_{x=a} = u_3|_{x=a} = 0$.

Obținem $B = 0$ și $A \sin ka = 0$. Anularea ambelor constante nu are semnificație fizică de interes, astfel că va rezulta $\sin ka = 0$ care presupune

$$ka = n\pi \quad \text{cu} \quad n \in \mathbb{Z}$$

În acest fel, valorile k vor defini un spectru discret de valori k_n generând în acest mod un spectru discret al energiilor:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2 \quad (8.60)$$

Concluzia care se desprinde este că *din punct de vedere cuantic, energia particulei ce evoluează în interiorul unei gropi de potențial cu pereți infiniți nu poate*

avea orice valoare ci numai valori cuantificate. **Starea fundamentală** corespunde valorii n_1 . În această stare particula are energia $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2}$ și impulsul particulei va avea corespunzător valoarea $p_1 = \sqrt{2mE_1} = \hbar \frac{\pi}{a}$.

Constanta A se determină din condiția de normare $\int_{-\infty}^{\infty} u_n^* u_n dx = 1 = \int_0^a u_n^* u_n dx$, sau echivalent

$$A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1 \text{ din care rezultă } A = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{ și în definitiv, expresia ce definește}$$

funcțiile de undă:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (8.61)$$

Această expresie stabilește că *unde asociate microparticulei în interiorul gropii sunt unde staționare cu lungimile de undă având valori cuantificate egale cu $\frac{2a}{n}$ și - depinzând de nivelul energetic cuantificat de n^2 - probabilitatea de a găsi particula în interiorul gropii de potențial este maximă în regiunea în care $|u|^2$ are un maxim așa cum se poate urmări în figura 8.5.*

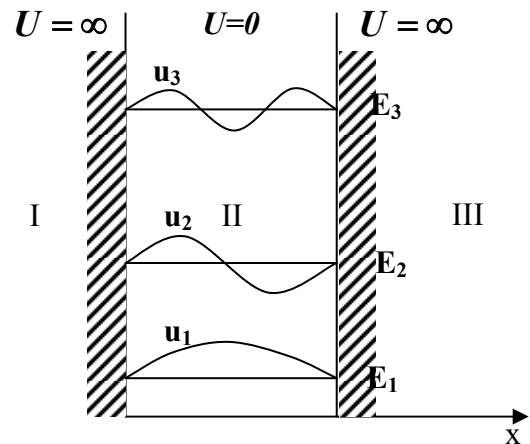


Figura 8.5

1.2.4 GROAPA DE POTENȚIAL CU PEREȚII DE ÎNĂLȚIME FINITĂ

Vom stabili acum funcțiile proprii și valorile proprii ale energiei unei particule de masă m aflată în interiorul unei **gropi de potențial cu pereții de înălțime finită U_0** .

Cazul de interes ce se desprinde din tabloul fizic propus este cel în care energia E a particulei este mai mică decât înălțimea U_0 a pereților.

Distribuția de câmp potențial se exprimă prin

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{pentru } x < 0 \text{ și } x > a \\ 0 & \text{pentru } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

și este reprezentată în figura 8.6.

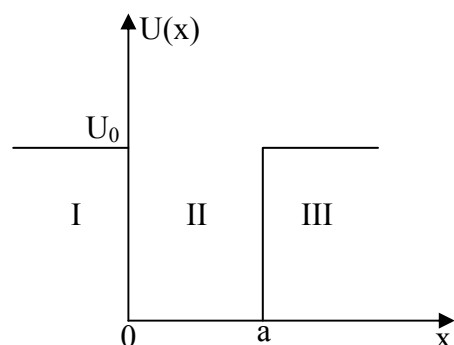


Figura 8.6

Folosind notațiile $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$ și $k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}E$

ecuațiile Schrödinger scrise pentru zonele I, II și III, vor admite soluțiile

$$u_{1,3}(x) = A_{1,3}e^{\alpha x} + B_{1,3}e^{-\alpha x}$$

$$u_2(x) = A_2 \sin kx + B_2 \cos kx$$

Condițiile de mărginire impuse funcțiilor u_1 la $-\infty$ și u_2 la $+\infty$ presupun în mod necesar anularea constantelor B_1 și A_3 . Impunând condițiile la limită

în punctele de discontinuitate ale potențialului adică în $x=0$ și $x=a$ se obțin relațiile:

$$A_1 = B_2$$

$$\alpha A_1 = k A_2$$

$$A_2 \sin ka + B_2 \cos ka = B_3 e^{-\alpha a}$$

$$k A_2 \cos ka - k B_2 \sin ka = -\alpha B_3 e^{-\alpha a}$$

Condiția de compatibilitate a acestui sistem liniar cere anularea determinantului

principal din care rezultă $\operatorname{tg} ka = \frac{2k\alpha}{k^2 - \alpha^2}$. Înlocuind expresiile pentru k și α , se

obține ecuația transcendentă $\operatorname{tg} \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mE} = \frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{2E - U_0}$.

Pentru a rezolva această ecuație, notăm $x = \sqrt{E}$, $\beta \equiv \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m}$, $f(x) \equiv \operatorname{tg} \beta x$,

$g(x) \equiv \frac{2x\sqrt{U_0 - x^2}}{2x^2 - U_0}$ și ecuația se scrie $f(x) = g(x)$. Reprezentând grafic funcțiile $f(x)$

și $g(x)$, intersecțiile celor două curbe vor defini un spectru discret al valorilor x_n și implicit E_n cu n întreg.

Funcția $g(x)$ se anulează în $x=0$ și $x = \sqrt{U_0}$ așa cum se observă în figura 8.7 și

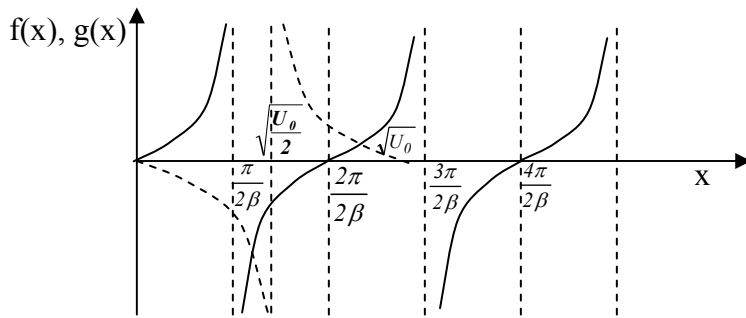


Figura 8.7

admite o asimptotă verticală în

$$x = \sqrt{\frac{U_0}{2}}.$$

Anularea determinantului principal în virtutea teoremei lui Rou - ché permite exprimarea a trei dintre coeficienții A_1 , A_2 , B_2 ,

B_3 în funcție de al patrulea care se va determina din condiția de normare impusă funcțiilor $u(x)$:

$$\int_{-\infty}^0 u_1^* u_1 dx + \int_0^a u_2^* u_2 dx + \int_a^{\infty} u_3^* u_3 dx = 1$$

Se observă că și în acest caz densitățile de probabilitate de localizare a microparticulei în regiunile I și III vor fi nenule scăzând însă rapid cu depărtarea de pereții gropii.

$$P_1 = u_1^* u_1 = A_1^2 e^{-2\alpha|x|}$$

$$P_3 = u_3^* u_3 = B_3^2 e^{-2\alpha x}$$