

## CAP. IV. ELEMENTE DE MECANICĂ CUANTICĂ

### IV.1. Bazele experimentale ale fizicii cuantice

#### 1. Radiația termică

este o radiație electromagnetică datorată mișcării de agitație termică a particulelor constituente ale unui corp aflat la o anumită temperatură. *Radiația termică de echilibru* apare când energia emisă de corp în unitatea de timp este egală cu cea absorbită. Exemplu: un corp încălzit introdus într-o incintă cu pereți perfect reflectători emite radiație de echilibru când temperatura corpului este egală cu cea a incintei.

#### **Mărimi fizice caracteristice**

a) *Fluxul energetic radiant* reprezintă energia emisă de corp în unitatea de timp:

$$\Phi = \frac{dW}{dt} \quad (\text{unitatea de măsură: watt}) \quad (\text{IV.1})$$

b) *Puterea de emisie* (radianța integrală) este energia emisă în unitatea de timp prin unitatea de suprafață, în toate direcțiile, pentru toate frecvențele:

$$\varepsilon = R = \frac{d\Phi}{dA} = \frac{d^2W}{dAdt} \quad (\text{se măsoară în W/m}^2) \quad (\text{IV.2})$$

c) *Puterea de emisie spectrală* (radianța spectrală) este puterea de emisie pe unitatea de interval de frecvență:

$$\varepsilon_{\nu,T} = \frac{d\varepsilon}{d\nu} \quad (\text{se măsoară în J/m}^2) \quad (\text{IV.3})$$

Radianța integrală este deci: 
$$\varepsilon = R = \int_0^{\infty} \varepsilon_{\nu,T} d\nu \quad (\text{IV.4})$$

d) *Puterea de absorbție* (coeficientul de absorbție):

$$A_{\nu,T} = \frac{d\Phi_{abs}}{d\Phi_{inc}} \quad (\text{IV.5})$$

Pentru **corpul negru** acest coeficient este 1: 
$$A_{\nu,T,N} = 1 \quad (\text{IV.6})$$

*Exemplu de corp negru:* o incintă izotermă sferică prevăzută cu un mic orificiu (Fig. IV.1a); în acest sistem radiația termică este absorbită integral datorită reflexiilor succesive pe pereți (din orice punct al incintei orificiul se vede sub un unghi mai mic de 0,01 rad). Intensitatea radiației emise este direct proporțională cu densitatea de energie din cavitate.

**Legile lui Kirchhoff**

1. Radiația termică de echilibru este omogenă (independentă de punctul din cavitate), izotropă (independentă de direcție) și nepolarizată.

2. Pentru un interval de frecvențe  $[\nu, \nu + d\nu]$  dat, la o temperatură dată, raportul dintre puterea de emisie spectrală și puterea de absorbție este o funcție universală (adică nu depinde de natura corpului), dependentă de frecvență și temperatură, reprezentând puterea de emisie spectrală a corpului negru.

$$\frac{\varepsilon_{\nu, T}}{A_{\nu, T}} = f(\nu, T) = \varepsilon_{N, \nu, T} \quad (IV.7)$$

Suprafața corpului negru este deci o suprafață emițătoare - etalon.

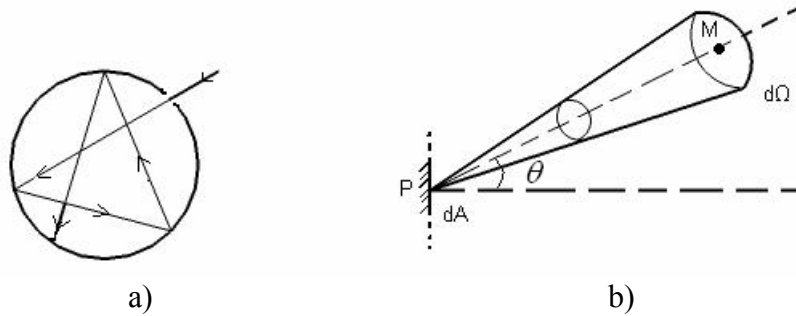


Fig. IV. 1. a) Exemplu de corp negru; b) Unghiul solid (necesar în definirea strălucirii energetice).

**Alte mărimi fizice caracteristice:**

e) Densitatea volumică de energie radiantă:  $w = \frac{dW}{dV}$  (se măsoară în  $J/m^3$ ) (IV.8)

f) Densitatea volumică spectrală de energie radiantă:

$$\rho_{\nu, T} = \frac{dw}{d\nu} = \frac{d^2W}{dVd\nu} \text{ (se măsoară în } J.s/m^3) \quad (IV.9)$$

Atunci:  $w = \int_0^{\infty} \rho_{\nu, T} d\nu$  (IV.10)

g) Strălucirea energetică reprezintă energia emisă în unitatea de timp prin unitatea de suprafață, în unitatea de unghi solid, deci într-o anumită direcție ( $\theta$ ), pentru toate frecvențele:

$$B = \frac{d^3W}{dA \cos \theta dt d\Omega} \quad (IV.11)$$

unde  $dA$  este elementul de suprafață în jurul punctului P (Fig. IV.1b),  $d\Omega$  este elementul de unghi solid;  $\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ ;  $\varphi \in [0, 2\pi]$  în planul suprafeței  $dA$ .

Există relațiile:  $\varepsilon = R = \pi B$  și  $\varepsilon = R = \frac{c}{4} w$  (IV.12; 13)

din care:  $w = \frac{4\pi B}{c}$  (IV.14)

Strălucirea energetică se măsoară experimental, iar densitatea volumică de energie radiantă se determină prin calcul.

**Legile empirice ale radiației termice de echilibru pentru corpul negru**

1° Legea Stefan - Boltzmann

*Radianța integrală a corpului negru este direct proporțională cu puterea a patra a temperaturii absolute.*

$$R_N = \sigma T^4, \tag{IV.15}$$

unde  $\sigma \cong 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$  este constanta Stefan – Boltzmann (vezi lucrarea de laborator “Verificarea legii Stefan-Boltzmann”).

2° Legea lui Wien

*Densitatea volumică spectrală de energie este direct proporțională cu puterea a treia a frecvenței și cu o funcție care depinde de raportul dintre frecvență și temperatura absolută.*

$$\rho_{\nu, T, N} = \nu^3 g\left(\frac{\nu}{T}\right). \tag{IV.16}$$

Această lege este valabilă la frecvențe mari (domeniul ultraviolet).

3° Legea deplasării Wien

*Densitatea volumică spectrală de energie are un maxim pentru o anumită frecvență  $\nu_M$  (respectiv lungime de undă  $\lambda_M$ ) astfel încât raportul dintre această frecvență și temperatura absolută este constant (produsul dintre această lungime de undă și temperatura absolută este constant; Fig. IV. 2).*

$$\frac{\nu_M}{T} = \text{const.} \quad \text{sau} \quad \lambda_M T = \text{const.} = b \tag{IV.17}$$

unde  $b \cong 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ m}\cdot\text{K}$  este constanta Wien.

4° Legea Rayleigh - Jeans

*Densitatea volumică spectrală de energie este direct proporțională cu puterea a doua a frecvenței și cu temperatura absolută.*

$$\rho_{\nu, T, N} = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3}. \quad (\text{IV.18})$$

Această lege este valabilă la frecvențe mici (domeniul infraroșu).

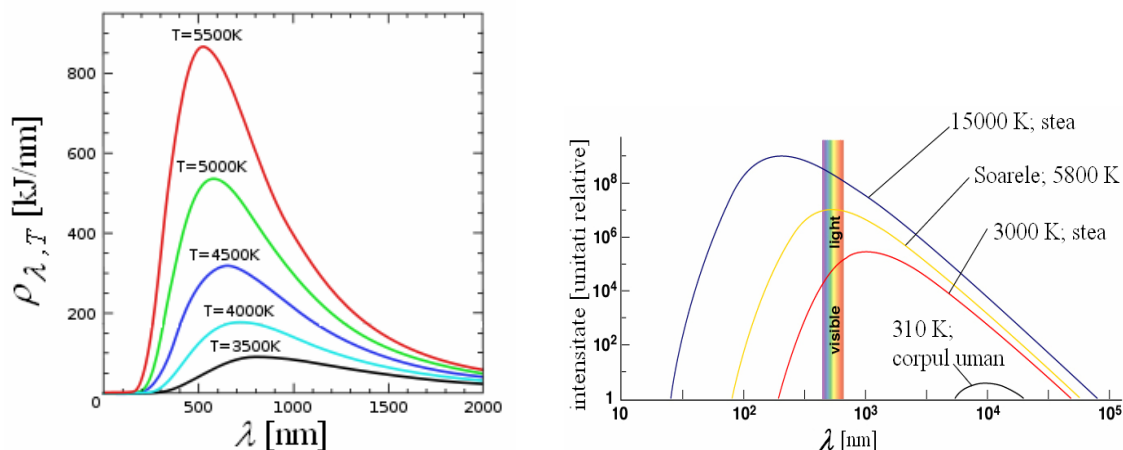


Fig. IV. 2. Legea deplasării Wien (valabilă pentru radiația termică de echilibru a corpului negru).

### **Teoria lui Planck pentru radiația termică**

Teoria fonică elaborată de Planck afirmă că emisia și absorbția energiei are loc sub forma unor cuante (porții) de energie numite **fotoni**.

#### *Proprietățile fotonului*

a) energia este direct proporțională cu frecvența:  $\varepsilon = h\nu$  (IV.19)

unde  $h = 6,6 \cdot 10^{-34}$  J·s este constanta lui Planck; se mai folosește:  $\hbar = h/(2\pi)$ ;

b) viteza fotonului, în vid, este  $c = 3 \cdot 10^8$  m/s;

c) impulsul fotonului este invers proporțional cu lungimea de undă:  $p = \frac{h}{\lambda}$  (IV.20)

d) masa de repaus este nulă, iar cea de mișcare este direct proporțională cu frecvența:

$$m_f = \frac{h\nu}{c^2} \quad (\text{IV.21})$$

Pe baza teoriei fotonilor se obține formula Planck a radiației termice prin calculul energiei medii de oscilație. Energia unui oscilator nu poate avea, conform teoriei fotonice, orice valoare, ci numai valori de forma:

$$E_n = nh\nu \quad \text{cu: } n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{IV.22})$$

Energia medie este:

$$\bar{E} = \frac{h\nu}{e^{kT} - 1} \quad (\text{IV.23})$$

Conform teoriei M. Born densitatea volumică spectrală de energie radiantă pentru corpul negru este direct proporțională cu pătratul frecvenței ( $\nu^2$ ) și cu energia medie a de oscilație ( $\bar{E}$ ):

$$\rho_{\nu, T, N} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \bar{E} \quad (\text{IV.24})$$

Din ultimele două relații rezultă formula Planck a radiației termice:

$$\rho_{\nu, T, N} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{kT} - 1} \quad (\text{IV.25})$$

## 2. Efectul fotoelectric extern

constă în *eliberarea de electroni dintr-un corp sub acțiunea radiației electromagnetice dacă frecvența acesteia depășește valoarea de prag.*

Pentru stabilirea legilor efectului fotoelectric se folosește dispozitivul experimental prezentat în Fig. IV.3. Într-o incintă vidată se găsesc doi electrozi, catodul K și anodul A, electrodul K (confeționat, de obicei, dintr-un metal alcalin) fiind iradiat cu un fascicul luminos (celulă fotoelectrică). Frecvența și fluxul luminos al radiației incidente pe K pot fi variate. Între catodul iradiat și anod se aplică o diferență de potențial  $U$ . Se studiază dependența intensității curentului fotoelectric  $I$  (format de electronii eliberați din catodul iradiat) de tensiunea  $U$  și de frecvența luminii folosite. Aplicând între anod și catod un câmp electric de frânare a electronilor emiși de catod, câmp descris prin tensiunea de frânare  $U_f < 0$ , se determină, pentru diferite frecvențe ale radiației incidente pe catod, tensiunea la care se anulează intensitatea curentului fotoelectric, numită *tensiune de stopare*  $U_s$ .

Caracteristica curent - tensiune  $I = f(U)$  pentru diferite valori ale fluxului luminos  $\Phi$  incident pe catod, prezentată în Fig. III. 4a, arată existența unui curent de saturație  $I_{sat}$ , iar dependența tensiunii de stopare  $U_s$  de frecvența  $\nu$  a luminii este, conform Fig. III.4b, liniară.

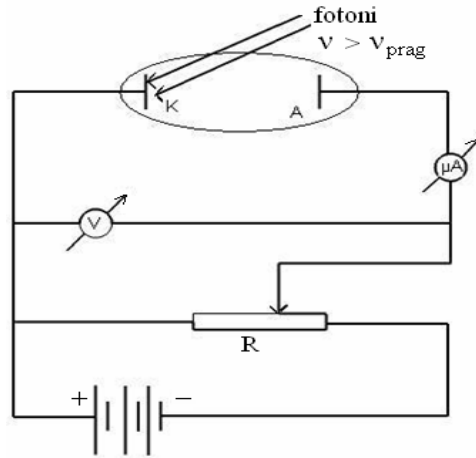


Fig. IV. 3. Schema circuitului utilizat la studiul legilor efectului fotoelectric extern.

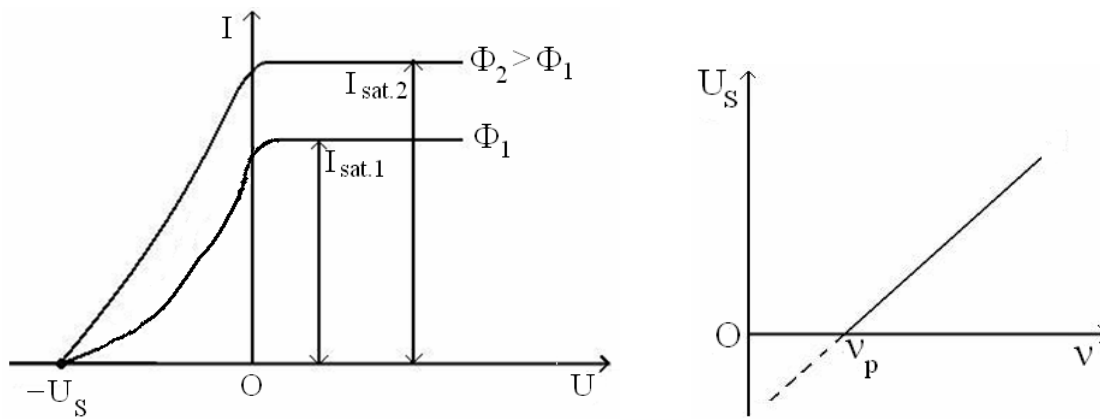


Fig. IV. 4. a) Caracteristica curent-tensiune  $I = f(U)$  pentru două valori ale fluxului luminos incident pe catod; b) Dependența liniară a tensiunii de stopare  $U_s$  de frecvența  $\nu$  a luminii.

### ***Legile efectului fotoelectric extern***

1° Intensitatea curentului fotoelectric de saturație  $I_{sat}$  este direct proporțională cu fluxul luminos  $\Phi$  incident pe catod.

2° Tensiunea de stopare  $U_s$  crește liniar cu frecvența  $\nu$  a radiației incidente pe catod, fiind independentă de fluxul luminos.

3° Pentru o anumită valoare  $\nu_p$  a frecvenței radiației incidente pe catod, numită frecvență de prag, tensiunea de stopare este nulă (Fig. IV.4b), adică pentru  $\nu < \nu_p$  efectul fotoelectric nu se mai produce. Frecvența de prag  $\nu_p$  este o caracteristică a metalului din care este confecționat catodul.

4° Efectul fotoelectric este, practic, instantaneu, electronii fiind emisi de catod într-un timp de ordinul  $10^{-9}$  s de la iluminarea acestuia.

Aceste legi, stabilite experimental, nu pot fi explicate în totalitate prin teorii ale fizicii clasice. De exemplu, conform fizicii clasice, la creșterea fluxului luminos incident pe catod electronii emiși ar trebui să aibă viteze mai mari, deci energii mai mari, dar se constată că energia lor nu se modifică, ci numai numărul lor pe unitatea de timp.

Toate legile efectului fotoelectric pot fi explicate însă pe baza teoriei fotonice (Einstein) și anume: **un foton cedează toată energia sa unui electron** al materialului și, dacă această energie este suficientă, electronul părăsește materialul.

*Legea conservării energiei* pentru acest proces are forma:

$$h\nu = L_{extr} + E_{cin} \quad (IV.26)$$

unde lucrul mecanic de extracție  $L_{extr}$  este suma dintre lucrul mecanic necesar extragerii electronului din atom și lucrul mecanic necesar extragerii electronului din suprafața materialului. La metale  $L_{extr. atom} = 0$ .

$$L_{extr} = L_{extr. atom} + L_{extr. spr} \quad (IV.27)$$

Frecvența de prag  $\nu_p$  reprezintă frecvența minimă pe care trebuie să o aibă un foton pentru a putea extrage un electron ( $E_{cin} = 0$ ):

$$L_{extr} = h\nu_p \quad (IV.28)$$

Energia cinetică a fotoelectronilor se exprimă folosind tensiunea de stopare:

$$E_{cin} = \frac{mv^2}{2} = eU_s \quad (IV.29)$$

Mărimile  $m$ ,  $v$  și  $e$  sunt, respectiv, masa, viteza și sarcina electrică a fotoelectronului. Ecuația (IV.26) devine:

$$h\nu = h\nu_p + eU_s \quad (IV.30)$$

Pe baza acestei ecuații se poate determina experimental constanta lui Planck (vezi lucrarea de laborator: “Determinarea constantei lui Planck din studiul efectului electric extern”).

### 3. Efectul Compton

constă în creșterea lungimii de undă a unei radiații X care este difuzată (împrăștiată) de electronii slab legați ai unei substanțe. Fasciculul de radiații X difuzat conține atât radiații cu lungimea de undă inițială, cât și radiații cu lungime de undă mai mare.

Dispozitivul experimental (Fig. IV.5) este format din sursă de radiații X, sistem de colimare cu plăci de plumb (Pb), probă de material difuzant (P) și detector (D) de radiații X care poate fi rotit. Măsurând creșterea lungimii de undă a radiațiilor X difuzate

se constată că ea nu depinde de natura materialului difuzant, dar depinde de unghiul de difuzie ( $\theta$ ). Desigur, materialul difuzant trebuie să conțină electroni slab legați (exemple: grafit, parafină).

Efectul Compton este interpretat ca o *ciocnire între un foton și un electron aflat în repaus, fotonul cedând electronului o parte din energia sa*. În acest proces se conservă atât energia sistemului, cât și impulsul acestuia.

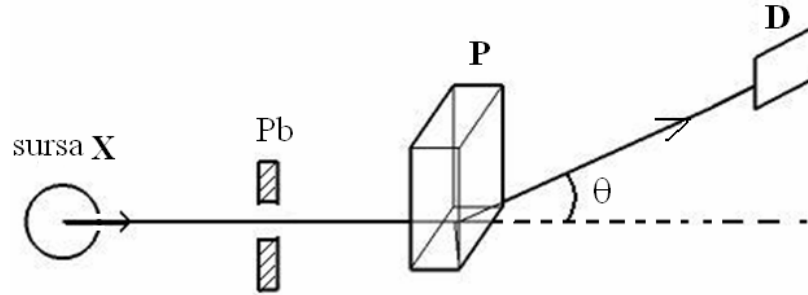


Fig. IV. 5. Schema dispozitivului experimental utilizat la studiul efectului Compton.

Deoarece energia cinetică primită de electron este, în general, mult mai mare decât energia sa de repaus ( $E_{cin} \gg m_0c^2$ ) fenomenul trebuie tratat folosind teoria relativității restrânse. Pentru foton sunt valabile formulele:  $\varepsilon = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$  și  $p = \frac{h}{\lambda}$ , iar pentru electron:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (IV.31)$$

(masa de mișcare  $m$  crește cu viteza  $v$ ;  $m_0$  este masa de repaus)

$$p = mv = \frac{m_0v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (IV.32)$$

$$E = mc^2 \text{ (energia totală în mișcare)} \quad E_0 = m_0c^2 \text{ (energia de repaus)} \quad (IV.33)$$

$$E_{cin} = E - E_0 = c^2(m - m_0) \text{ (energia cinetică)} \quad (IV.34)$$

$$E^2 = p^2c^2 + E_0^2 \quad (IV.35)$$

$$\text{Legea conservării energiei:} \quad h\nu_0 + m_0c^2 = h\nu + mc^2 \quad (IV.36)$$

$$\text{Legea conservării impulsului:} \quad \vec{p}_{f,0} + 0 = \vec{p}_f + \vec{p}_e \quad (IV.37)$$



unde  $\vec{p}_{f,0}$  este impulsul inițial al fotonului,  $\vec{p}_f$  este impulsul final al fotonului, iar  $\vec{p}_e$  este impulsul final al electronului. Proiectăm relația vectorială (IV.37) pe două axe perpendiculare (alegem direcția inițială a fotonului ca axă Ox; Fig. IV. 6). Rezultă:

$$\text{pe Ox:} \quad \frac{h}{\lambda_0} = \frac{h}{\lambda} \cos \theta + p_e \cos \varphi \quad (\text{IV.38})$$

$$\text{pe Oy:} \quad 0 = \frac{h}{\lambda} \sin \theta - p_e \sin \varphi \quad (\text{IV.39})$$

$$\text{Relațiile finale de interes sunt:} \quad \Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) \quad (\text{IV.40})$$

$$\text{și:} \quad \text{tg} \varphi = \frac{\frac{\sin \theta}{\lambda}}{\frac{1}{\lambda_0} - \frac{\cos \theta}{\lambda}} \quad (\text{IV.41})$$

unde:  $\frac{h}{m_0 c} = \Lambda = 0,024 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ) este lungimea de undă Compton,  $\theta$  este unghiul sub care este difuzat fotonul (față de direcția lui inițială), iar  $\varphi$  este unghiul sub care pleacă electronul (numit electron de recul).

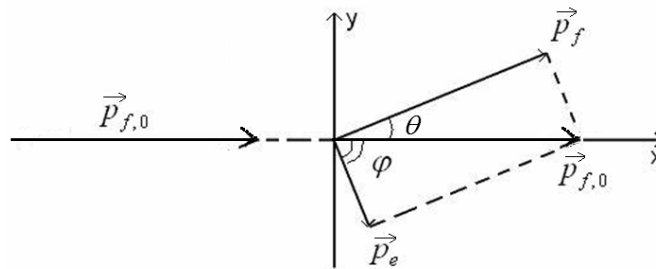


Fig. IV. 6. Legea conservării impulsului la efectul Compton.

#### 4. Modelul atomic Bohr

##### Postulatele lui Bohr

1° *Atomii se află în stări specifice în care nu emit și nu absorb energie, numite stări staționare. Valorile energiei corespunzătoare stărilor staționare formează un șir discret și caracterizează fiecare atom.*

Aceste stări sunt definite prin *condiția de cuantificare* pentru momentul cinetic orbital:

$$L = m v r = n \frac{h}{2\pi}, \text{ unde } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{IV.42})$$

2° Atomii pot emite sau absorbi energie numai prin trecerea dintr-o stare staționară de energie  $E_i$  în altă stare staționară, de energie  $E_f$ . Frecvența radiației emise (în cazul  $E_i > E_f$ ) sau absorbite (în cazul  $E_i < E_f$ ) verifică relația:

$$h\nu = |E_i - E_f|. \quad (\text{IV.43})$$

### Teoria lui Bohr pentru atomul de hidrogen

Atomul de hidrogen este format dintr-un proton (presupus fix) și un electron care se rotește în jurul acestuia. Pe orbita staționară, considerată circulară, forța coulombiană

$F_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$  reprezentând atracția exercitată de proton asupra electronului acționează ca

forță centripetă  $F_{cp} = \frac{mv^2}{r}$ . Deci:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (\text{IV.44})$$

Din relațiile (IV.42) și (IV.44) rezultă raza orbitei staționare numerotate cu  $n$  și viteza electronului pe această orbită:

$$r_n = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} = n^2 r_1 \quad (\text{IV.45})$$

$$v_n = \frac{e^2}{2\epsilon_0 n h} = \frac{v_1}{n} \quad (\text{IV.46})$$

unde  $r_1 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = 0,53 \text{ \AA}$  este raza primei orbite Bohr, iar  $v_1 = \frac{e^2}{2\epsilon_0 h}$  este viteza electronului pe prima orbită Bohr.

Energia sistemului este suma dintre energia cinetică:  $E_{cin} = \frac{mv^2}{2}$  (IV.47)

și energia potențială coulombiană:  $E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$  (IV.48)

Se observă că:  $E_{pot} = -2E_{cin}$ , deci:

$$E = E_{cin} + E_{pot} = \frac{E_{pot}}{2} = -E_{cin} \quad (IV.49)$$

Din relațiile (IV.49), (IV.48) și (IV.45) sau din relațiile (IV.49), (IV.47) și (IV.46) rezultă expresia energiei atomului de hidrogen în starea staționară numerotată  $n$ :

$$E_n = -\frac{m e^4}{8 \epsilon_0 n^2 h^2} = \frac{E_1}{n^2} \quad (IV.50)$$

unde:

$$E_1 = -\frac{m e^4}{8 \epsilon_0 h^2} = -13,6 \text{ eV} \quad (IV.51)$$

este energia atomului de hidrogen în starea staționară  $n = 1$  ( $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ ). Starea cuantică de energie minimă se numește *stare fundamentală*. Pentru atomul de hidrogen aceasta este starea  $n = 1$ , de energie  $E_1$ .

**Observații:**

1° Conform formulei (IV.50) *energia atomului de hidrogen este cuantificată* (valorile ei formează un șir discret) prin numărul natural  $n = 1, 2, 3, \dots$  care se numește *număr cuantic principal*.

2° Valorile energiei atomului de hidrogen sunt negative ceea ce indică faptul că ele corespund unor *stări legate*.

3° Se numește *stare staționară fundamentală* starea de energie minimă. Pentru atomul de hidrogen aceasta este starea de energie  $E_1$ , deci corespunzătoare valorii  $n = 1$ . Stările staționare cu energie  $E > E_{min}$  se numesc *stări excitate*, deci pentru atomul de hidrogen ele corespund la  $n > 1$ .

4° Se numește *energie de ionizare* a atomului de hidrogen energia necesară separării electronului de proton, din starea fundamentală, și îndepărtării electronului la distanță suficient de mare pentru ca interacțiunea proton - electron să fie neglijabilă.

Deci:

$$E_{ioniz} = -E_1 = 13,6 \text{ eV} \quad (IV.51')$$

**Confirmări experimentale ale teoriei Bohr**

a) *seriile spectrale ale atomului de hidrogen*

Dacă  $E_k > E_n$  atomul de hidrogen emite un foton a cărui frecvență  $\nu_{kn}$  se obține din relațiile (IV.47) și (IV.54):

$$h\nu_{kn} = E_k - E_n = |E_1| \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (IV.52)$$

Folosind relația  $\lambda = \frac{c}{\nu}$  obținem:

$$\frac{1}{\lambda_{kn}} = \frac{|E_1|}{hc} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) = R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (\text{IV.53})$$

unde  $k > n$  și:

$$R_H = \frac{|E_1|}{hc} = \frac{E_{\text{ioniz}}}{hc} \cong 1,09 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (\text{IV.54})$$

este constanta Rydberg pentru atomul de hidrogen .

Experimental, emisia luminii (deci a fotonilor) se materializează (se observă) sub forma unor linii spectrale grupate în serii spectrale. Pentru atomul de hidrogen formula (IV.53) arată lungimile de undă ale acestor linii. Liniile spectrale a căror stare staționară finală este aceeași ( $n = \text{constant}$ ) formează o *serie spectrală*. Acestea sunt:

- seria Lyman ( $n = 1; k > 1$ ):

$$\frac{1}{\lambda_{k1}} = R_H \left( 1 - \frac{1}{k^2} \right) \quad (\text{IV.55})$$

- seria Balmer ( $n = 2; k > 2$ )

$$\frac{1}{\lambda_{k2}} = R_H \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (\text{IV.56})$$

Urmează: seria Paschen ( $n = 3; k > 3$ ), seria Brackett ( $n = 4; k > 4$ ), seria Pfundt ( $n = 5; k > 5$ ).

Liniile spectrale ale seriei Lyman sunt situate în domeniul ultraviolet (UV), cele ale seriei Balmer în domeniul vizibil (VIZ), de aceea au fost observate și studiate primele (cronologic vorbind), iar pentru celelalte trei serii acestea sunt, respectiv, în domeniul infraroșu (IR), infraroșu îndepărtat și microunde. Pentru seria Balmer, vezi lucrarea de laborator “Determinarea constantei Rydberg pentru atomul de hidrogen”. Schema din Fig. IV. 7 prezintă tranzițiile în urma cărora se obțin seriile spectrale ale atomului de hidrogen.

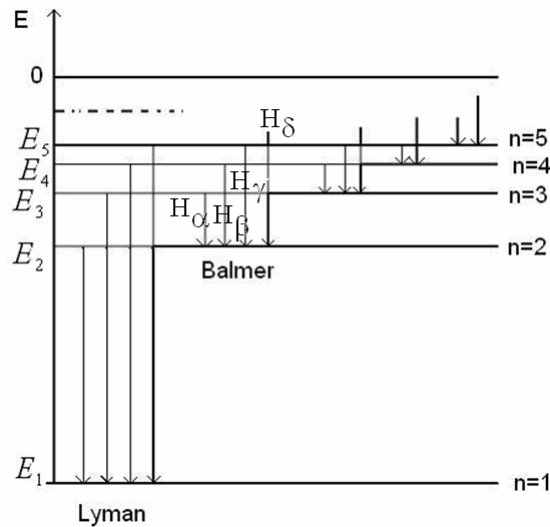


Fig. IV. 7. Schema tranzițiilor corespunzătoare seriilor spectrale ale atomului de hidrogen.

## b) experiența Franck - Hertz

Dispozitivul experimental este prezentat în Fig. IV. 8a. Electronii emiși de filamentul F sunt accelerați între filament și grila G; ei suferă ciocniri cu atomii de mercur aflați în stare fundamentală, în acest spațiu. Anodul A are potențialul electric cu 0,5 V mai mic decât al grilei. Creștem tensiunea dintre grilă și filament,  $U_G$ , și observăm că intensitatea curentului anodic  $I_A$  are scăderi bruște la valorile  $U_G = 4,9 \text{ V}$ ;  $2 \cdot 4,9 \text{ V} = 9,8 \text{ V}$ ;  $3 \cdot 4,9 \text{ V} = 14,7 \text{ V}$  (Fig. I. 8b).

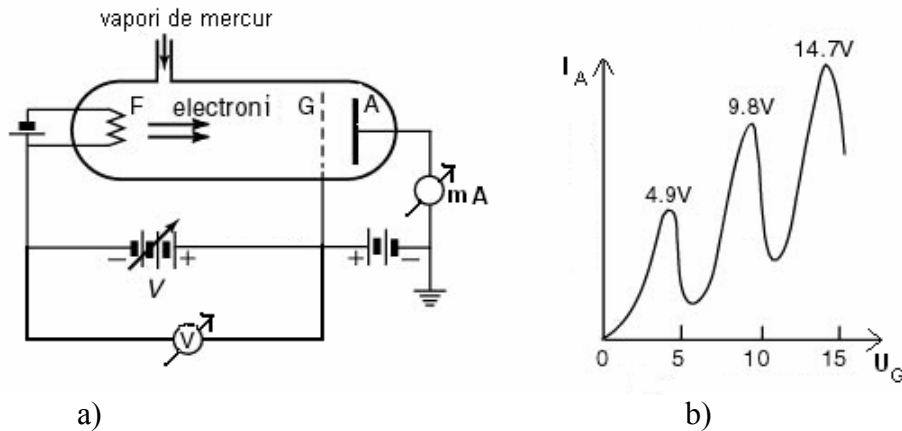


Fig. IV. 8. a) Schema dispozitivului pentru experimentul Franck-Hertz; b) Graficul intensității curentului anodic în funcție de tensiunea aplicată între grilă și filament.

**Explicația** constă în faptul că electronii accelerați suferă, între filament și grilă, una, două sau trei ciocniri inelastice cu câte un atom de mercur. Acesta absoarbe (primește) numai energia de valoare 4,9 eV. Grila captează electronii care au pierdut complet energia, adică pe cei care, înainte de ciocnirea cu atomul de mercur, aveau 4,9 eV sau multipli ai acestei valori. Ceilalți electroni ajung la anod.

**Concluzia:** Energia atomului de mercur este cuantificată, valoarea ei în starea fundamentală fiind 4,9 eV.

**Deficiențele modelului Bohr:** nu explică spectrele altor atomi, mai complecși decât cel de hidrogen; nu explică structura fină și hiperfină a liniilor spectrale; nu oferă o metodă de calcul pentru intensitatea liniilor spectrale; nu explică existența momentului magnetic propriu al electronului.

## 5. Dualismul corpuscul - undă (unda de Broglie). Experiențele Davisson – Germer

Pornind de la faptul că radiația electromagnetică prezintă atât proprietăți ondulatorii cât și proprietăți de corpuscul (foton) fizicianul L. de Broglie a emis ipoteza că și particulele microscopice (electron, proton, atom, moleculă) aflate în mișcare au proprietăți ondulatorii. Astfel, fiecărei particule microscopice  $i$  se asociază o undă numită *unda de Broglie* (lungime de undă  $\lambda_B$ , mai simplu,  $\lambda$ ).

Pentru o particulă liberă (care nu este sub acțiunea nici unui câmp de forțe), aflată în mișcare, acest dualism corpuscul - undă este reflectat prin relațiile referitoare la impuls ( $p$ ) și energie ( $E$ ):

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{IV.57})$$

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = mc^2 \quad (\text{IV.58})$$

și prin funcția de undă:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp[i(\omega t - \vec{k} \vec{r})] \quad (\text{IV.59})$$

unde pulsația este:  $\omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}$  (IV.60)

iar vectorul de undă este:  $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}; \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$  (IV.61)

Relația (IV.59) devine:  $\Psi(\vec{r}, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \vec{r})\right]$  (IV.62)

*Sensul fizic al undei de Broglie* este, conform interpretării lui M. Born, următorul: pătratul amplitudinii ( $A^2$ ) undei asociate microparticulei, într-un anumit punct din spațiu, reprezintă densitatea probabilității de localizare a microparticulei în acel punct.

*Confirmarea experimentală* a ipotezei de Broglie o constituie experiențele de difracție a microparticulelor (electroni, neutroni) pe cristale (Fig. IV. 9). Davisson și Germer au arătat că difracția electronilor pe un monocristal de nichel are aceleași caracteristici ca și difracția luminii pe o rețea optică. Electronii accelerați sub tensiunea  $U$ , al căror impuls este:

$$p = \sqrt{2m eU}, \quad (\text{IV.63})$$

cad pe suprafața monocristalului sub unghiul  $\theta$  față de aceasta. Analizând fasciculul difractat sub același unghi față de planele atomice, astfel încât unghiul dintre cele două fascicule este  $\beta = 2 \cdot (90^\circ - \theta)$ , se constată că intensitatea acestuia prezintă *maxime*:

- a) pentru anumite valori ale unghiului  $\theta$ , dacă  $U = \text{const.}$  sau
- b) pentru anumite valori ale tensiunii de accelerare  $U$ , dacă  $\theta = \text{const.}$  (Fig. IV. 10).

**Explicația** este următoarea: fasciculul de electroni este reflectat pe diferitele plane atomice paralele ale cristalului și undele asociate interferă. Conform Fig. IV. 11 diferența de drum optic dintre fasciculele 1 și 2 este:

$$\delta_{21} = 2d \sin \theta, \quad (\text{IV.64})$$

unde  $d$  este distanța dintre planele atomice.

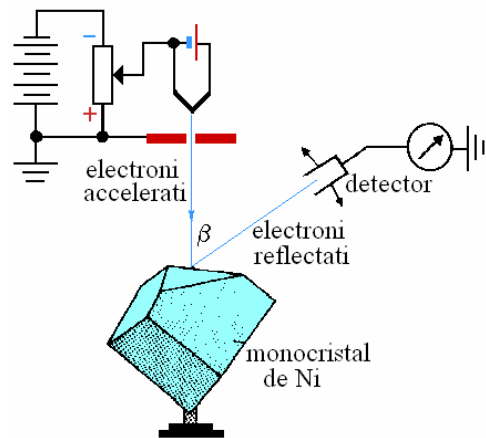


Fig. IV. 9. Dispozitivul experimental pentru studiul difracției electronilor pe monocristale.

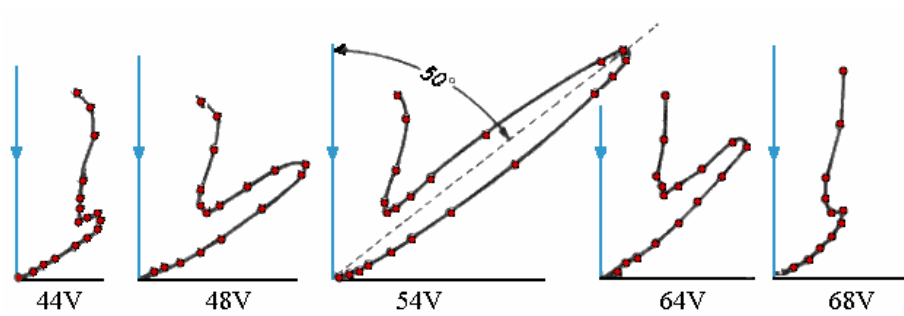


Fig. IV. 10. La unghi constant în raport cu suprafața monocristalului se obțin maxime ale intensității în detectorul de electroni reflectați pentru anumite valori ale tensiunii de accelerare (de ex. 54 V).

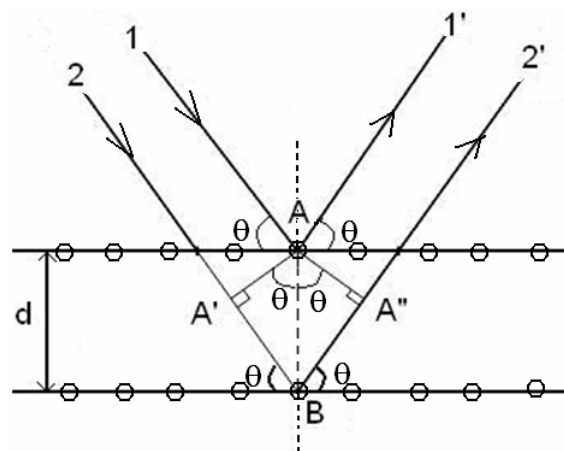


Fig. IV. 11. Reflexia fascicului de electroni pe planele atomice ale unui monocristal.

Condiția de obținere a maximelor de interferență  $\delta = n\lambda$  conduce la *relația Bragg*:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad , \text{ cu } n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{IV.65})$$

Din relațiile (IV.57) și (IV.63) rezultă:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m eU}} \quad , \quad (\text{IV.66})$$

apoi, din ultimele două relații obținem:

$$\sin \theta = \frac{nh}{2d\sqrt{2m eU}} \quad . \quad (\text{IV.67})$$

Experimente similare au fost realizate pe substanțe policristaline (vezi lucrarea de laborator "Experiențele Debye-Scherrer").

### 6. Relațiile de incertitudine Heisenberg

Presupunem că un electron având impulsul inițial  $p_i = p_z$  (dirijat pe axa Oz), bine determinat, trece printr-o fantă de lățime  $b$  ( $b$  este de-a lungul axei Ox) și lungime (pe axa Oy) mult mai mare decât lățimea (Fig.IV.12). După trecerea prin fantă coordonata  $x$  a electronului este cunoscută cu imprecizia maximă  $\Delta x = b$ , iar componenta pe axa Ox a impulsului electronului,  $p_x$ , este cunoscută cu imprecizia maximă  $\Delta p_x = p_x = p \sin \theta$ . Deoarece în punctul M se produce primul minim de difracție este valabilă relația:  $\sin \theta = \frac{\lambda}{b}$  (vezi paragraful "Difracția pe o fantă dreptunghiulară" din Cap. III. Fenomene optice). Din aceste relații și din relația (IV.55) rezultă:  $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$ .

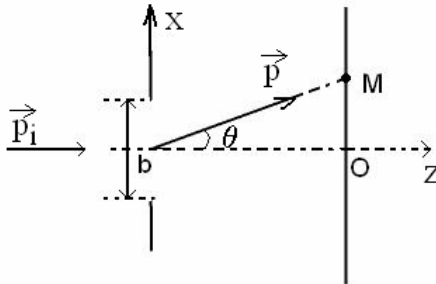


Fig. IV. 12. Difracția unui electron printr-o fantă dreptunghiulară.

De fapt, relația corectă este una de *evaluare* și se folosește sub forma:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar \quad (\text{IV.68})$$



Relația de tip (IV.68) este valabilă pentru orice direcție de mișcare:  $\Delta y \cdot \Delta p_y \sim \hbar$  ;  
 $\Delta z \cdot \Delta p_z \sim \hbar$  .

O altă relație de această formă se referă la  $\Delta E$  (imprecizia în determinarea energiei unei stări) și la timpul de viață al sistemului în starea respectivă (imprecizia duratei)  $\Delta t = \tau$ .

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar \quad (\text{IV.69})$$

Relațiile (IV.68) și (IV.69) se numesc *relații de incertitudine Heisenberg*. Ele au următoarea **interpretare**:

a) dacă reușim să măsurăm coordonata  $x$  a unei microparticule cu foarte mare precizie ( $\Delta x \rightarrow 0$ ) imprecizia determinării componente  $p_x$  a impulsului microparticulei devine foarte mare ( $\Delta p_x \rightarrow \infty$ ). Reciproc, dacă dorim ca  $p_x$  să fie cunoscut cu mare precizie, imprecizia determinării coordonatei (deci imprecizia localizării) este foarte mare.

b) dacă energia  $E$  a unei stări este determinată cu foarte mare precizie ( $\Delta E \rightarrow 0$ ) timpul de viață al acesteia ar fi foarte lung ( $\Delta t \rightarrow \infty$ ). Reciproc, pentru un timp de viață foarte scurt, imprecizia  $\Delta E$  a energiei este foarte mare.

**Concluzie:** Mărimile fizice legate printr-o relație de incertitudine Heisenberg nu pot fi măsurate simultan, cu aceeași precizie.

## IV.2. Formalismul matematic al mecanicii cuantice. Ecuația Schrödinger

### IV. 2.1. Funcția de undă

Caracterul ondulatoriu al comportării microparticulelor a condus la ideea descrierii stărilor unui sistem cuantic printr-o mărime complexă numită *funcție de undă*  $\Psi(x, y, z, t)$ . Această funcție este interpretată ca o undă de probabilitate (M. Born). Deoarece intensitatea unei unde este:

$$I = \Psi^* \Psi = |\Psi|^2 \quad (\text{IV.70})$$

se definesc următoarele noțiuni:

1) probabilitatea  $dP$  de a găsi particula cuantică studiată, la momentul  $t$ , într-un element de volum  $dV$  centrat pe punctul de coordonate  $x, y, z$ :

$$dP = \Psi^* \Psi dV = |\Psi|^2 dV \quad (\text{IV.71})$$

2) densitatea de probabilitate  $\wp(x, y, z)$ :

$$\wp = \frac{dP}{dV} = \Psi^* \Psi = |\Psi|^2 \quad (\text{IV.72})$$

3) probabilitatea  $P_D$  de a găsi particula cuantică studiată, la momentul  $t$ , în domeniul  $D$ :

$$P_D = \int_D \Psi^* \Psi dV = \int_D |\Psi|^2 dV \quad (\text{IV.73})$$

*Proprietățile funcției de undă*

a) Deoarece probabilitatea de a găsi particula cuantică studiată în tot spațiul este egală cu 1 (certitudinea) funcția de undă îndeplinește *condiția de normare*:

$$\int_{\infty} \Psi^* \Psi dV = \int_{\infty} |\Psi|^2 dV = 1 \quad (\text{IV.74})$$

b) este o funcție de pătrat integrabil, adică integrala  $\int_D |\Psi|^2 dV$  este convergentă

c) este determinată până la un factor  $e^{i\alpha}$ , unde  $\alpha$  este un număr real;

d) este mărginită;

e)  $\Psi$  și produsul  $a\Psi$  (unde  $a$  este o constantă) corespund aceleiași stări a sistemului.

*Observație:* Este convenabil să se realizeze separarea variabilelor spațiale  $x, y, z$  de cea temporală  $t$ , utilizând factorizarea de forma:  $\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) \cdot f(t)$ .

Funcțiile de undă având proprietățile de mai sus,  $\Psi(x, y, z, t)$  și  $\Psi(x, y, z)$ , formează, separat, câte un *spațiu Hilbert*. În continuare ne vom referi numai la  $\Psi(x, y, z)$ , dar relațiile sunt adevărate și pentru  $\Psi(x, y, z, t)$ .

Un *spațiu de funcții* este *liniar* dacă orice combinație liniară  $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots + c_n\Psi_n$  de funcții cu pătrat integrabil  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$  este tot o funcție cu pătrat integrabil.

Un **spațiu Hilbert** este un spațiu *liniar* în care se poate defini *produsul scalar*:

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \int_D \Psi_i^* \Psi_j dV \quad (\text{IV.75})$$

Funcțiile  $\Psi_i$  și  $\Psi_j$  sunt *ortonormate* dacă:

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \int_D \Psi_i^* \Psi_j dV = \delta_{ij}; \quad \delta_{ij} = 1, \text{ pt. } i = j; \text{ dar } 0, \text{ pt. } i \neq j \quad (\text{IV.76})$$

Un *operator*  $\hat{A}$  este *liniar* dacă satisface relația:

$$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2 \quad (\text{IV.77})$$

unde  $c_1$  și  $c_2$  sunt constante.

Un operator  $\hat{A}$  este hermitic dacă satisface relația:

$$\langle \Psi_i, \hat{A}\Psi_j \rangle = \langle \hat{A}\Psi_i, \Psi_j \rangle \quad (\text{IV.78})$$

adică:

$$\int_D \Psi_i^* \hat{A}\Psi_j dV = \int_D (\hat{A}\Psi_i)^* \Psi_j dV \quad (\text{IV.79})$$

Ecuția de forma:  $\hat{A}\Psi = a\Psi \quad (\text{IV.80})$

în care un operator  $\hat{A}$  reproduce funcția  $\Psi$  până la un factor constant  $a$  se numește *ecuație cu valori proprii*;  $\Psi$  este *funcția proprie* a operatorului  $\hat{A}$ , iar constanta  $a$  este *valoarea proprie* a operatorului  $\hat{A}$ , corespunzătoare funcției proprii  $\Psi$ .

*Proprietăți ale funcțiilor proprii și ale valorilor proprii pentru un operator hermitic*

- a) Valorile proprii ale unui operator hermitic sunt reale.
- b) Funcțiile proprii corespunzătoare la două valori proprii diferite ale unui operator hermitic sunt ortogonale și liniar independente.

#### IV.2.2. Postulatele și principiile mecanicii cuantice

##### Postulatul 1 (postulatul observabilelor)

*Fiecărei mărimi fizice (numită observabilă) i se asociază un operator liniar hermitic. Valorile măsurate ale unei mărimi fizice sunt valorile proprii ale operatorului asociat mărimii respective.*

**Exemple:**

operatorul coordonată:  $\hat{x} = x; \hat{y} = y; \hat{z} = z; \text{ în general: } \hat{q} = q \quad (\text{IV.81})$

operatorul vectorial impuls:  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (\text{IV.82})$

componentele impulsului:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{IV.83})$$

operatorul pătratul impulsului:  $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta \quad (\text{IV.84})$

operatorul energie cinetică:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (\text{IV.85})$$

operatorul energie potențială:  $\hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z)$  (IV.86)

operatorul energie totală (operatorul Hamilton):

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \quad (\text{IV.87})$$

operatorul vectorial moment cinetic orbital:

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} \quad (\text{IV.88})$$

Componentele momentului cinetic orbital:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right); \hat{L}_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right); \hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (\text{IV.89})$$

Comutatorul a doi operatori se definește prin:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (\text{IV.90})$$

*Dacă doi operatori comută, adică  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ , ei admit un set comun de funcții proprii, iar mărimile fizice corespunzătoare pot fi măsurate simultan, cu aceeași precizie.*

### Postulatul 2 (postulatul comutatorilor fundamentali)

*Comutatorul a doi operatori oarecare este determinat prin cunoașterea comutatorilor fundamentali de tip  $[\hat{p}, \hat{q}]$ . Aceștia sunt:*

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0; [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0; [\hat{p}_i, \hat{q}_j] = -i\hbar \delta_{ij} \quad (\text{IV.91})$$

unde  $i, j$  sunt, pentru spațiul tridimensional,  $x, y, z$ .

### Postulatul 3 (postulatul stării)

*Fiecare stare fizică a unui sistem este caracterizată de o funcție de undă numită funcție de stare. Operatorii care acționează asupra funcțiilor de undă corespund operației de măsurare.*

*Dacă fiecărei valori proprii îi corespunde o singură funcție proprie starea cuantică este nedegenerată.*

*Dacă unei valori proprii îi corespund un număr  $g$  de funcții proprii diferite starea cuantică este degenerată, având gradul de degenerare  $g$ .*

Principiul I al mecanicii cuantice (**principiul suprapunerii stărilor**)

*O stare oarecare a unui sistem fizic este o suprapunere a stărilor proprii, adică funcția de undă  $\Psi$  care descrie o stare oarecare este o combinație liniară a tuturor funcțiilor proprii  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ .*

$$\Psi = \sum_{k=1}^n c_k \Psi_k \quad (\text{IV.92})$$

Coeficienții  $c_k$  sunt produsele scalare  $\langle \Psi_k, \Psi \rangle$ .

Principiul II al mecanicii cuantice (**principiul cauzalității**)

*Funcția de undă de la momentul  $t$ ,  $X(x, y, z, t)$ , determină univoc funcția de undă de la momentul  $t + \Delta t$ .*

$$X(x, y, z, t + \Delta t) = \hat{\mathfrak{S}} X(x, y, z, t) \quad (\text{IV.93})$$

unde  $\hat{\mathfrak{S}}$  se numește *operatorul evoluției cauzale*.

Principiul III al mecanicii cuantice (**principiul de corespondență**)

*Mecanica clasică este un caz-limită al mecanicii cuantice ( $\hbar$  se neglijează față de alte acțiuni).*

Postulatul 4 (**postulatul mediei**)

*Dacă în momentul măsurării funcția de stare este o funcție proprie a operatorului asociat mărimii fizice respective rezultatul măsurării este, cu certitudine, valoarea proprie corespunzătoare.*

$$\hat{A}\Psi_k = a_k \Psi_k. \quad (\text{IV.94})$$

*Dacă în momentul măsurării sistemul cuantic se află într-o stare oarecare rezultatul măsurării este oricare din valorile proprii posibile ale operatorului asociat mărimii fizice respective, dar cu probabilități diferite. Atunci valoarea medie a rezultatului măsurării este valoarea medie a operatorului asociat mărimii fizice:*

$$\langle A \rangle = \langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} = \langle \Psi, \hat{A}\Psi \rangle. \quad (\text{IV.95})$$

Postulatul 5 (**postulatul probabilității**)

*Probabilitatea ca la o măsurare a mărimii fizice  $A$  să se obțină o valoare proprie  $a_k$  corespunzătoare funcției proprii  $\Psi_k$  este:*

$$w_k = |\langle \Psi_k, \Psi \rangle|^2 = c_k^2 \quad (\text{IV.96})$$

unde  $\Psi = \sum_{k=1}^n c_k \Psi_k$  este funcția de stare a sistemului în momentul imediat anterior măsurării.

#### Postulatul 6 (postulatul sistemelor de particule identice)

*Stările sistemelor de particule identice sunt descrise prin funcții de stare care sunt fie complet simetrice, fie complet antisimetrice în raport cu operația de permutare a particulelor.*

### IV.2.3. Ecuația Schrödinger

a) *Ecuația Schrödinger temporală* descrie comportarea sistemelor cuantice, forma ei fiind postulată, iar verificarea rezultatelor se face prin experimente.

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi \quad (\text{IV.97})$$

unde  $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$  este funcția de undă, iar  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U$  este operatorul Hamilton.

b) *Ecuația Schrödinger atemporală* descrie stările staționare (independente de timp) ale sistemelor cuantice. Pentru deducerea ei folosim separarea variabilelor spațiale  $x, y, z$  de cea temporală  $t$ :

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) \cdot f(t) \quad (\text{IV.98})$$

Din ultimele două relații rezultă:

$$i \hbar \frac{df}{dt} \Psi(x, y, z) = f(t) \hat{H} \Psi(x, y, z) \quad (\text{IV.99})$$

apoi:

$$i \hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\Psi} \hat{H} \Psi = E \quad (\text{IV.100})$$

unde  $E$  este, deocamdată, o constantă de integrare, dar vom arăta ulterior că ea reprezintă *energia totală* a sistemului.

Prin integrarea ecuației referitoare la variabila timp:

$$\frac{df}{dt} = -\frac{i E}{\hbar} f \quad (\text{IV.101})$$

obținem:

$$f = C \exp\left(-i \hbar \frac{E}{t}\right), \text{ unde } C = \text{const.} \quad (\text{IV.102})$$

Ecuația referitoare la variabilele spațiale este *ecuația Schrödinger atemporală*:

$$\hat{H} \Psi = E \Psi \quad (\text{IV.103})$$

Constatăm că ecuația Schrödinger atemporală este o ecuație cu valori proprii, adică de tipul (IV.80) și anume este *ecuația cu valori proprii pentru operatorul Hamilton*, operator asociat energiei, deci constanta  $E$  reprezintă valoarea proprie a energiei sistemului.

Din relațiile (IV.87) și (IV.103) rezultă o formă detaliată a acestei ecuații:

$$\Delta\Psi + \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\Psi = 0 \quad (\text{IV.104})$$

În cazul unidimensional, când  $\Psi = \Psi(x)$ , ecuația (IV.104) devine:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\Psi = 0 \quad (\text{IV.105})$$

Funcția de undă  $\Psi(x, y, z)$  trebuie să îndeplinească următoarele *condiții*:

- a) să fie univocă;      b) să fie normată;      c) să fie continuă;
- d) să fie finită (mărginită);
- e) derivatele de ordinul întâi în raport cu  $x, y, z$  să fie continui și finite.

#### IV.2.4. Aplicații ale ecuației Schrödinger atemporale

##### 1. Particula cuantică în groapa de potențial unidimensională cu pereți impenetrabili (infiniți)

Pentru o particulă cuantică (de exemplu, un electron) aflată într-o groapă de potențial unidimensională cu pereți impenetrabili energia potențială are forma:  $U(x)=0$  pt.  $x \in [0, a]$  și  $U(x)=\infty$  în restul axei  $Ox$  (Fig. IV.13).

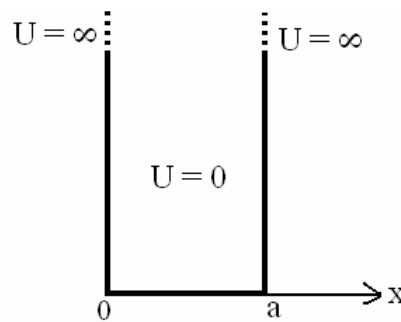


Fig. IV. 13. Forma energiei potențiale a gropii de potențial unidimensionale cu pereți infiniți.

În interiorul gropii, adică pentru  $x \in [0, a]$  ecuația Schrödinger atemporală (IV.105) are forma:

$$\frac{d^2\Psi_{\text{int}}}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_{\text{int}} = 0 \quad (\text{IV.106})$$

iar în exteriorul gropii, deoarece particula nu poate părăsi groapa,  $\Psi_{ext} = 0$ .

Notăm: 
$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \quad (IV.107)$$

Soluția ecuației (IV.106) poate avea forma:

$$\Psi_{int}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (IV.108)$$

Condiția de continuitate în  $x = 0$  și anume  $\Psi_{int}(0) = 0$  conduce la  $B = 0$ . Din condiția de continuitate în  $x = a$  ( $a$  este lățimea gropii) și anume:

$$\Psi_{int}(a) = 0; \quad A \sin(ka) = 0 \quad (IV.109)$$

rezultă: 
$$ka = n\pi, \text{ cu } n = 1, 2, 3... \quad (IV.110)$$

Din relațiile (IV.107) și (IV.110) obținem expresia energiei particulei cuantice în groapa de potențial unidimensională cu pereți înfiniți:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2} = \frac{n^2 h^2}{8m a^2}. \quad (IV.111)$$

Constatăm că **energia particulei cuantice în groapa de potențial unidimensională cu pereți înfiniți este cuantificată**, adică are valori care formează un șir discret, valori determinate de numărul natural  $n$ . Energia minimă este energia din starea  $n = 1$ :

$$E_{min} = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} = \frac{h^2}{8m a^2} \quad (IV.111')$$

*Starea de energie minimă se numește stare fundamentală.*

Este evidentă relația: 
$$E_n = n^2 E_1. \quad (IV.111'')$$

Funcțiile proprii ale operatorului Hamilton sunt:

$$\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (IV.112)$$

Constanta  $A$  se află din condiția de normare:

$$\int_0^a \Psi_{int}^* \Psi_{int} dx = 1 \quad (IV.113)$$



Obținem:  $A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$  și apoi:  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ . Înlocuim în relația (IV.112):

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (\text{IV.114})$$

Pentru primele două stări (starea fundamentală  $n = 1$  și prima stare excitată  $n = 2$ ) funcțiile de undă sunt:  $\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ , respectiv  $\Psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ , iar densitățile de probabilitate de localizare sunt:

$$\rho_1 = \Psi_1^* \Psi_1 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right), \text{ respectiv } \rho_2 = \Psi_2^* \Psi_2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad (\text{IV.115})$$

În Fig. IV. 14a sunt prezentate nivelele de energie și funcțiile de undă (având expresia (IV.114)) pentru primele cinci stări staționare, iar în Fig. IV. 14b, pentru primele șase stări staționare, graficele funcțiilor de undă sunt însoțite de cele ale densităților de probabilitate (date de formule de tipul (IV.115)).

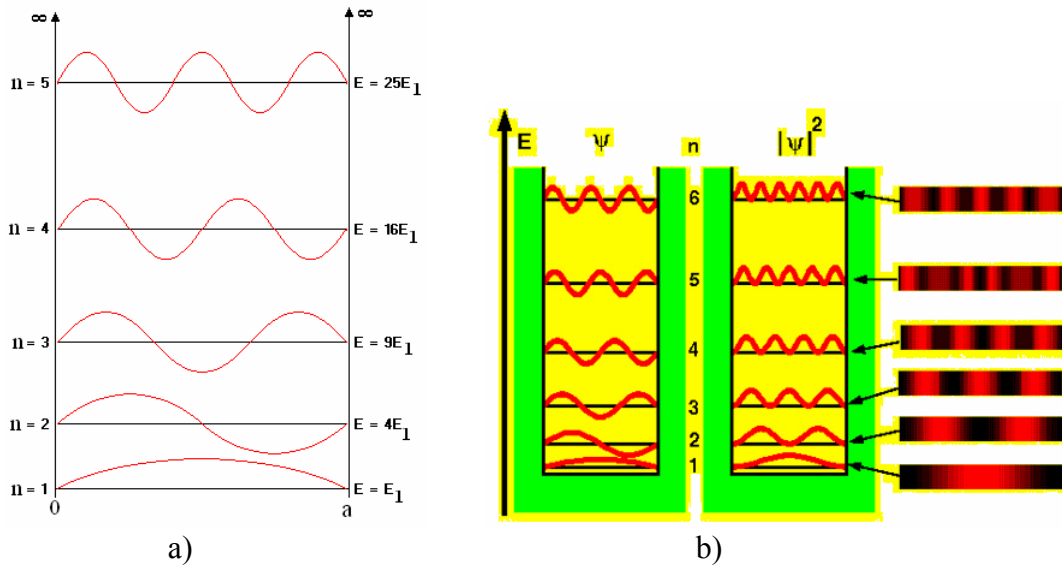


Fig. IV. 14. a) Nivelele de energie și funcțiile de undă pentru primele cinci stări staționare ale particulei cuantice în groapa de potențial unidimensională cu pereți înfiniți; b) Funcțiile de undă și densitățile de probabilitate  $|\Psi|^2$  pentru primele șase stări staționare.

**Observație:** Groapa de potențial unidimensională cu pereți impenetrabili (infiniți) este un model teoretic simplificat. În cazurile practice forma gropilor de potențial este mult mai complicată. Un alt model, folosit în studiul heterojuncțiilor semiconductoare, este groapa de potențial cu bariere finite. De exemplu, groapa de potențial a benzii de conducție din structura AlGaAs/GaAs/AlGaAs, prezentată în Fig. IV.15. Notății: CB = banda de conducție (cuprinde nivelele energetice ale electronilor, cum ar fi  $e_1, e_2$ ; VB = banda de valență (cuprinde nivelele energetice ale golurilor, cum ar fi  $hh_1$ ;  $E_g$  = lărgimea benzii interzise – vezi lucrarea de laborator “Determinarea lărgimii benzii interzise a unui semiconductor. Termistorul”; QW energy gap = intervalul energetic dintre primul nivel de gol și primul nivel electronic).

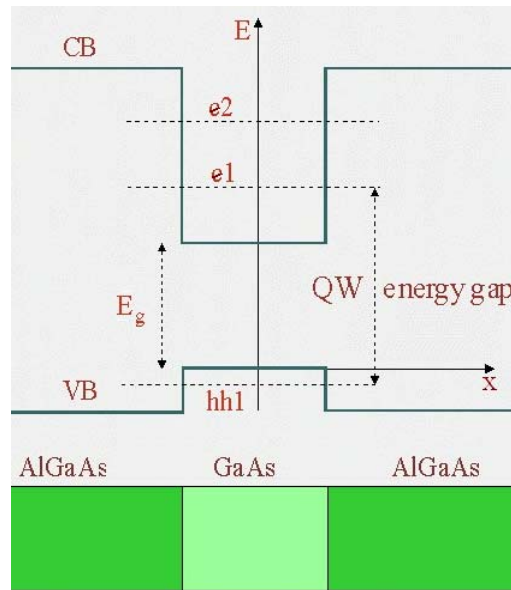


Fig. IV. 15. Profilul potențialului pentru banda de conducție (CB) și banda de valență (VB) în heterojuncțiunea semiconductoare AlGaAs/GaAs/AlGaAs.

## 2. Particula cuantică la bariera de potențial. Efectul - tunel

Fie o particulă cuantică de masă  $m$  și energie  $E$  aflată în fața unei bariere de potențial unidimensionale, de forma rectangulară, având "înălțimea"  $U_0$  și lățimea  $a$ .

Energia potențială are forma din Fig. III.4:  $U(x)=0$  pt.  $x < 0$ ,  $U(x)=U_0$  pt.  $x \in [0, a]$  și  $U(x)=0$  pt.  $x > a$ .

Ne interesează cazul  $E < U_0$ . Rezolvăm ecuația Schrödinger atemporală (IV.105) în cele trei regiuni.

În regiunea I: 
$$\frac{d^2 \Psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1 = 0 \quad (IV.116)$$

Notăm: 
$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \quad (IV.117)$$

Soluția ecuației (IV.116) poate avea forma:

$$\Psi_1(x) = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx) \quad (\text{IV.118})$$

în care primul termen reprezintă unda incidentă,  $\Psi_{1i}(x)$ , iar al doilea unda reflectată pe bariera de potențial,  $\Psi_{1r}(x)$ .

În regiunea II: 
$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\Psi_2 = 0 \quad (\text{IV.119})$$

Notăm: 
$$\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2} = k_2^2 \quad (\text{IV.120})$$

Soluția ecuației (IV.119) are forma:

$$\Psi_2(x) = C_3 \exp(-k_2x) + C_4 \exp(k_2x) \quad (\text{IV.121})$$

În regiunea III ecuația este tot de forma (IV.116) soluția fiind:

$$\Psi_3(x) = C_5 \exp(ikx) + C_6 \exp(-ikx) \quad (\text{IV.122})$$

în care primul termen reprezintă unda progresivă ( $x > 0$ ), iar al doilea unda regresivă ( $x < 0$ ). Aceasta din urmă nu ne interesează, nefiind pe "drumul" particulei studiate. Așadar, unda transmisă este:

$$\Psi_3(x) = \Psi_t(x) = C_5 \exp(ikx) \quad (\text{IV.122'})$$

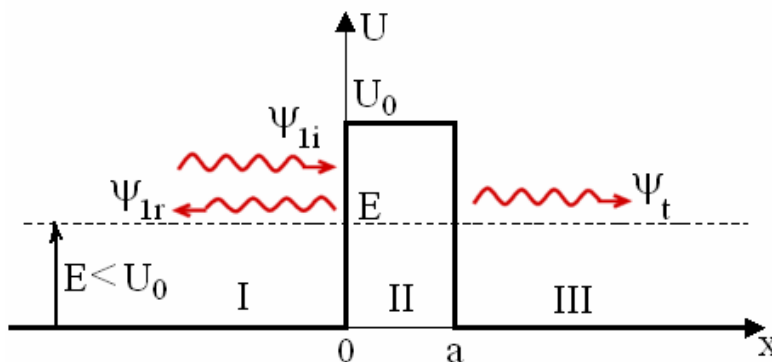


Fig. IV. 16. Forma potențialului și schema funcțiilor de undă pentru particula cuantică la bariera de potențial rectangulară.

Pentru calcularea constantelor  $C_1, C_2, \dots, C_5$  folosim condițiile de continuitate:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0) \Rightarrow C_1 + C_2 = C_3 + C_4 \quad (\text{IV.123})$$

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \Rightarrow ik_1(C_1 - C_2) = k_2(C_4 - C_3) \quad (\text{IV.124})$$

$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a) \Rightarrow C_3 \exp(-k_2a) + C_4 \exp(k_2a) = C_5 \exp(ika) \quad (\text{IV.125})$$

$$\Psi_2'(a) = \Psi_3'(a) \Rightarrow k_2[C_4 \exp(k_2a) - C_3 \exp(-k_2a)] = ikC_5 \exp(ika) \quad (\text{IV.126})$$

Adăugăm și condiția de normare:

$$\int_{-\infty}^0 \Psi_1^* \Psi_1 dx + \int_0^a \Psi_2^* \Psi_2 dx + \int_a^{\infty} \Psi_3^* \Psi_3 dx = 1 \quad (\text{IV.127})$$

După calcularea constantelor  $C_1, C_2, \dots, C_5$  din rezolvarea sistemului de ecuații (IV.123 - IV.127) funcțiile de undă  $\Psi_1, \Psi_2$  și  $\Psi_3$  sunt complet determinate (Fig. IV.17).

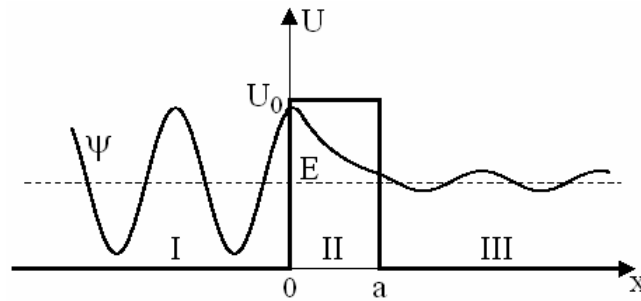


Fig. IV. 17. Funcția de undă pentru particula cuantică la bariera de potențial rectangulară.

**Mărimile fizice de interes** sunt:

a) *transparența* (transmitanța) barierei:

$$T = \left( \frac{C_5}{C_1} \right)^* \left( \frac{C_5}{C_1} \right) \quad (\text{IV.128})$$

e) *densitatea de probabilitate de localizare în regiunea III* (dincolo de barieră):

$$\rho_3 = \Psi_3^* \Psi_3 \quad (\text{IV.129})$$

Pentru a obține expresia transparenței  $T$  calculăm  $C_1$  în funcție de  $C_5$  din relațiile (IV.123 - IV.126).

Rezultă:

$$T = T_0 \exp(-2k_2 a) \quad (\text{IV.130})$$

Înlocuind  $k_2$  din relația (IV.120) obținem:

$$T = T_0 \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right) \quad (\text{IV.131})$$

*Interpretarea fizică a relației (IV.131):*

a) Deoarece  $T \neq 0$  înseamnă că particula cuantică studiată, deși are  $E < U_0$ , străbate bariera de potențial. Fenomenul se numește **efect-tunel** și nu poate fi explicat de legile fizicii clasice, deci este un *efect specific cuantic*. Consecințele sale se verifică experimental (vezi lucrarea de laborator “Dioda-tunel”).

b) Transparența barierei de potențial,  $T$ , depinde atât de caracteristicile particulei ( $m, E$ ), cât și de cele ale barierei ( $a, U_0$ ).

c) Formula (IV.131) se poate generaliza și pentru o barieră de potențial de o formă oarecare.

d) Efectul-tunel explică următoarele fenomene: emisia particulelor  $\alpha$  de către anumite nuclee radioactive, emisia autoelectronică (sau emisia la rece - sub acțiunea unui câmp electric intens un metal poate emite electroni), unele reacții chimice, dioda-tunel, efectul Josephson (printr-o joncțiune formată din două materiale supraconductoare, separate printr-un strat subțire de oxid, trece un curent continuu, în absența oricărui câmp electric sau magnetic).

### 3. Oscilatorul liniar armonic cuantic

este o particulă de masă  $m$  aflată într-un câmp de forma:

$$U(x) = \frac{k_e x^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (\text{IV.132})$$

unde  $\omega$  este pulsația, iar  $k_e$  este constanta elastică. Ecuația Schrödinger atemporală (IV.105) are forma:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0 \quad (\text{IV.133})$$

Folosim o schimbare de variabilă:

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \sqrt{\alpha} \cdot x \quad (\text{IV.140})$$

Rezultă:  $\frac{d\Psi}{dx} = \frac{d\Psi}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot \frac{d\Psi}{d\xi}$  și  $\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot \frac{d^2\Psi}{d\xi^2}$ . Ecuația (IV.133) devine:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \left( \frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \Psi = 0 \quad (\text{IV.141})$$

Din rezolvarea acestei ecuații se obțin următoarele **rezultate**:

a)  $\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$ , din care:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{IV.142})$$

Interpretarea relației (IV.142): **Energia oscilatorului liniar armonic cuantic este cuantificată**, adică are valori care formează un șir discret, valori determinate de numărul  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Energia minimă este energia din starea  $n = 0$ , numită *energie de zero*:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0 \quad (\text{IV.142}')$$

În fizica clasică energia minimă a oscilatorului este zero.

b) Funcțiile de undă sunt:

$$\Psi_n(\xi) = C_n \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \cdot \frac{d^n}{d\xi^n} [\exp(-\xi^2)] \quad (\text{IV.143})$$

Constantele  $C_n$  se determină din condiția de normare.

În Fig. IV.18 sunt prezentate nivelele energetice  $E_n$  (date de formula (IV.142)) pentru  $n = 0, 1, 2$  și 3 precum și densitățile de probabilitate corespunzătoare.

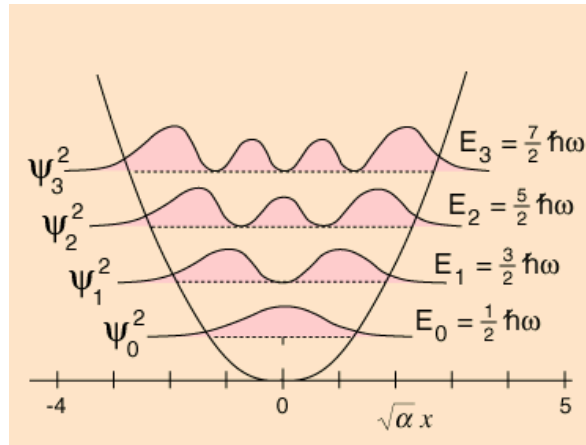


Fig. IV. 18. Nivelele energetice  $E_n$  cu  $n = 0, 1, 2$  și 3 precum și densitățile de probabilitate corespunzătoare.