

Cele două expresii, $(\psi, \hat{A}\phi)$ și $(\hat{A}\psi, \phi)$ sunt egale deoarece $a_n = a_n^*$, a_n fiind reali. Deci, operatorul $\hat{A}$ este hermitic.

5.6. Postulatele mecanicii cuantice

Mecanica cunatică descrie fenomenele fizice specifice *microcosmosului*. Această teorie este inevitabil abstractă. În urma unor experiențe efectuate cu multă grijă, fizicienii au descoperit că realitatea microscopică este caracterizată prin fenomene cum este dualitatea undă-corpusul, care pare greu de înțeles.

Mecanica clasică nu mai este corectă când se aplică sistemelor microscopice. Aceasta poate fi aplicată cu succes de exemplu la mișcarea astrilor, a *obiectelor macroscopice*, dar este total nepotrivită în cazul studiului mișcării atomilor. Astfel, noțiunea de *mic* a sistemelor atomice capătă o semnificație absolută. Înțelegerea sensului acestei micimi reprezintă baza înțelegerii mecanicii cuantice. În fizica sistemelor clasice, adică a sistemelor cărora li se poate aplica cu succes conceptele clasice, se presupune în mod tacit că operațiile de măsură nu perturbă apreciabil starea (mișcarea) acestora. De exemplu, aplicând ecuațiile Maxwell, s-a presupus că toți curenții electrici și că toate câmpurile care intervin pot fi măsurate fără ca operația de măsurare să modifice rezultatul măsurătorii. Cu alte cuvinte s-a presupus că toate perturbațiile produse prin măsurare (de exemplu, variația curentului datorită legării în circuit a unui voltmetru) pot fi înlăturate cu precizie. Modul cel mai simplu de observare a unui obiect constă în a-l privi. Pentru aceasta se trimite un fascicul de lumină asupra sistemului, adică sistemul este ciocnit cu un flux de fotoni. Dacă sistemul este *mare* impactul cu fotonii este neglijabil, iar dacă sistemul este *mic* impulsul acestuia poate fi comparabil cu cel al fotonului, astfel că impactul cu fotonii modifică starea inițială a sistemului.

Astfel, un sistem fizic este *mic* dacă trebuie să ținem seama de modificarea stării sale în urma procesului de măsurare. Această idee este exprimată clar de P. A. M. Dirac în lucrarea *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford Clarendon Press, ed. I (1930), ed. IV, Oxford (1958)) sub forma: *există o limită a fineții posibilității noastre de observație și a micimii perturbației corespunzătoare-limită legată de esența lucrurilor și care nu poate fi ameliorată prin tehnică*. Dacă sistemul fizic este atât de mare încât aceste perturbații inevitabile sunt neglijabile se poate aplica ipoteza tacită a fizicii clasice și se poate afirma că evoluția sistemelor verifică legile clasice. Dacă starea sistemului este influențată de aceste perturbații, acesta este mic în sens absolut și este necesară o nouă teorie pentru a-l studia. Deoarece operațiile de observare (măsurare) afectează evoluția sistemelor fizice trebuie ca aceste operații să apară explicit în noua teorie. Aceste operații au două operații esențiale:

a) Fiecărui tip de observație (de exemplu, măsurarea energiei, a impulsului sau a poziției) îi corespunde o mulțime de numere, care reprezintă rezutatele posibile ale măsurătorii. De exemplu, în cazul nivelelor energetice ale hidrogenului, aceste numere pot acoperi un domeniu continuu, ca în cazul clasic, sau pot avea valori discrete.

b) Dacă se efectuează două tipuri de măsurători $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$, (de exemplu, $\mathcal{A}$ poate reprezenta măsurarea poziției și $\mathcal{B}$ măsurarea impulsului), $\mathcal{AB}$ corespunde efectuării măsurătorii $\mathcal{B}$ în urma măsurătorii $\mathcal{A}$ și asemănător $\mathcal{BA}$ corespunde aceluiași operații efectuate în ordine inversă. Cele două moduri de a măsura pe $\mathcal{A}$ și pe $\mathcal{B}$ pot conduce la rezultate diferite, deoarece fiecare măsurătoare modifică starea sistemului asupra căruia se fac măsurătorile. Simbolic, aceasta se poate scrie sub forma:

$$\mathcal{AB} - \mathcal{BA} \neq 0. \quad (5.251)$$

Valoarea acestei expresii trebuie să fie legată de mărimea perturbațiilor inevitabile ale sistemului. În noua teorie trebuie să apară o constantă nouă care să dea și o măsură cantitativă a micimii absolute. Ținând seama de bazele experimentale ale mecanicii cuantice este evident că această nouă constantă este constanta Planck, h .

Imaginea corectă despre fenomenele microscopice nu poate fi dezvoltată până la capăt fără a ajunge la contradicții sau la paradoxuri. La fel s-a întâmplat și cu teoria relativității când unele rezultate obținute în cazul unor viteze de deplasare a referențialelor inerțiale apropiate de viteza luminii, cum ar fi de exemplu contracția lungimilor, dilatarea timpului etc. au venit în contradicție cu ideile fizicienilor de la începutul anilor 1900. Din cele prezentate mai sus se constată o analogie între rolul constantei h în teoria cuantică și rolul lui c în teoria relativității. Faptul că valoarea lui c este finită a impus reconsiderarea noțiunii de simultaneitate și drept consecință s-a limitat domeniul de aplicare al mecanicii newtoniene. Asemănător, faptul că h este finită și nenulă impune o revizuire a noțiunii de măsurare simultană a două mărimi fizice și limitează domeniul de aplicabilitate al teoriei clasice. Experiența noastră zilnică ne furnizează date despre o lume în care $c \rightarrow \infty$ și $h \rightarrow 0$ și aceste imagini nu pot fi transpuse într-o lume în care una din aceste aproximații nu mai este valabilă. Deci, faptul că nu există o reprezentare concretă și coerentă a fenomenelor fizice în teoria cuantică nu este o insuficiență a teoriei. O teorie fizică este satisfăcătoare dacă îndeplinește două condiții:

- a) previziunile acesteia sunt verificate de experiență;
- b) reprezintă realitatea obiectivă în mod inteligibil.

Teoria cuantică îndeplinește prima condiție cel puțin în ceea ce privește domeniul fizicii atomice și moleculare. În privința celei de-a doua condiții teoria cuantică face o descriere completă a fenomenelor naturale. Analiza acestei condiții a fost făcută de Niels Bohr în 1927. El a formulat condițiile particulare ale observației (măsurătorii) la scară microscopică și *principiul de complementaritate*: rezultatele măsurărilor efectuate în condiții experimentale diferite nu pot fi contopite pentru a da o imagine unică. Aceste rezultate trebuie privite ca fiind complementare în sensul că numai totalitatea rezultatelor măsurărilor epuizează informațiile posibile despre proprietățile obiectelor fizicii microscopice (N. Bohr, Naturwissenschaft, **16**, p. 245, 1928).

5.1. Starea cuantică

În mecanica clasică identificăm *starea* unui sistem cu valorile unor mărimi fizice *observabile* ale sistemului (de exemplu, poziția x și impulsul p). Mecanica cuantică, face o distincție netă între stări și observabile. În legătură cu starea unui sistem fizic, în mecanica cuantică, se enunță următorul postulat:

Postulatul 1. *Oricărei stări fizice posibile a unui sistem cuantic îi corespunde un vector normat din spațiul Hilbert $\psi(x)$ și invers, oricărui vector din spațiul Hilbert $\psi(x)$ îi corespunde o stare fizică posibilă a sistemului.*

Această corespondență între stările fizice și vectorii normați din $\mathfrak{H}$ este de unu la unu, cu excepția că doi vectori din $\mathfrak{H}$ care sunt normați și diferă doar printr-un scalar, de modul unitate, corespund aceleiași stări fizice. Vectorul particular din $\mathfrak{H}$ căruia îi corespunde starea sistemului la momentul t se notează prin $\psi(x)$ și se numește *vector de stare al sistemului*. Se spune că sistemul se află în *starea descrisă de $\psi(x)$* . Starea unui sistem este complet descrisă de vectorul de stare în sensul că totul (ce poate fi cunoscut despre sistem la momentul t) se poate afla din funcția $\psi(x)$. Acest postulat conține trei

afirmații. Prima afirmație precizează că starea fizică posibilă a unui sistem dat se află în corespondență de unu la unu cu vectorii normați $\psi(x)$ din $\mathfrak{H}$ care sunt definiți până la un scalar cu modulul unitate. Deci, dacă $\phi(x) = C\psi(x)$, unde $|C|^2 = 1$, vectorii de stare $\psi(x)$ și $\phi(x)$ sunt echivalenți fizic, adică corespund aceleiași stări fizice. A doua afirmație se referă la faptul că tot ceea ce se poate cunoaște despre starea sistemului la momentul t se obține din $\psi(x)$. Dar, postulatul nu precizează *ce* se poate cunoaște despre sistem și nici *cum* se pot deduce informații din vectorul de stare. La aceste întrebări răspund celelalte postulate ale mecanicii cuantice. Deci, așa cum în mecanica clasică starea unui sistem la momentul t este complet cunoscută dacă se specifică variabilele dinamice, coordonata și impulsul, în mecanica cuantică starea unui sistem este complet specificată de vectorul $\psi(x)$. În orice caz dependența de timp a lui $\psi(x)$ este esențial diferită de dependența de timp a variabilei x . Deci, vectorii de stare la două momente de timp diferite $\psi(x, t_1)$ și $\psi(x, t_2)$ trebuie priviți ca doi vectori diferiți din $\mathfrak{H}$, adică ca două funcții diferite de x . Dependența explicită a lui $\psi(x)$ de timp este dată de postulatul 5. Uneori vectorul de stare $\psi(x)$ se numește și *funcție de stare* sau *funcție de undă*.

5.6.2. Observabilele în mecanica cuantică

În mecanica cuantică specificarea stării unui sistem diferă, evident, de modul cum se face aceasta în mecanica clasică. Starea unui sistem fizic în mecanica clasică este descrisă, în fiecare moment de timp, cu ajutorul unor observabile ale sistemului. În general, starea sistemului la momentul t este specificată cu ajutorul perechii de valori $x(t)$ și $p(t)$. Pentru specificarea clasică a stării unui sistem mecanic se presupune că:

- a) variabilele de poziție și impuls au valori precise, bine definite la fiecare moment de timp,
- b) este întotdeauna posibil, cel puțin în principiu, să se măsoare aceste valori fără a perturba semnificativ sistemul.

În mecanica cuantică, postulatul 1 afirmă că vectorul de stare conține tot (întreaga informație) ce putem ști despre sistem. Rezultă că trebuie să ne așteptăm ca, dacă la momentul t cunoaștem forma vectorului de stare $\psi(x)$, să putem face unele afirmații precise despre observabilele fizice ale sistemului la acel moment de timp. Evident, dacă nu putem face acest lucru, vectorul de stare este o abstractizare complet inutilă.

La fel ca și în mecanica clasică o *observabilă*, notată de exemplu cu $\mathcal{A}$, este o *variabilă dinamică care poate fi măsurată*. De exemplu, pentru un corp în mișcare de-a lungul axei Ox , observabilele sunt *poziția*, *impulsul* și funcțiile de poziție și impuls, dintre care, desigur *energia* este cea mai utilă. *Măsurarea* unei observabile $\mathcal{A}$ este o *operație fizică* bine definită care conduce la un număr real numit *valoarea lui $\mathcal{A}$* . Pentru simplificare, se consideră că toate măsurătorile sunt *ideale* în sensul că valoarea măsurată are o incertitudine experimentală nulă. În mecanica clasică nu se face distincția între *reprezentarea matematică* a unei observabile și *valorile observabilelor*. O astfel de distincție în mecanica cuantică are o importanță fundamentală. Postulatul al doilea face legătura între reprezentarea matematică a lui $\mathcal{A}$ și valorile posibile ale lui $\mathcal{A}$.

Postulatul 2. a) Fiecărei observabile fizice $\mathcal{A}$ îi corespunde în spațiul Hilbert un operator hermitic liniar $\hat{A}$, căruia îi este asociată o mulțime completă de vectori proprii ortonormați $\{\alpha_i(x)\}$ și o mulțime de valori proprii reale $\{A_i\}$, legate prin ecuații de tipul:

$$\hat{A}\alpha_i(x) = A_i\alpha_i(x), \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (5.252)$$

Invers, fiecărui operator din spațiul Hilbert îi corespunde o observabilă fizică.

b) *În urma măsurărilor singurele valori posibile care pot apărea sunt valorile proprii ale operatorului.*

Deci, conform postulatului 2, o observabilă fizică este reprezentată matematic printr-un operator liniar $\hat{A}$, căruia i se asociază o mulțime completă de vectori proprii și o mulțime de valori proprii reale. Un astfel de operator se numește *operator observabil*.

Diferența cea mai importantă dintre regulile de înmulțire a numerelor și cea a operatorilor este că nu toți operatorii comută $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Faptul că nu toate perechile de operatori observabili comută, conduce la rezultate surprinzătoare, printre care, așa numita dualitate *undă-corpusul*. Postulatul 2 nu precizează nimic despre *distribuția valorilor proprii*, dacă este *continuu* sau *discret*. Important este că valorile proprii pot fi distribuite și discret, ceea ce deschide posibilitatea ca unele observabile fizice să fie cuantificate. În cele ce urmează ne vom referi în special la observabilele a căror operatori au valori proprii distribuite discret.

5.6.3. Teoria cuantică a măsurătorii

Legătura logică dintre vectorul de stare introdus de postulatul 1 și operatorii observabili introduși de postulatul 2 se face, deși indirect, prin conceptul de măsurătoare. *Teoria cuantică a măsurătorii* reprezintă esența mecanicii cuantice. În general, prin *măsurătoare* se înțelege o operație fizică bine definită care conduce fără erori la un singur număr real. Prin *fără eroare* se înțelege că nu există o *incertitudine experimentală* în obținerea numărului rezultat.

Prevederea rezultatului unei măsurători. Valoarea așteptată și incertitudinea. Fundamentele logice ale mecanicii cuantice au fost și continuă să fie un subiect de serioase dispute între fizicieni și filosofi. În cadrul acestui curs este prezentată teoria cuantică în forma acceptată de majoritatea fizicienilor. Disputa va continua până când se va realiza o experiență care să fie capabilă, prin rezultatele ei, să precizeze punctul de vedere *corect*.

Postulatul 3. *Dacă observabilei $\mathcal{A}$ i se asociază operatorul observabilă $\hat{A}$, cu baza ortonormată $\{\alpha_i(x)\}$ și valorile proprii $\{A_i\}$, și se fac măsurători asupra unui sistem fizic aflat în starea descrisă de vectorul $\psi(x)$ înainte de măsurătoare atunci, prevederea cea mai completă asupra rezultatelor măsurătorii este că probabilitatea ca în urma măsurătorii să se obțină valoarea proprie A_k este $|\langle \alpha_k, \psi \rangle|^2$.*

Acest postulat marchează punctul de la care teoria mecanicii cuantice diverge radical de teoria mecanicii clasice. Conform postulatului 3 cunoașterea vectorului de stare folosește doar pentru a prezice probabilitățile de obținere prin măsurători a diferitelor valori, adică:

a) Adesea nu este posibil să se prevadă cu certitudine rezultatul unei măsurători efectuate asupra unui sistem aflat într-o stare complet definită;

b) Dacă asupra unui sistem se efectuează două *măsurători identice*, dar *separate*, având grijă să se asigure ca sistemul să se afle exact în *aceeași stare înainte de fiecare măsurătoare*, rezultatele celor două măsurători nu vor coincide neapărat.

Acceptând postulatul 3 trebuie să acceptăm această *imposibilitate de prevedere și neunicitate a proceselor de măsurare* ca fiind manifestări ale unei proprietăți a materiei. Deși acest aspect este în dezacord violent cu intuiția noastră *clasică* adânc înrădăcinată,

singura observație pe care o putem face este că, la nivel macroscopic, această proprietate a materiei nu este importantă.

Pentru ca $|(\alpha_k, \psi)|^2$ să poată fi o *probabilitate* trebuie ca:

$$0 \leq |(\alpha_k, \psi)|^2 \leq 1 \text{ și } \sum_k |(\alpha_k, \psi)|^2 = 1. \quad (5.253)$$

Aceste condiții impun ca norma lui ψ să fie egală cu unitatea. Într-adevăr,

$$\begin{aligned} (\psi, \psi) &= \left(\sum_{i=1}^{\infty} (\alpha_i, \psi) \alpha_i, \sum_{j=1}^{\infty} (\alpha_j, \psi) \alpha_j \right) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} (\alpha_i, \psi)^* (\alpha_j, \psi) (\alpha_i, \alpha_j) \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} (\alpha_i, \psi)^* (\alpha_j, \psi) \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{\infty} (\alpha_i, \psi)^* (\alpha_i, \psi) = \sum_{i=1}^{\infty} |(\alpha_i, \psi)|^2. \end{aligned} \quad (5.254)$$

Astfel, dacă:

$$(\psi, \psi) = 1 \text{ și } \sum_k |(\alpha_k, \psi)|^2 = 1. \quad (5.255)$$

Dacă se întâmplă ca două din valorile proprii ale lui $\hat{A}$ să fie egale, de exemplu, $A_3 = A_5 = A$, atunci probabilitatea de a obține prin măsurătoare valoarea A este $|(\alpha_3, \psi)|^2 + |(\alpha_5, \psi)|^2$. În acest caz se spune că valoarea lui A este *degenerată*. Existența operatorilor observabilă cu valori proprii degenerate este sursa multor fenomene interesante. Un rezultat interesant al postulatului 3 este că dacă sistemul se află într-o stare descrisă de vectorul $\psi = \alpha_k$, cu certitudine se va obține în urma măsurătorilor valoarea A_k . Deci, *condiția necesară și suficientă ca o măsurătoare asupra lui $\mathcal{A}$ să conducă la o valoare unică, bine determinată, este ca vectorul de stare al sistemului înainte de măsurătoare să coincidă cu unul din vectorii proprii ai lui $\hat{A}$* . Ținând seama că $|(\alpha_k, \psi)|^2$ reprezintă *probabilitatea de apariție a valorii A_k* se mai pot defini, prin analogie cu calculul probabilităților, *valoarea medie* a unui șir de rezultate a măsurătorilor și *abaterea pătratică medie*. Pentru a defini aceste mărimi trebuie precizată noțiunea de *șir de măsurători*. Într-un șir de măsurători trebuie asigurat ca starea sistemului să fie aceeași înainte de fiecare măsurătoare din șir. În cele ce urmează nu ne interesează modul de realizare a acestui lucru, deși, în urma măsurătorii, în general, sistemul își modifică starea, deci este descris de un alt vector de stare.

Există două tipuri diferite de măsurători multiple:

a) O serie de *măsurători repetate* asupra sistemului aflat în starea $\psi(x)$ se efectuează readucând de fiecare dată sistemul în starea inițială.

b) O serie de M *măsurători succesive* se efectuează în așa fel încât vectorul de stare al sistemului pentru măsurătoarea a n -a este vectorul de stare care rezultă din măsurătoarea a $(n-1)$ -a.

Postulatul 3 se referă doar la măsurătorile repetate. Se consideră un șir de foarte multe măsurători repetate asupra lui $\mathcal{A}$ pentru un sistem aflat în starea $\psi(x)$. *Media valorilor așteptate* se calculează cu ajutorul relației:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} |(\alpha_k, \psi)|^2 A_k \quad (5.256)$$

iar *abaterea pătratică medie a acestor valori față de medie* se exprimă prin:

$$\Delta\hat{A} = \sqrt{\left(\sum_{k=1}^{\infty} |(\alpha_k, \psi)|^2 A_k^2\right) - \left(\sum_{k=1}^{\infty} |(\alpha_k, \psi)|^2 A_k\right)^2}. \quad (5.257)$$

În terminologia mecanicii cuantice $\langle \hat{A} \rangle$ se numește *valoare așteptată*, iar $\Delta\hat{A}$ poartă numele de *incertitudinea lui $\mathcal{A}$ în starea $\psi(x)$* . Evident că $\langle \hat{A} \rangle$ nu va coincide obligatoriu cu una din valorile proprii ale lui $\hat{A}$, iar incertitudinea $\Delta\hat{A}$ nu se datorește imperfecțiunii tehnicii de măsurare și valorile măsurate care diferă mult de $\langle \hat{A} \rangle$ nu sunt mai puțin îndreptățite decât valorile măsurate care sunt aproape egale cu $\langle \hat{A} \rangle$. În calcule nu se utilizează relațiile (5.6) și (5.7) ci expresii echivalente ale acestora. Astfel,

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_{k=1}^{\infty} |(\alpha_k, \psi)|^2 A_k = \sum_{k=1}^{\infty} |(\alpha_k, \psi)|^2 (\alpha_k, \hat{A} \alpha_k) \\ &= \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\alpha_k, \psi) \alpha_k, \sum_{k=1}^{\infty} (\alpha_k, \psi) \hat{A} \alpha_k \right) = (\psi, \hat{A} \psi) \end{aligned} \quad (5.258)$$

și

$$\Delta\hat{A} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}. \quad (5.259)$$

Pentru a evidenția caracteristicile unui șir de măsurători repetate se reprezintă grafic dependența numărului de apariție a unei anumite valori din valorile proprii ale lui $\hat{A}$. Ținând seama că s-au efectuat M măsurători valoarea A_i apare de $|(\alpha_i, \psi)|^2 M$ ori. Curba care unește punctele de coordonate $(A_k, |(\alpha_k, \psi)|^2 M)$ se numește *curbă de distribuție* a lui $\mathcal{A}$ pentru un sistem aflat în starea $\psi(x)$. Lărgimea curbei la semiînălțime este $\Delta\hat{A}$, iar $\langle \hat{A} \rangle$ nu corespunde neapărat cu maximumul curbei (fig. 5. 38).

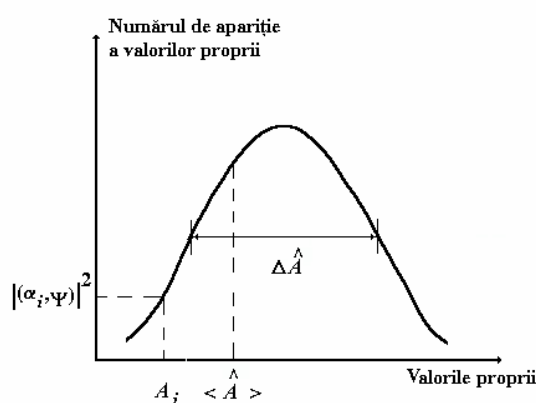


Fig. 5. 38. Curba de distribuție a lui $\mathcal{A}$ pentru un sistem aflat în starea $\psi(x)$.

Efectul măsurătorii asupra stării. Valoarea unei observabile. Conform postulatului 3, dacă se fac două măsurători repetate asupra aceleiași observabile a unui sistem aflat într-o stare dată, rezultatele acestor măsurători nu vor coincide neapărat. Dacă facem asupra lui $\mathcal{A}$ două măsurători succesive, rezultatele vor coincide întotdeauna. Adică, dacă

presupunem că sistemul se află într-o stare $\psi(x)$, care nu este neapărat un vector propriu a lui $\hat{A}$ și prima măsurătoare conduce la valoarea proprie A_k , a doua măsurătoare efectuată fără a readuce sistemul în stare inițială, va conduce precis tot la valoarea A_k . A doua măsurătoare trebuie efectuată imediat pentru ca sistemul să nu sufere nici o evoluție în timp, adică să nu se schimbe starea în care a ajuns sistemul în urma primei măsurători. Previzibilitatea măsurătorilor succesive ale lui $\mathcal{A}$ apare ca un *gest caritabil* al naturii. În cazul când remăsurarea lui $\mathcal{A}$ conduce la aceeași valoare proprie A_k , ca și măsurarea, atunci vectorul de stare al sistemului în momentul remăsurării trebuie să coincidă cu vectorul propriu $\alpha_k(x)$, corespunzător lui A_k , indiferent de vectorul de stare inițial. Aceste concluzii sunt exprimate în postulatul 4.

Postulatul 4. *O măsurătoare efectuată asupra unei observabile produce, în general, o modificare necontrolabilă a vectorului de stare al sistemului; indiferent de forma vectorului de stare chiar înainte de măsurătoare, imediat după măsurătoare acesta va coincide cu vectorul propriu corespunzător valorii proprii obținută prin măsurătoare.*

Postulatul 4 afirmă că o măsurătoare asupra unei observabile $\mathcal{A}$ obligă vectorul de stare al sistemului să treacă într-un vector propriu a lui $\hat{A}$ fără să se precizeze nici un detaliu al procesului prin care apare această modificare a vectorului de stare. Dar, deoarece nu este posibil să se prevadă cu certitudine care valoare proprie se va obține într-o măsurătoare, rezultă că, în general nu este posibil să se prevadă cu certitudine care vector propriu al stării sistemului va fi ales prin măsurătoare. Tot ce se poate spune este că probabilitatea ca o măsurătoare a lui $\mathcal{A}$ să oblige sistemul să treacă în starea descrisă de vectorul propriu $\alpha_k(x)$ este $|\langle \alpha_k, \psi \rangle|^2$, unde ψ este vectorul de stare care descrie starea sistemului înainte de măsurătoare. Se observă că același element de *nedeterminare* care rezultă din postulatul 3 apare și în postulatul 4. De asemenea, se constată că cele două postulate 3 și 4 dau informații despre starea sistemului imediat după măsurătoare, fără a preciza nimic despre starea dinaintea măsurătorii. Astfel, din punct de vedere cuantic, măsurarea ca operație fizică este o pregătire a stării finale și mai puțin o observație a unei stări (cu toate că nu avem un control real asupra stării pregătite (finală) în măsurătoarea dată). Din cele prezentate mai sus apare evidentă diferența dintre teoriile clasică și cuantică ale măsurătorilor. Diferența va fi și mai evidentă după examinarea atentă a semnificației expresiei *valoarea unei observabile*.

În mecanica clasică se consideră că o observabilă are totdeauna o valoare și măsurătoarea făcută asupra observabilei conduce direct la valoarea sa. Se presupune tacit că valoarea unei observabile există indiferent dacă este pusă în evidență sau nu într-o măsurătoare de către un observator.

În mecanica cuantică, în cazul particular în care vectorul de stare $\psi(x)$ coincide cu un vector propriu $\alpha_k(x)$ a lui $\hat{A}$ se poate adopta punctul de vedere al mecanicii clasice și să se afirme că $\mathcal{A}$ are valoarea A_k . Justificarea pentru aceasta este simplă, deoarece, conform postulatului 3, este cert că o măsurătoare ideală a lui $\mathcal{A}$ va conduce la numărul A_k . Situația este mai dificilă când considerăm cazul mai general în care $\psi(x)$ este o combinație liniară a doi sau mai mulți vectori proprii ai lui $\hat{A}$:

$$\psi(x) = \sum_i (\alpha_i, \psi) \alpha_i(x). \quad (5.260)$$

În acest caz o măsurătoare asupra lui $\mathcal{A}$ va conduce la orice valoare A_i pentru care probabilitatea de apariție $|(\alpha_i, \psi)|^2$ este nenulă. Astfel, valoarea obținută într-o măsurătoare asupra lui $\mathcal{A}$ în această stare nu va fi nici previzibilă, nici unică și apare fără sens încercarea de asociere a unei valori particulare a lui $\mathcal{A}$ în această stare. Părerea fizicienilor este că *dacă vectorul de stare al unui sistem nu coincide cu un vector propriu al lui $\hat{A}$, atunci nu se poate spune despre observabila corespunzătoare lui $\mathcal{A}$ că are o valoare în sensul acceptat pentru această expresie*. În general, o măsurătoare asupra lui $\mathcal{A}$ în mecanica cuantică nu este simplu o privire discretă aruncată lui $\mathcal{A}$. Se știe că $|(\alpha_k, \psi)|^2$ este probabilitatea ca măsurătoarea asupra lui $\mathcal{A}$ în starea $\psi(x)$ a sistemului să conducă la valoarea A_k , ceea ce nu este același lucru cu a spune că $|(\alpha_k, \psi)|^2$ este probabilitatea ca $\mathcal{A}$ să aibă valoarea A_k în starea $\psi(x)$. Este mai corectă expresia *valoarea obținută într-o măsurătoare asupra lui $\mathcal{A}$ față de expresia valoarea lui $\mathcal{A}$* .

Teorema de compatibilitate și principiul de incertitudine Heisenberg. *Măsurare simultană sau compatibilitatea a două observabile constituie cea mai interesantă problemă a mecanicii cuantice. Se presupune că un sistem fizic dat este supus la trei măsurători succesive asupra a două observabile $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$. Măsurătoarea efectuată asupra observabilei $\mathcal{A}$ se notează cu $\mathcal{M}_{\mathcal{A}}$, cea efectuată asupra sistemului în starea în care se află după $\mathcal{M}_{\mathcal{A}}$, cu $\mathcal{M}_{\mathcal{B}}$ și cu $\mathcal{M}'_{\mathcal{A}}$ a treia măsurătoare efectuată asupra lui $\mathcal{A}$ în starea în care se află sistemul după măsurătoarea $\mathcal{M}_{\mathcal{B}}$. Cele trei măsurători se efectuează într-o succesiune foarte rapidă astfel ca între două măsurători să nu se modifice starea sistemului.*

Observabilele $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$ sunt măsurabile simultan sau compatibile, dacă și doar dacă rezultatul $\mathcal{M}'_{\mathcal{A}}$ coincide cu certitudine cu rezultatul $\mathcal{M}_{\mathcal{A}}$, indiferent de starea în care se afla sistemul înainte de măsurătoarea $\mathcal{M}_{\mathcal{A}}$.

Evident că din punctul de vedere al mecanicii clasice toate perechile de observabile sunt compatibile, adică măsurătoarea unei observabile nu influențează rezultatul măsurării celeilalte observabile. Din punctul de vedere al mecanicii cuantice două observabile sunt măsurabile simultan dacă rezultatul măsurătorii nu este influențat de ordinea în care se efectuează măsurătorile asupra acestora.

Teorema de compatibilitate. *Fiind date două observabile $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$ cărora le sunt asociate operatorii $\hat{A}$ și $\hat{B}$, oricare din următoarele trei afirmații le implică pe celelalte două:*

- $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$ sunt observabile compatibile;
- $\hat{A}$ și $\hat{B}$ au o bază proprie comună;
- $\hat{A}$ și $\hat{B}$ comută.

Pentru a demonstra că afirmația a) implică pe b) se consideră că înainte de $\mathcal{M}_{\mathcal{A}}$, $\psi(x) = \alpha_i(x)$, unde $\alpha_i(x) \in \{\alpha_k(x)\}$ este baza ortonormată a lui $\hat{A}$. În urma măsurătorii $\mathcal{M}_{\mathcal{A}}$ se obține valoarea A_i , iar după $\mathcal{M}_{\mathcal{B}}$ rezultă $\mathcal{M}_{\mathcal{A}} = \mathcal{M}'_{\mathcal{A}}$, deoarece conform cu a) $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$ sunt observabile compatibile; deci trebuie ca $\alpha_i(x) \equiv \beta_j(x)$, sau în general $\{\alpha_k(x)\} \equiv \{\beta_k(x)\}$.

În cazul când b) implică a), dacă $\{\alpha_k(x)\} \equiv \{\beta_k(x)\}$, după $\mathcal{M}_{\mathcal{A}}$ starea sistemului este $\psi(x) = \alpha_i(x)$, cu valoarea proprie A_i . După $\mathcal{M}_{\mathcal{B}}$, starea sistemului este tot $\beta_i(x) \equiv \alpha_i(x)$, obținându-se valoarea B_i , iar după $\mathcal{M}'_{\mathcal{A}}$ starea sistemului este descrisă tot de $\alpha_i(x)$, obținându-se din nou valoarea A_i . Deci, ordinea măsurărilor neinfluențând rezultatul obținut $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$ sunt observabile compatibile.

Pentru a demonstra că b) implică pe c) se consideră că $\hat{A}$ și $\hat{B}$ admit baza comună $\alpha_i(x)$, de unde rezultă că:

$$\hat{A}\hat{B}\alpha_i(x) = \hat{A}B_i\alpha_i(x) = B_i\hat{A}\alpha_i(x) = B_iA_i\alpha_i(x), \quad (5.161)$$

iar

$$\hat{B}\hat{A}\alpha_i(x) = A_i\hat{B}\alpha_i(x) = A_iB_i\alpha_i(x). \quad (5.262)$$

Cele două expresii sunt identice pentru că valorile proprii A_i și B_i sunt scalari (numere reale). Atunci:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad (5.263)$$

pentru orice vector $\psi(x)$ din $\mathfrak{S}$, deoarece întotdeauna:

$$\psi(x) = \sum_k c_k \alpha_k(x) = \sum_k (\psi, \alpha_k) \alpha_k(x), \quad (5.264)$$

unde (ψ, α_k) este un număr. În cazul când c) implică pe b) se consideră că dacă $\hat{A}$ și $\hat{B}$ comută, pentru orice vector propriu

$$\hat{A}\hat{B}\alpha_i(x) = \hat{B}\hat{A}\alpha_i(x) = A_i\hat{B}\alpha_i(x), \quad (5.265)$$

adică $\hat{B}\alpha_i(x)$ este un vector propriu a lui $\hat{A}$ cu valoarea proprie A_i . Acest lucru este posibil doar dacă $\alpha_i(x)$ este un vector propriu și al lui $\hat{B}$.

Dacă două observabile $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$ sunt incompatibile atunci, conform teoremei de compatibilitate operatorii asociați $\hat{A}$ și $\hat{B}$ nu comută, adică cel puțin pentru un vector $\psi(x)$ din $\mathfrak{S}$,

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi(x) \neq 0. \quad (5.266)$$

Aceasta înseamnă că necompatibilitatea unor perechi de operatori observabilă se poate exprima printr-o ecuație de forma:

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = C, \quad (5.267)$$

unde C este un scalar nenul.

Pentru un astfel de caz incompatibilitatea dintre $\hat{A}$ și $\hat{B}$ este exprimată prin *principiul de incertitudine*, enunțat prima dată de W. Heisenberg în anul 1927. Dacă $\hat{A}$ și $\hat{B}$ verifică o ecuație de tipul (5.266), atunci incertitudinile asupra lui $\mathcal{A}$ și $\mathcal{B}$ în orice stare $\psi(x)$ a sistemului satisfac relația:

$$\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2}|C|. \quad (5.268)$$

Relația (5.268) trebuie înțeleasă în sensul că dacă obligăm sistemul aflat într-o stare să aibă incertitudini din ce în ce mai mici în măsurarea lui $\mathcal{A}$, atunci în aceeași stare lui $\mathcal{B}$ îi corespund incertitudini din ce în ce mai mari și invers. Cu alte cuvinte, dacă $\hat{A}$ și $\hat{B}$ verifică o ecuație de tipul (5.266) cu $C \neq 0$, atunci când $\mathcal{A}$ are o valoare într-o anumită stare, despre $\mathcal{B}$ nu mai are sens să se spună că are o valoare. Adică, dacă $\psi(x) = \alpha_i(x)$,

atunci $\Delta\hat{A} = 0$ și din ecuația (5.268) $\Delta\hat{B} = \infty$, deci nu mai are sens să spunem că $\mathcal{B}$ are o valoare. Pentru a demonstra relația (5.18) se utilizează expresiile incertitudinilor:

$$\Delta\hat{A} = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2} \quad (5.269)$$

și

$$\Delta\hat{B} = \sqrt{\langle\hat{B}^2\rangle - \langle\hat{B}\rangle^2}. \quad (5.270)$$

Între incertitudinile definite în (5.269) și (5.270) există relația:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi, (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \psi \rangle \right|. \quad (5.271)$$

Pentru a demonstra relația (5.271) se introduc operatorii $\hat{A}'$ și $\hat{B}'$ definiți de relațiile:

$$\hat{A}' = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle \quad \text{și} \quad \hat{B}' = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle, \quad (5.272)$$

care au următoarele proprietăți:

$$\hat{A}' \text{ și } \hat{B}' \text{ sunt hermitici,} \quad (5.273)$$

$$[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A}, \hat{B}], \quad (5.274)$$

$$(\hat{A}'\psi, \hat{A}'\psi) = (\Delta\hat{A})^2. \quad (5.275)$$

În cazul relației (5.273) rezultă succesiv:

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{A}'\psi) &= (\psi, (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\psi) = (\psi, \hat{A}\psi) - (\psi, \langle\hat{A}\rangle\psi) \\ &= (\hat{A}\psi, \psi) - (\langle\hat{A}\rangle\psi, \psi) = ((\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\psi, \psi) = (\psi, \hat{A}'\psi) = (\hat{A}'\psi, \psi). \end{aligned} \quad (5.276)$$

Analog se demonstrează pentru operatorul $\hat{B}'$.

Calculul comutatorului din relația (5.274) conduce la:

$$[\hat{A}', \hat{B}']\psi(x) = (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)\psi(x) - (\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\psi(x) = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi(x) = [\hat{A}, \hat{B}]\psi(x). \quad (5.277)$$

În cazul relației (5.275) se obține:

$$\begin{aligned} (\hat{A}'\psi, \hat{A}'\psi) &= (\psi, \hat{A}'^2\psi) = \left(\psi, (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\psi \right) = \left(\psi, (\hat{A}^2 - 2\langle\hat{A}\rangle\hat{A} + \langle\hat{A}\rangle^2)\psi \right) \\ &= \langle\hat{A}^2\rangle - 2\langle\hat{A}\rangle^2 + \langle\hat{A}\rangle^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2. \end{aligned} \quad (5.278)$$

Ținând seama de proprietățile operatorilor $\hat{A}'$ și $\hat{B}'$ (relațiile (5.273)-(5.275)) relația de incertitudine (5.268) se poate scrie sub forma:

$$\begin{aligned} (\psi, (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi) &= (\psi, (\hat{A}'\hat{B}' - \hat{B}'\hat{A}')\psi) = (\psi, \hat{A}'\hat{B}'\psi) - (\psi, \hat{B}'\hat{A}'\psi) \\ &= (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi) - (\hat{B}'\psi, \hat{A}'\psi) = (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi) - (\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi)^* = 2i \operatorname{Im}(\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi). \end{aligned} \quad (5.279)$$

Modulul relației (5.279) este:

$$|(\psi, (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi)| = 2|\operatorname{Im}(\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi)| \leq 2|(\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi)|. \quad (5.280)$$

Ținând seama de inegalitatea Schwarz:

$$|(\hat{A}'\psi, \hat{B}'\psi)| \leq \sqrt{(\hat{A}'\psi, \hat{A}'\psi)(\hat{B}'\psi, \hat{B}'\psi)}, \quad (5.281)$$

relația (5.279) devine:

$$\left| \left(\psi, (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi \right) \right| \leq 2\sqrt{\left(\hat{A}'\psi, \hat{A}'\psi \right) \left(\hat{B}'\psi, \hat{B}'\psi \right)} = 2\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B}. \quad (5.282)$$

sau

$$\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} \geq \frac{|C|}{2}, \quad (5.283)$$

unde

$$|C| = \left(\psi, (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi \right). \quad (5.284)$$

5.6.4. Evoluția în timp a stării cuantice

Energia și operatorul hamiltonian. Ecuația de evoluție în timp pentru $\psi(x)$. Postulatul

5. Fiecărui sistem fizic i se asociază un operator hermitic, liniar, $\hat{H}$, numit operatorul hamiltonian, care are următoarele proprietăți:

a) Operatorul hamiltonian $\hat{H}$ este operatorul observabilă asociat energiei totale a sistemului. Acestui operator i se asociază o mulțime ortonormată completă de vectori proprii $\{\eta_k(x)\}$ și o mulțime de valori proprii reale $\{W_k\}$, legate prin ecuații de tipul:

$$\hat{H}\eta_k(x) = W_k\eta_k(x), \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (5.285)$$

Numerele $\{W_k\}$ reprezintă valorile posibile (permise) ale energiei totale a sistemului.

b) Operatorul hamiltonian $\hat{H}$ determină evoluția în timp a vectorului de stare a sistemului prin ecuația:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t), \quad (5.286)$$

unde $\hbar = h/2\pi = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ este constanta Planck redusă.

Evoluția în timp a unui sistem este descrisă de ecuația (5.36) atât timp cât sistemul nu este perturbat. Conform postulatului 4 o măsurătoare făcută asupra unei observabile caracteristică sistemului perturbă în general starea acestuia. Cunoșcând forma explicită a operatorului hamiltonian se poate, în principiu, calcula expresia vectorului de stare al sistemului la momentul t dacă se cunoaște vectorul de stare la momentul $t = 0$. Conform postulatului 4 singura posibilitate de a cunoaște vectorul de stare la momentul $t = 0$ este de face o măsurătoare asupra sistemului aflat într-o stare necunoscută. Ca urmare a măsurătorii prin care s-a obținut valoarea A_k se știe că sistemul se află în starea $\alpha_k(x)$. Din acest moment sistemul va evolua în timp pornind de la starea descrisă de vectorul $\psi_0(x,0) = \alpha_k(x)$, conform ecuației (5.36). Evoluția în timp conform cu ecuația (5.36) continuă până când se face o nouă măsurătoare asupra sistemului, care trece într-o altă stare, descrisă de alt vector propriu și care va juca în continuare rolul funcției $\psi_0(x,0)$.

Se observă că această metodă de *preparare* a stării $\psi_0(x,0)$ depinde esențial de faptul că operația de măsurare ne indică doar care vector de stare va descrie starea sistemului imediat după măsurătoare și nu imediat înainte de măsurătoare.

Una din consecințele postulatului 3 a fost că vectorul de stare al sistemului are norma egală cu unitatea, adică $(\psi_t, \psi_t) = 1$. Este logic să ne întrebăm dacă comportarea în timp a lui $\psi_t(x)$ asigură ca norma să rămână constantă în timp. Pentru a răspunde la această întrebare se calculează variația în timp a normei:

$$\frac{d}{dt}(\psi, \psi) = \left(\frac{d\psi}{dt}, \psi \right) + \left(\psi, \frac{d\psi}{dt} \right). \quad (5.287)$$

Din relația (5.286) rezultă:

$$\frac{d\psi}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi. \quad (5.288)$$

Ținând seama de (5.287) relația (5.288) devine:

$$\frac{d}{dt}(\psi, \psi) = \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi, \psi \right) + \left(\psi, -\frac{i}{\hbar} \hat{H}\psi \right) = \frac{i}{\hbar} \{ (\hat{H}\psi, \psi) - (\psi, \hat{H}\psi) \} = 0 \quad (5.289)$$

deoarece $\hat{H}$ este un operator hermitic conform postulatului 5. Deci:

$$\frac{d}{dt}(\psi, \psi) = 0, \quad (5.290)$$

adică *norma vectorului de stare rămâne constantă în timp*.

Deci evoluția în timp a vectorului de stare are loc în așa fel încât acesta să rămână normat în timp, adică se respectă postulatul 1. Dependența de timp a vectorului $\psi_t(x)$ prezisă de postulatul 5 implică clar o dependență de timp a valorii așteptate $\langle \hat{A} \rangle_t = (\psi_t, \hat{A}\psi_t)$ și a probabilităților $|(\alpha_i, \psi)|^2$. Aceste dependențe sunt deduse în continuare.

Ecuția de evoluție în timp a lui $\langle \hat{A} \rangle_t$. Conform postulatului 3 rezultatele mai multor măsurători repetate asupra unei observabile $\mathcal{A}$ în starea $\psi_t(x)$ pot fi exprimate prin valoarea medie $\langle \hat{A} \rangle_t$ și incertitudinea $\Delta \hat{A}_t$. Comportarea în timp a lui $\Delta \hat{A}_t$ poate fi determinată dacă se cunoaște evoluția în timp a valorilor așteptate. Variația în timp a valorii așteptate este dată de relația:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t = \frac{d}{dt} (\psi, \hat{A}\psi) = \left(\frac{d\psi}{dt}, \hat{A}\psi \right) + \left(\psi, \hat{A} \frac{d\psi}{dt} \right). \quad (5.291)$$

Ținând seama de relația (5.288) rezultă:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_t &= \frac{i}{\hbar} \{ (\hat{H}\psi, \hat{A}\psi) - (\psi, \hat{A}\hat{H}\psi) \} = \frac{i}{\hbar} \{ (\psi, \hat{H}\hat{A}\psi) - (\psi, \hat{A}\hat{H}\psi) \} \\ &= \frac{i}{\hbar} (\psi, (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H})\psi) = \frac{i}{\hbar} (\psi, [\hat{H}, \hat{A}]\psi) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle \end{aligned} \quad (5.292)$$

deoarece $\hat{H}$ este hermitic. Din relația (5.292) se observă că dacă $\hat{A}$ comută cu hamiltonianul sistemului, $\hat{H}$ valoarea așteptată $\langle \hat{A} \rangle_t$ rămâne constantă în timp. Evident că în acest caz și $\Delta \hat{A}_t$ rămâne constant în timp. Aceasta apare ca o regulă pentru determinarea *constantelor de mișcare*. Deci, dacă $\hat{A}$ comută cu $\hat{H}$, sau echivalent, dacă $\mathcal{A}$ este compatibil cu energia totală a sistemului, atunci $\mathcal{A}$ este o constantă a mișcării în sensul că $\langle \hat{A} \rangle_t$ și $\Delta \hat{A}_t$ sunt independente de timp. În particular, deoarece comută cu el însuși, $\langle \hat{H} \rangle_t$ și $\Delta \hat{H}_t$ sunt întotdeauna constante în timp.

Ecuatiile de evoluție în timp pentru (α_n, ψ_t) . Constantele de mișcare și stările staționare. Există două motive pentru care este util să se cunoască dependența de timp a mărimilor:

$$a_n(t) = (\alpha_n, \psi_t), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.293)$$

În primul rând $|(\alpha_n, \psi_t)|^2$ determină forma curbei de distribuție pentru $\mathcal{A}$, iar în al doilea rând orice vector de stare al sistemului poate fi scris sub forma:

$$\psi_t(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (\alpha_n, \psi_t) \alpha_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \alpha_n(x). \quad (5.294)$$

Variația în timp a coeficienților dezvoltării $a_n(t)$ este dată de relația:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} a_n(t) &= \frac{d}{dt} (\alpha_n, \psi_t) = \left(\alpha_n, \frac{d}{dt} \psi_t \right) = \left(\alpha_n, -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi_t \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} (\alpha_n, \hat{H} \psi_t) = -\frac{i}{\hbar} \left(\alpha_n, \hat{H} \sum_{m=1}^{\infty} a_m(t) \alpha_m \right) = -\frac{i}{\hbar} \left(\alpha_n, \sum_{m=1}^{\infty} a_m(t) \hat{H} \alpha_m \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} a_m(t) (\alpha_n, \hat{H} \alpha_m), \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (5.295)$$

Ecuatiile (5.294) capătă o formă mult mai simplă dacă $\hat{A}$ comută cu $\hat{H}$, adică $\{\alpha_n(x)\} = \{\eta_n(x)\}$, unde $\{\eta_n(x)\}$ este baza ortonormată a lui $\hat{H}$. În acest caz ecuația (5.294) devine:

$$\frac{d}{dt} (\eta_n, \psi_t) = -\frac{i}{\hbar} W_n (\eta_n, \psi_t), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.296)$$

Ecuția (5.296) poate fi integrată dacă se scrie sub forma:

$$\frac{d(\eta_n, \psi_t)}{(\eta_n, \psi_t)} = -\frac{i}{\hbar} W_n dt, \quad (5.297)$$

și are soluția:

$$(\eta_n, \psi_t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right). \quad (5.298)$$

Dacă la $t = 0$, $\psi = \psi_0$, atunci la $t = 0$, $(\eta_n, \psi_t)_{t=0} = (\eta_n, \psi_0)$ și soluția (5.298) se scrie sub forma:

$$(\eta_n, \psi_t) = (\eta_n, \psi_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right). \quad (5.299)$$

Dacă $\hat{A}$ comută cu $\hat{H}$ se obține dependența explicită de timp a produsului scalar (α_n, ψ) . În acest caz:

$$\psi_t(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (\eta_n, \psi_t) \eta_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (\eta_n, \psi_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} W_n t\right) \eta_n(x). \quad (5.300)$$

S-a obținut dependența explicită de timp a vectorului de stare ψ_t . La $t = 0$,

$$\psi_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (\eta_n, \psi_0) \eta_n(x). \quad (5.301)$$

Se observă că dacă vectorul de stare al sistemului, $\psi_t(x)$, coincide cu unul din vectorii proprii ai lui $\hat{H}$ atunci toate observabilele sunt constante ale mișcării. O astfel de

stare se numește *stare staționară*. Dacă se notează cu $\{\psi_t^{(n)}(x)\}$ mulțimea vectorilor care descriu stările staționare, atunci orice vector de stare poate fi scris sub forma:

$$\psi_t(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (\psi_t^{(n)}, \psi_0) \psi_t^{(n)}(x). \quad (5.302)$$

Astfel, $\psi_t(x)$ poate fi determinat întotdeauna când se cunosc stările staționare.

În concluzie se constată că în mecanica cuantică starea unui sistem se modifică atât datorită trecerii timpului cât și ca rezultat al faptului că se face o măsurătoare asupra sistemului. Conform postulatului 3 modificarea inclusă în vectorul de stare printr-o măsurătoare este în principiu, necontrolabilă și imprevizibilă. Din acest punct de vedere este evident că mecanica cuantică nu este o teorie complet determinată în sensul lagrangean.

5.6.5. Mișcarea unidimensională a unei particule. Operatorii asociați observabilelor poziție și impuls

Considerațiile teoretice prezentate în capitolul 8 sunt particularizate în continuare pentru un sistem fizic de masă m care se deplasează de-a lungul axei Ox într-un potențial $V(x)$. În cazul mecanicii clasice un astfel de sistem este descris cu ajutorul a două observabile: poziția x și impulsul p . Multe alte observabile se pot exprima ca funcții de

poziție (coordonată) și impuls. De exemplu, observabilele viteză $v = \frac{p}{m}$ și energie

$E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$. În mecanica cuantică se asociază celor două observabile câte un operator. Expresia acestor operatori este precizată de postulatul 6.

Postulatul 6. Pentru o particulă menținută pe axa Ox observabilelor poziție și impuls li se atașează operatorii hermitici:

$$\hat{x} = x(t), \quad (5.303)$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}. \quad (5.304)$$

Orice observabilă din mecanica clasică, care este funcție de variabilele dinamice x și p , are atașată în mecanica cuantică un operator legat în același mod de operatorii $\hat{x}$ și $\hat{p}$ ca și observabilele, adică, dacă $\mathcal{A} = f(x, p)$, atunci

$$\hat{A} = f(\hat{x}, \hat{p}) = f\left(\hat{x}, -i\hbar \frac{d}{dx}\right). \quad (5.305)$$

Astfel, operatorul hamiltonian se scrie sub forma:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{U}(x). \quad (5.306)$$

Componentele operatorului moment cinetic au expresiile:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (5.307)$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (5.308)$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (5.309)$$

Operatorii poziție, $\hat{x}$ și impuls, $\hat{p}$ sunt *hermitici*.

În cazul operatorului, $\hat{x} = x$, întrucât $x = x^*$, iar valoarea proprie este coordonata, aceasta este un număr real.

Pentru $\hat{p}$ se obține:

$$\begin{aligned} (\psi_1, \hat{p}\psi_2) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_2(x)}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{i} \psi_1^*(x) d\psi_2(x) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left[\psi_1^* \psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} d\psi_1^* \psi_2 \right] = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi_1^*(x)}{dx} \psi_2(x) dx = (\hat{p}\psi_1, \psi_2). \end{aligned} \quad (5.310)$$

Pentru demonstrarea hermiticității operatorului $\hat{p}$ (relația (5.310)) s-a ținut cont că vectorii ψ_1 și ψ_2 sunt mărginiți deci tind la zero când $x \rightarrow \infty$. Asemănător:

$$(\psi_1, \hat{p}^2 \psi_2) = (\hat{p}\psi_1, \hat{p}\psi_2) = (\hat{p}^2 \psi_1, \psi_2) \quad (5.311)$$

și

$$(\psi_1, \hat{U}(x)\psi_2) = (\hat{U}(x)\psi_1, \psi_2), \quad (5.312)$$

deoarece operatorul $\hat{U}(x)$ înseamnă înmulțirea cu coordonata.

Ținând seama de relațiile (5.306), (5.311) și (5.312) rezultă că și operatorul $\hat{H}$ este *hermitic*, întrucât:

$$(\psi_1, \hat{H}(x)\psi_2) = (\hat{H}(x)\psi_1, \psi_2). \quad (5.313)$$

Înlocuind expresia (5.306) a lui $\hat{H}$ în *ecuația cu vectori și valori proprii* (5.285) rezultă celebra *ecuație Schrödinger independentă de timp*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \eta_n(x)}{dx^2} + U(x) \eta_n(x) = W_n \eta_n(x). \quad (5.314)$$

Aplicând relația de incertitudine (5.283) și (5.284) pentru observabilele poziție ($\hat{x} = x$) și impuls $\left(\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)$ rezultă:

$$C = [\hat{x}, \hat{p}] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} \cdot x \right) = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar, \quad (5.315)$$

iar

$$|C| = \hbar \quad (5.316)$$

și în final:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.317)$$

Din relația (5.67) se observă că dacă $\Delta x \rightarrow 0$, atunci $\Delta p \rightarrow \infty$, adică dacă se poate măsura cu precizie poziția unei particule nu se poate afla nimic despre impulsul său, și invers.

Interpretarea statistică a vectorului de stare $\psi(x)$. Pentru a da o interpretare statistică vectorului de stare $\psi(x)$ se calculează valoarea medie a operatorului coordonată:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{x} \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{x} |\psi|^2 dx. \quad (5.318)$$

Comparând expresia mediei dată de relația (5.318) cu media statistică a unui șir de valori cu o distribuție continuă putem considera că $|\psi|^2 dx$ reprezintă probabilitatea ca mărimea $\psi(x)$ să ia valori în intervalul $(x, x + dx)$. Astfel, $|\psi|^2$ capătă semnificația fizică de *densitate de probabilitate (probabilitatea pe unitatea de lungime) de localizare* a particulei în punctul de coordonată x . Notând cu

$$P(x, t) = \psi^*(x, t) \psi(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (5.319)$$

densitatea de probabilitate de localizare a particulei în punctul de coordonată x , variația în timp a acesteia este dată de relația:

$$\frac{d}{dt} P(x, t) = \frac{d}{dt} (\psi^*(x, t) \psi(x, t)) = \psi^* \frac{d\psi}{dt} + \psi \frac{d\psi^*}{dt}. \quad (5.320)$$

Din relațiile (5.286) și (5.314) rezultă:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi \quad (5.321)$$

și

$$-i\hbar \frac{d\psi^*}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi^*}{dx^2} + U(x)\psi^*. \quad (5.322)$$

Înlocuind $\frac{d\psi}{dt}$ din (5.321) și $\frac{d\psi^*}{dt}$ din (5.322) în relația (5.320) rezultă:

$$\frac{d}{dt} P(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi \frac{d^2\psi^*}{dx^2} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{d}{dx} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right). \quad (5.323)$$

Introducând mărimea:

$$S(x, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \quad (5.324)$$

și înlocuind (5.324) în (5.323) rezultă ecuația:

$$\frac{d}{dt} P(x, t) + \frac{d}{dx} S(x, t) = 0. \quad (5.325)$$

În cazul tridimensional $\frac{d}{dx} \rightarrow \nabla$, astfel că putem defini, prin analogie cu (5.324):

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*), \quad (5.326)$$

iar ecuația (5.75) devine:

$$\frac{\partial P(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \vec{j}(\vec{r}, t) = 0. \quad (5.327)$$

Deoarece $\frac{\partial P(\vec{r}, t)}{\partial t}$ reprezintă viteza de variație a densității de probabilitate de localizare a particulei în vecinătatea punctului definit de vectorul tridimensional $\vec{r}$, din relația (5.327) rezultă că $\vec{j}(\vec{r}, t)$ are semnificația unei densități de curent de probabilitate. Astfel, ecuația (5.327) prin analogie cu alte ecuații asemănătoare din fizică, se numește *ecuație de continuitate*.

5.7. Metode folosite în mecanica cuantică pentru descrierea evoluției în timp a microsistemelor

Teoria cuantică elaborată până în prezent ne permite să utilizăm pentru descrierea evoluției în timp a sistemelor cuantice, trei metode diferite. Fiecare din cele trei metode conduce la o formă particulară de scriere a ecuațiilor mecanicii cuantice. Cele trei metode de descriere se bazează pe *trei reprezentări diferite: reprezentarea Schrödinger, reprezentarea Heisenberg și reprezentarea de interacție (Dirac)*. Termenul de reprezentare este utilizat într-un sens foarte larg.

5.7.1. Reprezentarea Schrödinger

În cazul reprezentării Schrödinger evoluția microsistemelor în timp este descrisă de evoluția în timp a vectorului de stare:

$$\psi(x, t) = \hat{U}(t, t_0) \psi(x, t_0). \quad (5.328)$$

Operatorul de evoluție, $\hat{U}(t, t_0)$, este liniar, unitar,

$$\hat{U} \hat{U}^+ = \hat{U}^+ \hat{U} = 1 \quad (5.329)$$

și satisface condiția inițială:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1, \quad (5.330)$$

unde $\hat{U}^+$ este operatorul conjugat lui $\hat{U}$. Condiția (5.329) rezultă direct din faptul că normarea vectorului de stare este independentă de alegerea timpului

$$(\psi(x, t), \psi(x, t)) = (\psi(x, t_0), \psi(x, t_0)), \quad (5.331)$$

condiția (5.330) fiind evidentă. Ecuația de mișcare este ecuația lui Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}(x) \psi(x, t), \quad (5.332)$$

unde operatorul $\hat{H}(x)$ este independent de timp. Din condiția (5.330) și ecuația (5.286) rezultă expresia operatorului de evoluție $\hat{U}(t, t_0)$:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \hat{H}(x) \right]. \quad (5.333)$$

Exponențiala din relația (5.83) trebuie interpretată ca reprezentând dezvoltarea într-o serie de puteri.

5.7.2. Reprezentarea Heisenberg

În această reprezentare evoluția în timp a microsistemului este descrisă prin evoluția în timp a operatorilor hermitici asociați microsistemului considerat. Vectorii de stare sunt independenți de timp:

$$\psi(x, t) = \psi(x, t_0). \quad (5.334)$$

Conform relației (5.78) trecerea de la reprezentarea Schrödinger la Heisenberg se face cu operatorul $\hat{U}(t, t_0)$:

$$\psi(x, t) = \hat{U}^+(t, t_0)\psi(x, t_0). \quad (5.335)$$

Ținând seama de (5.79) și (5.80) relația (5.85) devine:

$$\psi(x, t) = \hat{U}^+\hat{U}\psi(x, t_0) = \hat{U}(t_0, t_0)\psi(x, t_0) = \psi(x, t_0). \quad (5.336)$$

Notând cu $\hat{L}(x)$ operatorul asociat unei marimi fizice în reprezentarea Schrödinger, acesta în reprezentarea Heisenberg este dat de relația:

$$\hat{L}(x, t) = \hat{U}^+(t, t_0)\hat{L}(x)\hat{U}(t, t_0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}(x)\right]\hat{L}(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}(x)\right]. \quad (5.337)$$

Diferențiind relația (5.87) în raport cu timpul rezultă:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}(x)\right]\hat{L}(x)\hat{H}(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}(x)\right] \\ &\quad - \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}(x)\right]\hat{H}(x)\hat{L}(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}(x)\right], \end{aligned} \quad (5.338)$$

care se poate scrie sub forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) = \hat{U}^+\hat{L}(x)\hat{H}(x)\hat{U} - \hat{U}^+\hat{H}(x)\hat{L}(x)\hat{U}. \quad (5.339)$$

Ținând seama de (5.79) relația (5.89) devine:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) = \hat{U}^+\hat{L}(x)\hat{U}\hat{U}^+\hat{H}(x)\hat{U} - \hat{U}^+\hat{H}(x)\hat{U}\hat{U}^+\hat{L}(x)\hat{U}. \quad (5.340)$$

Aplicând relația (5.337) operatorilor $\hat{L}(x)$ și $\hat{H}(x)$ se obține ecuația de mișcare în reprezentarea Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{L}(x, t) = [\hat{L}(x, t), \hat{H}(x, t)] \quad (5.341)$$

care este asemănătoare cu ecuația de evoluție în timp a mediei (valorii așteptate) în reprezentarea Schrödinger. Observând că la $t = t_0$, $\psi(x, t) = \psi(x, t_0)$ și $\hat{L}(x, t_0) = \hat{L}(x)$, se constată că la acest moment vectorii de stare și operatorii în cele două reprezentări coincid. Dar, imediat, la momentul de timp următor, comportarea în cele două reprezentări este distinctă. În reprezentarea Schrödinger vectorul de stare este cel care evoluează în timp, iar în reprezentarea Heisenberg operatorul este cel care evoluează în timp.

5.7.3. Reprezentarea de interacție

În cazul reprezentării de interacție, introdusă de Dirac, se presupune că hamiltonianul microsistemului se scindează în doi termeni, din care unul, $\hat{H}_0$ reprezintă hamiltonianul propriu-zis al sistemului și celălalt, $\hat{H}_1$, caracterizează interacția microsistemului inițial cu câmpurile exterioare sau cu alte sisteme (acesta exprimă efectul de perturbație la care este supus microsistemul inițial):

$$\hat{H}(x, t) = \hat{H}_0(x) + \hat{H}_1(x, t). \quad (5.342)$$

În aceste condiții vectorul de stare $\varphi(x, t)$ se exprimă în funcție de vectorul de stare $\psi(x, t)$, dat în reprezentarea Schrödinger:

$$\varphi(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}_0(x)\right]\psi(x, t). \quad (5.343)$$

Ținând seama de proprietățile operatorilor:

$$\hat{H}(x, \lambda) = \hat{U}^\dagger(x, \lambda)\hat{H}(x)\hat{U}(x, \lambda) \quad (5.344)$$

se poate scrie operatorul $\hat{L}_B(x, t)$ în reprezentarea de interacție sub forma:

$$\hat{L}_B(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}_0(x)\right]\hat{L}(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}_0(x)\right]. \quad (5.345)$$

Se observă că relațiile (5.343) și (5.345) nu conțin hamiltonianul total $\hat{H}(x, t)$, ci doar partea sa neperturbată $\hat{H}_0(x)$. Diferențiind relația (5.343) în raport cu timpul rezultă:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = -\hat{H}_0(x)\varphi(x, t) + i\hbar \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}_0(x)\right] \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}. \quad (5.346)$$

Întrucât:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \{\hat{H}_0(x) + \hat{H}_1(x, t)\}\psi(x, t), \quad (5.347)$$

și ținând seama de ecuația Schrödinger temporală, rezultă:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} &= \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}_0(x)\right]\hat{H}_1(x, t)\psi(x, t) \\ &= \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}_0(x)\right]\hat{H}_1(x, t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}_0(x)\right]\varphi(x, t) = \hat{H}_1(x, t)\varphi(x, t). \end{aligned} \quad (5.348)$$

Reunind rezultatele prezentate mai sus se obțin *ecuațiile de mișcare în reprezentarea de interacție pentru vectorii de stare*:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) = \hat{H}_1(x, t)\varphi(x, t) \quad (5.349)$$

și respectiv *operatori*:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{L}_B(x, t)}{\partial t} = [\hat{L}_B(x, t), \hat{H}_0(x, t)]. \quad (5.350)$$

Ecuația (5.350) se obține în urma diferențierii în raport cu timpul a relației (5.345). Se observă că în reprezentarea de interacție, dependența de timp a vectorului de stare este determinată de hamiltonianul de interacție (perturbație), $\hat{H}_1$, iar cea corespunzătoare operatorilor de partea neperturbată, $\hat{H}_0$. Astfel, reprezentarea de interacție ocupă un loc intermediar între reprezentările Schrödinger și Heisenberg.

5.8. Modele cuantice unidimensionale pentru rezolvarea ecuației cu vectori și valori proprii a operatorului energie (ecuația Schrödinger atemporală)

5.8.1. Particula liberă

Treapta de potențial. Cazul $W > U_0$. Se consideră mișcarea rectilinie a unei microparticule de masă m într-un potențial de tipul celui prezentat în fig. 5. 39.

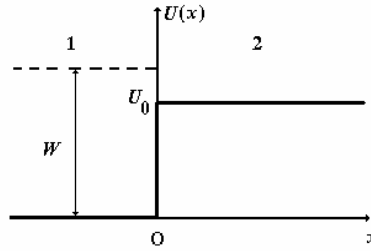


Fig. 5. 39. Treapta de potențial.

Ținând cont de relația dintre forță și energia potențială $F(x) = -\frac{\partial U}{\partial x}$, se observă că particula este liberă peste tot în afară de origine ($x = 0$), unde este supusă unei forțe dirijată spre stânga. Energia totală a particulei este:

$$W = T + U(x). \quad (5.351)$$

În cazul clasic, microparticula are în $x = 0$ energie cinetică $T = W$. Pentru $x > 0$, particula este încetinită până la energia $T_1 = W - U_0$, adică până la valoarea impulsului $p_1 = \sqrt{2m(W - U_0)}$, după care particula continuă să se deplaseze uniform spre dreapta. Se spune că are loc o transmisie totală a fasciculului de microparticule în $x = 0$.

Studiul mișcării particulei în cazul cuantic se face cu ajutorul *ecuației cu funcții și valori proprii ale operatorului $\hat{H}$* , scrisă în două domenii: $x < 0$, unde $U = 0$ și $x \geq 0$, unde $U = U_0$, adică:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} = W \varphi_1, \quad x < 0, \quad (5.352)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + U_0 \varphi_2 = W \varphi_2, \quad x \geq 0. \quad (5.353)$$

Introducând notațiile

$$k_0^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}, \quad k_1^2 = \frac{2m(W - U_0)}{\hbar^2}, \quad (5.354)$$

ecuațiile (5.352) și (5.353) se scriu:

$$\frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + k_0^2 \varphi_1 = 0, \quad x < 0, \quad (5.355)$$

$$\frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + k_1^2 \varphi_2 = 0, \quad x \geq 0. \quad (5.356)$$

Soluțiile ecuațiilor (5.355) și (5.356) sunt de forma:

$$\varphi_1(x) = A \exp(ik_0 x) + B \exp(-ik_0 x), \quad (5.357)$$

$$\varphi_2(x) = A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x). \quad (5.358)$$

În ecuația (5.357) cei doi termeni sunt asociați cu câte o *undă incidentă* (care se propagă în sensul lui $+\infty$) și o *undă reflectată* (care se propagă în sensul lui $-\infty$), iar în (5.358), respectiv cu câte o *undă transmisă* (spre $+\infty$) și o *undă reflectată* (spre $-\infty$). Întrucât în domeniul $x \geq 0$ unda reflectată ar trebui să se întoarcă de la infinit, ceea ce este

inscceptabil, rezultă că $B_1 = 0$. Pentru unda incidentă se obișnuiește să se aleagă amplitudinea egală cu unitatea, adică $A = 1$. Astfel ecuațiile (5.357) și (5.358) devin:

$$\varphi_1(x) = \exp(ik_0x) + B \exp(-ik_0x), \quad (5.359)$$

$$\varphi_2(x) = A_1 \exp(ik_1x). \quad (5.360)$$

În $x = 0$, vectorii de stare și derivatele acestora în raport cu x trebuie să fie continue:

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0), \quad (5.361)$$

$$\left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=0}, \quad (5.362)$$

deci

$$1 + B = A_1, \quad (5.363)$$

$$k_0(1 - B) = k_1 A_1 \quad (5.364)$$

de unde rezultă:

$$B = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} \text{ și } A_1 = \frac{2k_0}{k_0 + k_1}. \quad (5.365)$$

Densitatea de probabilitate de a găsi microparticula într-un interval de lungime din domeniul $x < 0$ este dată de relația:

$$\begin{aligned} P_1(x) &= |\varphi_1(x)|^2 = \left| \exp(ik_0x) + \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} \exp(-ik_0x) \right|^2 \\ &= \frac{2(2W - U_0)}{2W - U_0 + 2\sqrt{W(W - U_0)}} + 2 \frac{\sqrt{W} - \sqrt{W - U_0}}{\sqrt{W} + \sqrt{W - U_0}} \cos \frac{2x}{\hbar} \sqrt{2mW}. \end{aligned} \quad (5.366)$$

Densitatea de probabilitate de a găsi microparticula în domeniul $x \geq 0$ este:

$$P_2(x) = |\varphi_2(x)|^2 = \frac{4k_0^2}{(k_0 + k_1)^2} = \frac{4W}{2W - U_0 + 2\sqrt{W(W - U_0)}}. \quad (5.367)$$

Din relațiile (5.366) și (5.367) se observă că dacă $W \gg U_0$, $k_0 \cong k_1$ și $B = 0$, iar $A_1 = 1$ și se regăsește cazul clasic. Dacă $W \ll |U_0|$, $k_0 \ll k_1$ și $B = 1$, iar $A_1 = 0$, în acest caz apărând o reflexie totală în $x = 0$. Acest rezultat pur cuantic, are aplicații în fizica nucleului unde s-a constatat experimental că în unele reacții nucleare un neutron cu energie mică este reflectat când se apropie de suprafața unui nucleu, adică întâlnește un potențial atractiv mare. Pentru a evalua factorul de reflexie, definit prin raportul:

$$R = \left| \frac{j_r}{j_i} \right|, \quad (5.368)$$

trebuie calculate densitățile de curent de probabilitate incident:

$$j_i = \frac{\hbar}{2im} \left\{ [\exp(ik_0x)]^* \frac{d}{dx} [\exp(ik_0x)] - \exp(ik_0x) \frac{d}{dx} [\exp(ik_0x)]^* \right\} = \frac{\hbar}{2im} \cdot 2ik_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (5.369)$$

și respectiv reflectat:

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{\hbar}{2im} \left\{ [B \exp(-ik_0x)]^* \frac{d}{dx} [B \exp(-ik_0x)] - B \exp(-ik_0x) \frac{d}{dx} [B \exp(-ik_0x)]^* \right\} \\ &= \frac{\hbar}{2im} \cdot (-2ik_0) |B|^2 = -\frac{\hbar k_0}{m} \left| \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} \right|^2. \end{aligned} \quad (5.370)$$

Ținând seama de relațiile (5.369) și (5.370) rezultă:

$$R = \left| \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} \right|^2 = \left(\frac{\sqrt{W} - \sqrt{W - U_0}}{\sqrt{W} + \sqrt{W - U_0}} \right)^2, \quad (5.371)$$

care reprezintă *probabilitatea de reflexie* în $x = 0$.

Analog, *factorul de transmisie* se definește prin raportul:

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right|, \quad (5.372)$$

unde

$$\begin{aligned} j_t &= \frac{\hbar}{2im} \left\{ [A_1 \exp(ik_1 x)]^* \frac{d}{dx} [A_1 \exp(ik_1 x)] - A_1 \exp(ik_1 x) \frac{d}{dx} [A_1 \exp(ik_1 x)]^* \right\} \\ &= \frac{\hbar}{2im} \cdot 2ik_1 |A_1|^2 = \frac{\hbar k_1}{m} |A_1|^2 = \frac{\hbar k_1}{m} \frac{4k_0^2}{(k_0 + k_1)^2} \end{aligned} \quad (5.373)$$

reprezintă *densitatea de curent de probabilitate transmisă*. Ținând seama de relațiile (5.369) și (5.373) rezultă:

$$T = \frac{k_1}{k_0} \cdot \frac{4k_0^2}{(k_0 + k_1)^2} = \frac{4k_1 k_0}{(k_0 + k_1)^2} = \frac{4\sqrt{W(W - U_0)}}{2W - U_0 + 2\sqrt{W(W - U_0)}}, \quad (5.374)$$

care reprezintă *probabilitatea de transmisie* în $x = 0$.

Adunând relațiile (5.371) și (5.374) se observă că

$$R + T = 1, \quad (5.375)$$

ceea ce reprezintă *conservarea numărului de particule* (numărul de particule incidente este egal cu suma dintre numărul de particule reflectate și numărul de particule transmise).

b) Cazul $W < U_0$. În cazul clasic toate particulele care vin dinspre stânga sunt oprite de bariera de potențial din $x = 0$. Se spune că apare o *reflexie totală* în $x = 0$. Studiul mișcării particulei în cazul cuantic se face rezolvând ecuația Schrödinger temporală scrisă în cele două domenii:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} = W \varphi_1, \quad x < 0, \quad (5.376)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + U_0 \varphi_2 = W \varphi_2, \quad x \geq 0. \quad (5.377)$$

Introducând notațiile

$$k_0^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(U_0 - W)}{\hbar^2}, \quad (5.378)$$

ecuațiile (5.376) și (5.377) devin:

$$\frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + k_0^2 \varphi_1 = 0, \quad x < 0, \quad (5.379)$$

$$\frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} - k^2 \varphi_2 = 0, \quad x \geq 0. \quad (5.380)$$

Soluțiile ecuațiilor (5.379) și (5.380) sunt de forma:

$$\varphi_1(x) = \exp(ik_0 x) + B \exp(-ik_0 x), \quad (5.381)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 \exp(kx) + B_2 \exp(-kx). \quad (5.382)$$

Pentru ca $\varphi_2(x)$ să fie normabilă (cu norma finită) trebuie ca $A_2 = 0$. Astfel:

$$\varphi_2(x) = B_2 \exp(-kx). \quad (5.383)$$

Condițiile de continuitate în $x = 0$ se scriu sub forma:

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0), \quad (5.384)$$

$$\left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=0}, \quad (5.385)$$

deci

$$1 + B = B_2, \quad (5.386)$$

$$ik_0(1 - B) = -kB_2 \quad (5.387)$$

de unde rezultă:

$$B = \frac{k_0 - ik}{k_0 + ik} \text{ și } B_2 = \frac{2k_0}{k_0 + ik}. \quad (5.388)$$

Densitatea de probabilitate ca microparticula să se afle în domeniul $x < 0$ este:

$$\begin{aligned} P_1(x) &= |\varphi_1(x)|^2 = \left| \exp(ik_0x) + \frac{k_0 - ik_1}{k_0 + ik_1} \exp(-ik_0x) \right|^2 \\ &= 2 \left\{ 1 - 2 \sqrt{\frac{W}{U_0} \left(1 - \frac{W}{U_0} \right)} \sin \frac{2x}{\hbar} \sqrt{2mW} - \left(1 - \frac{2W}{U_0} \right) \cos \frac{2x}{\hbar} \sqrt{2mW} \right\}. \end{aligned} \quad (5.389)$$

Densitatea de probabilitate de a găsi microparticula în domeniul $x \geq 0$ este:

$$\begin{aligned} P_2(x) &= |\varphi_2(x)|^2 = \left| \frac{2k_0}{k_0 + ik} \exp(-kx) \right|^2 = \frac{4k_0^2}{k_0^2 + k^2} \exp(-2kx) \\ &= \frac{4W}{U_0} \exp \left[-\frac{2x}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} \right]. \end{aligned} \quad (5.390)$$

Densitatea de probabilitate dată de relația (5.390) este nenulă în cazul cuantic, cazul clasic fiind interzis. Pentru a calcula *factorul de reflexie* și cel de *transmisie* se calculează mai întâi densitățile de curent de probabilitate pentru cele trei unde, *incidentă*:

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{\hbar}{2im} \left\{ [\exp(ik_0x)]^* \frac{d}{dx} [\exp(ik_0x)] - \exp(ik_0x) \frac{d}{dx} [\exp(ik_0x)]^* \right\} \\ &= \frac{\hbar}{2im} \cdot 2ik_0 = \frac{\hbar k_0}{m}, \end{aligned} \quad (5.391)$$

reflectată:

$$j_r = \frac{\hbar}{2im} |B|^2 (-ik_0x) = -\frac{\hbar k_0}{m} \left| \frac{k_0 - ik}{k_0 + ik} \right|^2 = -\frac{\hbar k_0}{m} \quad (5.392)$$

și respectiv *transmisă*:

$$\begin{aligned} j_t &= \frac{\hbar}{2im} \left\{ \left[\frac{2k_0}{k_0 + ik} \exp(-kx) \right]^* \frac{d}{dx} \left[\frac{2k_0}{k_0 + ik} \exp(-kx) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{2k_0}{k_0 + ik} \exp(-kx) \frac{d}{dx} \left[\frac{2k_0}{k_0 + ik} \exp(-kx) \right]^* \right\} \end{aligned} \quad (5.393)$$

$$= \frac{\hbar}{2im} \cdot \exp(-2kx) \left\{ \frac{-4k_0^2 k}{k_0^2 + k^2} + \frac{4k_0^2 k}{k_0^2 + k^2} \right\} = 0.$$

Ținând seama de relațiile (5.391)-(5.393) rezultă:

$$R = \left| \frac{j_r}{j_i} \right| = 1, \quad (5.394)$$

și

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = 0. \quad (5.395)$$

Rezultatele (5.390) și (5.395) nu se contrazic, deoarece conform principiului de incertitudine Heisenberg, operația de măsurare poate avea un rezultat imprevizibil în sensul că sistemul (microparticula) poate traversa potențialul din $x = 0$ în loc să fie reflectată. Se observă că densitatea de probabilitate de localizare a microparticulei în domeniul $x > 0$ scade rapid cu distanța parcursă în domeniu.

În cazul unui electron ($m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg) și alegând $U_0 - W = 1$ eV $= 1,6 \cdot 10^{-19}$ J, pentru $x = 10^{-10}$ m se obține $\frac{2x}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} = 1,045$ și $\exp(-1,045) = 0,29$, pentru $x = 5 \cdot 10^{-10}$ m, $\frac{2x}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} = 5,2$ și $\exp(-5,2) = 0,005$, iar pentru $x = 10 \cdot 10^{-10}$ m se obține $\frac{2x}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} = 10,45$ și $\exp(-10,45) = 4,54 \cdot 10^{-8}$, valoare care este nesemnificativă. Deci, densitatea de probabilitate de localizare a microparticulei în domeniul $x > 0$ este nenulă doar pe o distanță foarte mică. Fenomenul este analog cu unda evanescentă din cazul reflexiei interne totale a undelor electromagnetice. S-ar părea că rezultatele date de relațiile (5.390) și (5.395) ar arăta că în cazul $W < U_0$ energia nu se conservă în aceste procese. Pentru a lămuri această problemă se ține cont că în cazul cuantic nu este posibilă cunoașterea simultană cu precizie a coordonatei și impulsului particulei. De asemenea, se presupune că microparticula se găsește în domeniul $x > 0$ într-un interval de lungime l , adică incertitudinea în determinarea coordonatei este $\Delta x = l$. Atunci, conform principiului de incertitudine Heisenberg, incertitudinea în măsurarea impulsului este:

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2l}, \quad (5.396)$$

căreia îi corespunde incertitudinea în energie:

$$\Delta W = \frac{(\Delta p)^2}{2l}. \quad (5.397)$$

Constatând că densitatea de probabilitate de localizare a microparticulei în domeniul $x > 0$ scade exponențial cu distanța pare logic să alegem pentru l valoarea la care exponențiala are valoarea unu:

$$\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} \approx 1 \quad (5.398)$$

de unde:

$$l = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - W)}}. \quad (5.399)$$

Atunci:

$$\Delta p \geq \sqrt{2m(U_0 - W)} \quad (5.400)$$

și

$$(\Delta p)^2 > 2m(U_0 - W), \quad (5.401)$$

sau:

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} > U_0 - W, \quad (5.402)$$

adică:

$$W + \frac{(\Delta p)^2}{2m} > U_0. \quad (5.403)$$

Astfel, energia complementară, transmisă microparticulei în cursul măsurării coordonatei, este mai mare decât diferența dintre energia potențială și cea cinetică și posibilitatea de a detecta microparticula la dreapta barierei din $x = 0$ nu contrazice legea conservării energiei.

Bariera de potențial. Efectul tunel. Bariera de potențial este o treaptă de potențial de lărgime finită a (fig. 5. 40). Din cele prezentate la treapta de potențial s-a constatat că din punct de vedere cuantic este interesant cazul în care $W < U_0$. Deci, în cazul unei bariere de potențial, variația potențialului cu coordonata poate fi scrisă sub forma:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x < 0, \quad x > a. \end{cases} \quad (5.404)$$

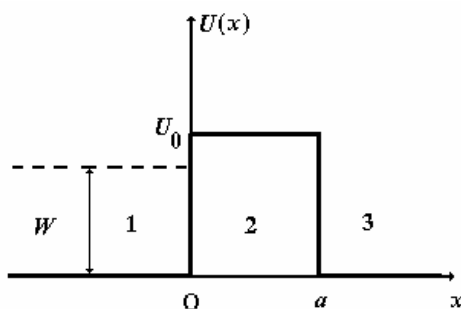


Fig. 5. 40. Bariera de potențial.

În cele trei regiuni ecuația Schrödinger atemporală se scrie sub forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} = W \varphi_1, \quad x < 0, \quad (5.405)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + U_0 \varphi_2 = W \varphi_2, \quad 0 \leq x \leq a. \quad (5.406)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_3}{dx^2} = W \varphi_3, \quad x > a, \quad (5.407)$$

Introducând notațiile

$$k_0^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m(U_0 - W)}{\hbar^2}, \quad (5.408)$$

ecuațiile (5.405)-(5.407) devin:

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + k_0^2\varphi_1 = 0, \quad x < 0, \quad (5.409)$$

$$\frac{d^2\varphi_2}{dx^2} - k^2\varphi_2 = 0, \quad 0 \leq x \leq a. \quad (5.410)$$

$$\frac{d^2\varphi_3}{dx^2} + k_0^2\varphi_3 = 0, \quad x > a. \quad (5.411)$$

Soluțiile ecuațiilor (5.59)-(5.61) sunt de forma:

$$\varphi_1(x) = \exp(ik_0x) + B \exp(-ik_0x), \quad (5.412)$$

$$\varphi_2(x) = A_1 \exp(kx) + B_1 \exp(-kx), \quad (5.413)$$

$$\varphi_3(x) = A_2 \exp(ik_0x) + B_2 \exp(-ik_0x). \quad (5.414)$$

În ecuația (5.414) termenul $B_2 \exp(-ik_0x)$ reprezintă unda reflectată la infinit, deci trebuie ca $B_2 = 0$.

Astfel ecuațiile (5.412)-(5.414) devin:

$$\varphi_1(x) = \exp(ik_0x) + B \exp(-ik_0x), \quad (5.415)$$

$$\varphi_2(x) = A_1 \exp(kx) + B_1 \exp(-kx), \quad (5.416)$$

$$\varphi_3(x) = A_2 \exp(ik_0x). \quad (5.417)$$

În $x = 0$ și $x = a$, condițiile de continuitate pentru vectorii de stare și derivatele acestora în raport cu x se scriu sub forma:

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0), \quad \varphi_2(a) = \varphi_3(a), \quad (5.418)$$

$$\left. \frac{d\varphi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=0}, \quad \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\varphi_3}{dx} \right|_{x=a}, \quad (5.419)$$

care conduc la ecuațiile:

$$1 + B = A_1 + B_1, \quad (5.420)$$

$$A_1 \exp(ka) + B_1 \exp(-ka) = A_2 \exp(ik_0a), \quad (5.421)$$

$$ik_0(1 - B) = k(A_1 - B_1), \quad (5.422)$$

$$k\{A_1 \exp(ka) - B_1 \exp(-ka)\} = ik_0 A_2 \exp(ik_0a). \quad (5.423)$$

Pentru a evalua *transparența barierei* trebuie calculat coeficientul A_2 . Eliminând pe B între ecuațiile (5.420) și (5.421) rezultă:

$$A_1 = \frac{2ik_0 + B_1(k - ik_0)}{k + ik_0}, \quad (5.424)$$

care se înlocuiește în relațiile (5.421) și (5.423), obținând:

$$\frac{2ik_0 \exp(ka)}{k + ik_0} + B_1 \left\{ \frac{(k - ik_0) \exp(ka)}{k + ik_0} + \exp(-ka) \right\} = A_2 \exp(ik_0a), \quad (5.425)$$

$$\frac{2ikk_0 \exp(ka)}{k + ik_0} + B_1 \left\{ \frac{k(k - ik_0) \exp(ka)}{k + ik_0} - k \exp(-ka) \right\} = ik_0 A_2 \exp(ik_0a). \quad (5.426)$$

După eliminarea lui B_1 între relațiile (5.425) și (5.426) rezultă:

$$\frac{A_2(k+ik_0)\exp(ik_0a)-2ik_0\exp(ka)}{(k-ik_0)\exp(ka)+(k+ik_0)\exp(-ka)} = \frac{ik_0A_2(k+ik_0)\exp(ik_0a)-2ikk_0\exp(ka)}{k(k-ik_0)\exp(ka)-k(k+ik_0)\exp(-ka)}, \quad (5.427)$$

de unde:

$$A_2 = \frac{4ikk_0\exp(-ik_0a)}{(k+ik_0)^2\exp(-ka)-(k-ik_0)^2\exp(ka)}. \quad (5.428)$$

Ținând seama de expresiile densităților de curent de probabilitate incident:

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{\hbar}{2im} \left\{ [\exp(ik_0x)]^* \frac{d}{dx} [\exp(ik_0x)] - \exp(ik_0x) \frac{d}{dx} [\exp(ik_0x)]^* \right\} \\ &= \frac{\hbar}{2im} \cdot 2ik_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \end{aligned} \quad (5.429)$$

și respectiv transmis:

$$j_t = \frac{\hbar}{2im} \left\{ [A_2\exp(ik_0x)]^* \frac{d}{dx} [A_2\exp(ik_0x)] - A_2\exp(ik_0x) \frac{d}{dx} [A_2\exp(ik_0x)]^* \right\} = \frac{\hbar k_0}{m} |A_2|^2 \quad (5.430)$$

transmitanța barierei devine:

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = |A_2|^2 = \frac{16k^2k_0^2}{(k^2+k_0^2)^2(\exp(2ka)+\exp(-2ka)-2)+16k^2k_0^2} \quad (5.431)$$

$$= \frac{4k^2k_0^2}{(k^2+k_0^2)^2\operatorname{sh}^2(ka)+4k^2k_0^2} = \frac{4W(U_0-W)}{U_0^2\operatorname{sh}^2(ka)\sqrt{2m(U_0-W)}+4W(U_0-W)}.$$

Rescriind relația (5.431) sub forma:

$$T = \frac{4}{\frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0} \right)^2 \exp(2ka) + 4} \quad (5.432)$$

se observă că la numitor putem neglija pe 4 în raport cu exponențiala, iar k și k_0 fiind de același ordin de mărime rezultă:

$$T = T_0 \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0-W)} \right\} \quad (5.433)$$

unde:

$$T_0 = 16 \frac{W}{U_0} \left(1 - \frac{W}{U_0} \right). \quad (5.434)$$

Din relația (5.433) se observă că transparența barierei depinde de lărgimea sa a . În tabelul 5. 3 sunt prezentate câteva valori ale transmitanței în cazul unui electron ($m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg) și o barieră pentru care $U_0 - W = 5$ eV = $8 \cdot 10^{-19}$ J.

Tabel 5. 3.

$a(10^{-10} \text{ m})$	1	1,3	1,5	1,8	2	5	10
T	0,1	0,04	0,03	0,016	0,008	$5,5 \cdot 10^{-7}$	$1,4 \cdot 10^{-12}$

La traversarea unei bariere de potențial microparticula nu pierde energie, aceasta părăsind bariera cu energia cu care a venit. Traversarea barierei de potențial se numește *efect tunel*.

Exemple de fenomene fizice explicate prin efect tunel. Emisia particulelor α . Energia particulelor α în nuclee este mult mai mică decât înălțimea barierei de potențial de la marginea nucleului. Astfel, fenomenul de *emisie de particule α din nucleu*, pus în evidență experimental, nu poate fi explicat altfel decât prin efect tunel.

Emisia la rece (emisia autoelectronică). S-a constatat experimental că sub influența unui câmp electric exterior intens electronii încep să iasă dintr-un metal la o temperatură oricât de coborâtă, fenomenul numindu-se de *emisie la rece (emisia autoelectronică)*. Explicația clasică a valorilor intensității curentului electric în cazul acestui fenomen nu concordă cu cele obținute experimental. În fig. 5. 41 a), b) este reprezentat potențialul electric al unui metal pentru un electron liber din acest metal, în lipsa unui câmp electric exterior (a) și respectiv în prezența acestuia (b).

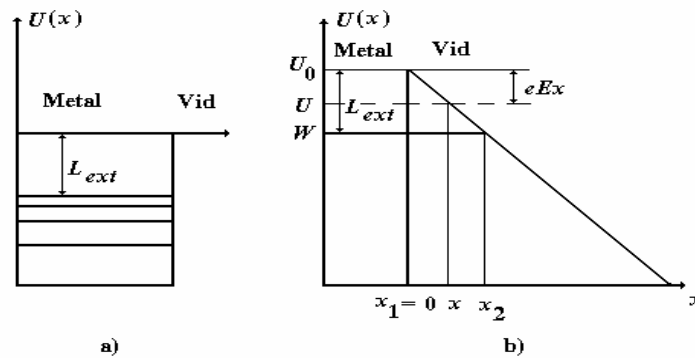


Fig. 5. 41 a), b). Potențialul electric al unui metal pentru un electron liber din acest metal: în lipsa unui câmp electric exterior (a) și în prezența acestuia (b).

Dacă se aplică metalului un câmp electric exterior de intensitate E , acesta acționează asupra unui electron din metal cu o forță eE . Electronul având energia W inferioară înălțimii barierei U_0 , acesta poate părăsi metalul prin efect tunel. Probabilitatea ca electronul să părăsească metalul este dată de transparența barierei:

$$T = T_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2m} \sqrt{U - W} dx \right\}, \quad (5.435)$$

dacă se alege originea în x_1 (adică $x_1 = 0$). Energia potențială fiind:

$$U(x) = U_0 - eEx, \quad (5.436)$$

rezultă că:

$$\begin{aligned} \int_0^{x_2} \sqrt{2m} \sqrt{U_0 - W} dx &= \int_0^{x_2} \sqrt{2m} \sqrt{U_0 - eEx - W} dx \\ &= -\frac{2\sqrt{2m}}{3} \frac{1}{eE} (U_0 - eEx_2 - W)^{3/2} + \frac{2\sqrt{2m}}{3} \frac{1}{eE} (U_0 - W)^{3/2} \end{aligned} \quad (5.437)$$

Din fig. 5. 41 b) se observă că:

$$U_0 - eEx_2 = W, \quad (5.438)$$

astfel că:

$$T = T_0 \exp \left\{ - \frac{2(U_0 - W)^{3/2} \sqrt{2m}}{3e\hbar} \cdot \frac{1}{E} \right\} = T_0 \exp \left(- \frac{\alpha}{E} \right), \quad (5.439)$$

unde:

$$\alpha = \frac{2(U_0 - W)^{3/2} \sqrt{2m}}{3e\hbar}. \quad (5.440)$$

Rezultatul obținut concordă cu dependența curentului electric obținut în funcție de intensitatea câmpului electric aplicat.

Diferența de potențial de contact. Acest fenomen a fost descoperit de A. Volta și se explică prin *trecerea electronilor prin bariera de potențial dintre două metale, egală cu diferența lucrurilor de ieșire a celor două metale.*

Dispozitive electronice. Funcționarea unor *dispozitive electronice (dioda tunel, joncțiunile dintre supraconductori etc.)* se explică pe baza efectului tunel.

5.8.2. Particula legată

Groapa de potențial cu pereți înfiniți. Pentru a studia comportarea unui sistem atomic sau nuclear se calculează valorile posibile ale energiei unei microparticule închisă într-o groapă de potențial unidimensională, adică într-un câmp definit prin (fig. 5. 42):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a, \\ \infty, & |x| > a. \end{cases} \quad (5.441)$$

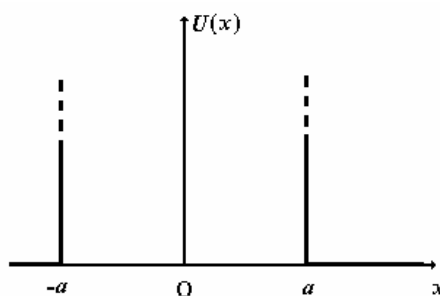


Fig. 5. 42. Groapa de potențial cu pereți înfiniți.

Din punct de vedere clasic microparticula este închisă în regiunea $|x| \leq a$ și oricare ar fi energia ei aceasta se ciocnește elastic de pereții gropii de potențial. Ecuația Schrödinger atemporală în domeniul $|x| \leq a$ se scrie:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = W \varphi, \quad (5.442)$$

iar în domeniul $|x| > a$, $\varphi = 0$, deoarece aici particula ar trebui să aibă energie infinită pentru a exista.

Introducând notația:

$$k_0^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}, \quad (5.443)$$

rezultă ecuația:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k_0^2\varphi = 0 \quad (5.444)$$

care are soluția:

$$\varphi(x) = A \sin k_0 x + B \cos k_0 x, \quad (5.445)$$

În $x = -a$ și $x = a$, condițiile de continuitate pentru vectorii de stare și derivatele acestora în raport cu x se scriu sub forma:

$$\varphi(-a) = \varphi(a) = 0, \quad (5.446)$$

$$\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=-a} = \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=a} = 0, \quad (5.447)$$

adică:

$$\varphi(a) = A \sin k_0 a + B \cos k_0 a = 0, \quad (5.448)$$

$$\varphi(-a) = -A \sin k_0 a + B \cos k_0 a = 0, \quad (5.449)$$

$$A k_0 \cos k_0 a = 0. \quad (5.450)$$

Adunând relațiile (5.448) și (5.449) rezultă:

$$B \cos k_0 a = 0 \text{ sau } B = 0. \quad (5.451)$$

Atunci din (5.448) și (5.450) se obține:

$$\varphi(x) = A \sin k_0 x \quad (5.452)$$

și

$$k_0 a = (2n+1) \frac{\pi}{2}, \quad (5.453)$$

de unde

$$k_0 = \frac{(2n+1)\pi}{2a}. \quad (5.454)$$

Scăzând relațiile (5.448) și (5.449) rezultă:

$$A \sin k_0 a = 0 \text{ sau } A = 0. \quad (5.455)$$

Astfel, în acest caz:

$$\varphi(x) = B \cos k_0 x. \quad (5.456)$$

Punând condiția (5.447) rezultă:

$$k_0 B \sin k_0 a = 0, \quad (5.457)$$

de unde

$$k_0 = \frac{n\pi}{a} = \frac{2n\pi}{2a}. \quad (5.458)$$

Combinând rezultatele (5.454) și (5.458) se obține:

$$k_0 = \frac{n\pi}{2a}, \quad (5.459)$$

iar din relația (5.443) rezultă valorile energiei microparticulei:

$$\frac{n^2 \pi^2}{4a^2} = \frac{2mW_n}{\hbar^2}, \quad (5.460)$$

sau

$$W_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.361)$$

Se observă că *particula legată în groapa de potențial cu pereți infiniți are un spectru discret de valori ale energiei, adică energia este cuantificată.*

Vectorii proprii ai operatorului energie sunt:

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} A \sin \frac{n\pi}{a} x \\ B \cos(2n+1) \frac{\pi}{2a} x \end{cases} \quad (5.462)$$

unde constantele A și B se calculează din condiția de normare:

$$\int_{-a}^a A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1, \quad (5.463)$$

sau

$$A^2 \int_{-a}^a \frac{1 - \cos \frac{2n\pi}{a} x}{2} dx = 1, \quad (5.464)$$

de unde rezultă:

$$A = \frac{1}{\sqrt{a}}. \quad (5.465)$$

Asemănător:

$$\int_{-a}^a B^2 \cos^2 \frac{(2n+1)\pi}{2a} x dx = 1, \quad (5.466)$$

de unde se obține:

$$B = \frac{1}{\sqrt{a}}. \quad (5.467)$$

Înlocuind valorile constantelor A și B din (5.465) și (5.467) în relația (5.462) rezultă vectorii proprii ai operatorului energie sub forma:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \begin{cases} \sin \frac{n\pi}{a} x = \sin \frac{2n\pi}{2a} x \\ \cos(2n+1) \frac{\pi}{2a} x \end{cases} \quad (5.468)$$

Se observă că toți vectorii proprii ai operatorului energie (5.468) sunt funcții pare pentru n impar și funcții impare pentru n par. Numărul de noduri ai vectorilor proprii (zerourile vectorilor proprii) crește odată cu valoarea proprie a operatorului energie, adică crește cu o unitate când se trece de la o valoare proprie la valoarea proprie imediat următoare. În fig. 5. 43 a) sunt reprezentați vectorii proprii până la $n = 4$, iar în fig. 5. 43 b) pătratele modulelor acestor vectori, care reprezintă densitățile de probabilitate de localizare a microparticulei în interiorul gropii.

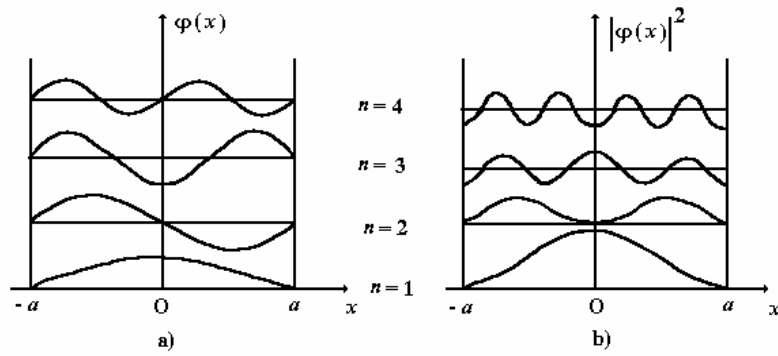


Fig. 5.43 a), b). Vectorii proprii (a) și pătratele modulelor acestor vectori (densitățile de probabilitate de localizare a microparticulei (b)), pentru $n = 1, 2, 3, 4$, în cazul unei gropi de potențial cu pereți înfiți.

Din fig. 5.43 b) se observă că în starea energetică cea mai coborâtă, ($n = 1$) densitatea de probabilitate de localizare a microparticulei are o valoare maximă în centrul gropii, în timp ce pentru nivelul energetic următor ($n = 2$) în centrul gropii densitatea de probabilitate de localizare este nulă.

Groapa de potențial tridimensională. În problemele studiate până în prezent funcția de stare depindea de o singură coordonată. Pentru a examina cel mai simplu caz tridimensional se consideră o microparticulă de masă m aflată într-un câmp de potențial tridimensional de forma:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & x \in [0, a], \quad y \in [0, b], \quad z \in [0, d] \\ \infty, & \text{în rest,} \end{cases} \quad (5.469)$$

reprezentat în fig. 5.44 și numit *cutie de potențial*.

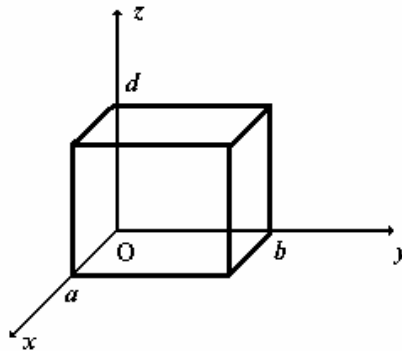


Fig. 5.44. Cutia de potențial.

Considerând că:

$$U(x, y, z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z) \quad (5.470)$$

ecuația Schrödinger atemporală se scrie sub forma:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - U_1 - U_2 - U_3) \psi = 0. \quad (5.471)$$

Pentru rezolvarea ecuației cu derivate parțiale (5.471) se aplică metoda separării variabilelor, adică se caută o soluție de forma:

$$\psi(x, y, z) = \varphi_1(x) \cdot \varphi_2(y) \cdot \varphi_3(z). \quad (5.472)$$

Înlocuind soluția (5.472) în ecuația (5.471) rezultă:

$$\left(\frac{1}{\varphi_1} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} - \frac{2mU_1}{\hbar^2} \right) + \left(\frac{1}{\varphi_2} \frac{d^2 \varphi_2}{dy^2} - \frac{2mU_2}{\hbar^2} \right) + \left(\frac{1}{\varphi_3} \frac{d^2 \varphi_3}{dz^2} - \frac{2mU_3}{\hbar^2} \right) = -\frac{2mW}{\hbar^2}. \quad (5.473)$$

Egalitatea (5.473) este adevărată dacă fiecare din cei trei termeni aflați în paranteze sunt constanți, adică dacă:

$$\frac{1}{\varphi_1} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} - \frac{2mU_1}{\hbar^2} = -k_1^2, \quad (5.474)$$

$$\frac{1}{\varphi_2} \frac{d^2 \varphi_2}{dy^2} - \frac{2mU_2}{\hbar^2} = -k_2^2, \quad (5.475)$$

$$\frac{1}{\varphi_3} \frac{d^2 \varphi_3}{dz^2} - \frac{2mU_3}{\hbar^2} = -k_3^2, \quad (5.476)$$

cu condiția ca:

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}. \quad (5.477)$$

Considerând cazul particular când în cutie

$$U_1 = U_2 = U_3 = 0 \quad (5.478)$$

ecuațiile (5.474)-(5.476) devin:

$$\frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + k_1^2 \varphi_1 = 0, \quad (5.479)$$

$$\frac{d^2 \varphi_2}{dy^2} + k_2^2 \varphi_2 = 0, \quad (5.480)$$

$$\frac{d^2 \varphi_3}{dz^2} + k_3^2 \varphi_3 = 0, \quad (5.481)$$

și au soluțiile:

$$\varphi_1(x) = A_1 \sin k_1 x + B_1 \cos k_1 x, \quad (5.482)$$

$$\varphi_2(y) = A_2 \sin k_2 y + B_2 \cos k_2 y, \quad (5.483)$$

$$\varphi_3(z) = A_3 \sin k_3 z + B_3 \cos k_3 z. \quad (5.484)$$

Punând condițiile la limită (în afara cutiei de potențial vectorul de stare este nul) se obțin relațiile:

$$\varphi_1(0) = \varphi_1(a) = 0, \text{ de unde } B_1 = 0 \text{ și } k_1 a = n_1 \pi, \quad (5.485)$$

$$\varphi_2(0) = \varphi_2(b) = 0, \text{ de unde } B_2 = 0 \text{ și } k_2 b = n_2 \pi, \quad (5.486)$$

$$\varphi_3(0) = \varphi_3(d) = 0, \text{ de unde } B_3 = 0 \text{ și } k_3 d = n_3 \pi. \quad (5.487)$$

Ținând seama de relațiile (5.482)-(5.487), rezultă:

$$\psi(x, y, z) = \varphi_1(x) \varphi_2(y) \varphi_3(z) = A \sin \frac{n_1 \pi}{a} x \sin \frac{n_2 \pi}{b} y \sin \frac{n_3 \pi}{d} z. \quad (5.488)$$

Constanta A se determină din condiția de normare:

$$\int_0^a \int_0^b \int_0^d A^2 \sin^2 \frac{n_1 \pi}{a} x \sin^2 \frac{n_2 \pi}{b} y \sin^2 \frac{n_3 \pi}{d} z dx dy dz = 1, \quad (5.489)$$

adică:

$$A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n_1 \pi}{a} x dx \int_0^b \sin^2 \frac{n_2 \pi}{b} y dy \int_0^d \sin^2 \frac{n_3 \pi}{d} z dz = 1, \quad (5.490)$$

de unde:

$$A = \sqrt{\frac{8}{abd}}. \quad (5.491)$$

Deci:

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abd}} \sin \frac{n_1 \pi}{a} x \sin \frac{n_2 \pi}{b} y \sin \frac{n_3 \pi}{d} z, \quad (n_1, n_2, n_3) = 1, 2, 3, \dots \quad (5.492)$$

Înlocuind relațiile (5.135)-(5.137) în condiția (5.127), rezultă:

$$W_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{d^2} \right), \quad (n_1, n_2, n_3) = 1, 2, 3, \dots \quad (5.493)$$

Vectorii de stare (5.492) reprezintă unde staționare cu $(n_1 + 1)$ plane nodale paralele cu planul yOz , cu $(n_2 + 1)$ plane nodale paralele cu xOz și cu $(n_3 + 1)$ plane nodale paralele cu planul xOy . Valorile posibile ale energiei exprimate prin relația (5.143) reprezintă un șir discret de grupe de trei valori întregi (n_1, n_2, n_3) asociate nivelului de energie determinat. Cele trei numere se numesc *numere cuantice*. În cazul particular când $a = b = d$ expresiile vectorilor de stare, (5.168) și respectiv ale energiei, (5.169) devin:

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin \frac{n_1 \pi}{a} x \sin \frac{n_2 \pi}{a} y \sin \frac{n_3 \pi}{a} z. \quad (5.494)$$

și

$$W_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (5.495)$$

Din relațiile (5.494) și (5.495) se observă că pentru fiecare grup de valori întregi (n_1, n_2, n_3) există o stare (vector de stare) diferită, dar valorile energiei corespunzătoare tuturor stărilor pentru care suma $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ este aceeași, sunt identice. Astfel, pentru stări diferite, (vectori de stare diferiți) se obține aceeași valoare a energiei. În acest caz se spune că stările sunt *degenerate* (nu pot fi deosebite doar printr-o măsurătoare asupra energiei) și numărul de stări care au aceeași valoare a energiei se numește *ordin de degenerare*.

5.8.3. Oscilatorul armonic liniar

Din punct de vedere clasic, un oscilator liniar armonic este un punct material de masă m a cărui mișcare are loc după o lege de tipul: $x(t) = A \cos(\omega t - \varphi_0)$, unde A și φ_0 sunt constante care se determină din condițiile inițiale. Forța care acționează asupra punctului material, (forța elastică) are expresia: $F(x) = -m\omega^2 x$. Energia potențială a

oscilatorului armonic este: $U(x) = -\int_0^x F(x)dx = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, iar energia totală a

oscilatorului armonic se scrie sub forma: $W = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$.

Valorile proprii ale hamiltonianului asociat oscilatorului armonic liniar. Din punct de vedere cuantic, oscilatorul liniar armonic este un sistem căruia i se asociază operatorul energie (hamiltonian):

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (5.496)$$

Ecuatia cu vectori și valori proprii a hamiltonianului se scrie sub forma:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \varphi_n(x) = W_n \varphi_n(x). \quad (5.497)$$

Oscilatorul liniar armonic cuantic fiind un sistem legat, nivelele sale energetice sunt discrete. Înmulțind ecuația (5.497) cu $\left(-\frac{2}{\hbar\omega} \right)$ și introducând notațiile:

$$y = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \alpha x \text{ și } \varepsilon_n = \frac{W_n}{\hbar\omega}, \quad (5.498)$$

rezultă:

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 \right) \varphi_n(y) = -2\varepsilon_n \varphi_n(y). \quad (5.499)$$

În vederea rezolvării ecuației (5.499) se introduc operatorii:

$$\hat{A} = y - \frac{d}{dy} \text{ și } \hat{B} = y + \frac{d}{dy} \quad (5.500)$$

care satisfac relațiile:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B})\varphi(y) &= \frac{1}{2} \left\{ \left(y + \frac{d}{dy} \right) \left(y\varphi - \frac{d\varphi}{dy} \right) + \left(y - \frac{d}{dy} \right) \left(y\varphi + \frac{d\varphi}{dy} \right) \right\} \\ &= \left(y^2 - \frac{d^2}{dy^2} \right) \varphi(y), \end{aligned} \quad (5.501)$$

adică:

$$y^2 - \frac{d^2}{dy^2} = \frac{1}{2}(\hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}), \quad (5.502)$$

și

$$\frac{1}{2}(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\varphi(y) = \frac{1}{2} \left\{ \left(y + \frac{d}{dy} \right) \left(y\varphi - \frac{d\varphi}{dy} \right) - \left(y - \frac{d}{dy} \right) \left(y\varphi + \frac{d\varphi}{dy} \right) \right\} = 1, \quad (5.503)$$

deci:

$$\frac{1}{2}(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = 1. \quad (5.504)$$

Din egalitățile (5.501) și (5.504) rezultă:

$$\hat{B}\hat{A} = y^2 - \frac{d^2}{dy^2} + 1, \quad (5.505)$$

$$\hat{A}\hat{B} = y^2 - \frac{d^2}{dy^2} - 1. \quad (5.506)$$

Ținând seama de relațiile (5.505) și (5.506) ecuația (5.499) se poate scrie sub forma:

$$-\hat{A}\hat{B}\varphi_n(y) - \varphi_n(y) = -2\varepsilon_n\varphi_n(y). \quad (5.507)$$

sau

$$\hat{A}\hat{B}\varphi_n(y) = (2\varepsilon_n - 1)\varphi_n(y). \quad (5.508)$$

și

$$\hat{B}\hat{A}\varphi_n(y) = (2\varepsilon_n + 1)\varphi_n(y). \quad (5.509)$$

Multiplicând ecuația (5.508) la stânga cu $\varphi_n^*(y)$ și integrând pe tot domeniul $y \in (-\infty, +\infty)$ rezultă:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) \hat{A}\hat{B}\varphi_n(y) dy &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) (2\varepsilon_n - 1)\varphi_n(y) dy = \\ &= (2\varepsilon_n - 1) \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) \varphi_n(y) dy = (2\varepsilon_n - 1) \geq 0, \end{aligned} \quad (5.510)$$

deoarece:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) \varphi_n(y) dy = 1, \quad (5.511)$$

vectorii proprii fiind normați, iar:

$$(2\varepsilon_n - 1) \geq 0, \quad (5.512)$$

deoarece ε_n conțin valorile proprii ale energiei. Alegând *cazul limită*:

$$2\varepsilon_n - 1 = 0, \quad (5.513)$$

se obține *valoarea minimă* a lui $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$. Înlocuind $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$ în ecuația (5.508) rezultă:

$$\hat{A}\hat{B}\varphi_0(y) = 0, \quad (5.514)$$

sau

$$\hat{B}\varphi_0(y) = 0, \quad (5.515)$$

adică:

$$\left(y + \frac{d}{dy}\right)\varphi_0(y) = 0, \quad (5.516)$$

deci:

$$\frac{d\varphi_0}{\varphi_0} = -y dy, \quad (5.517)$$

care are soluția:

$$\varphi_0(y) = C_0 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right). \quad (5.518)$$

Funcția $\varphi_0(y)$ poate fi un vector propriu deoarece este continuă și uniformă în tot domeniul de definiție a lui y și este normabilă, adică expresia $|\varphi_0(y)|^2$ este finită pentru $y \rightarrow \pm\infty$. Se aplică apoi la stânga operatorul $\hat{A}$ ecuației (5.509) și se obține:

$$\hat{A}\hat{B}\hat{A}\varphi_n(y) = (2\varepsilon_n + 1)\hat{A}\varphi_n(y). \quad (5.519)$$

Comparând relația (5.519) cu (5.518) se observă că prin aplicarea operatorului $\hat{A}$ funcției $\varphi_n(y)$ se trece de la valoarea $(2\varepsilon_n - 1)$ la valoarea $(2\varepsilon_n + 1)$. Rezultă că prin aplicarea operatorului $\hat{A}$ funcției proprii $\hat{A}\varphi_n(y)$ se trece de la valoarea $(2\varepsilon_n + 1)$ la valoarea $(2\varepsilon_n + 3)$, ș. a. m. d. Astfel, valorile lui $2\varepsilon_n$ sunt de forma: 1, 3, 5, ..., $(2n + 1)$ sau

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2}(2n + 1) = n + \frac{1}{2}, \text{ unde } n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.520)$$

Înlocuind relația (5.520) în notația (5.498) se obțin valorile proprii ale operatorului hamiltonian pentru un oscilator armonic liniar:

$$W_n = \varepsilon_n \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega. \quad (5.521)$$

Din relația (5.519) rezultă că:

$$\hat{A}\varphi_n(y) = \varphi_{n+1}(y). \quad (5.522)$$

Operatorul $\hat{A}$ care are proprietatea că fiind aplicat vectorului propriu într-o stare conduce la vectorul propriu din starea următoare se numește *operator de creare*.

Asemănător, aplicând operatorul $\hat{B}$ ecuației (5.508) rezultă:

$$\hat{B}\hat{A}\hat{B}\varphi_n(y) = (2\varepsilon_n - 1)\hat{B}\varphi_n(y). \quad (5.523)$$

Comparând ecuația (5.523) cu (5.509) se observă că prin aplicarea operatorului $\hat{B}$ vectorului $\varphi_n(y)$ s-a trecut de la valoarea $(2\varepsilon_n + 1)$ la valoarea $(2\varepsilon_n - 1)$, adică la valoarea proprie corespunzătoare stării energetice imediat inferioare. Din acest motiv operatorul $\hat{B}$ se numește *operator de anihilare*. Valorile din relația (5.521) formează un *șir discret de valori proprii ale energiei oscilatorului liniar armonic*. Se observă că în toate cazurile diferența dintre două valori posibile ale energiei este egală cu $\hbar\omega$, adică cu o cantă de energie, iar valoarea *minimă a energiei oscilatorului*, numită *energie de zero*, care nu poate fi anulată niciodată, este:

$$W_0 = \frac{\hbar\omega}{2}, \text{ (pentru } n = 0 \text{)}. \quad (5.524)$$

Existența acestei energii de zero, care justifică imposibilitatea experimentală de a atinge temperatura de 0 K, apare ca o incertitudine a energiei în starea cu $n = 0$.

Vectorii proprii ai hamiltonianului pentru oscilatorul liniar armonic cuantificat. Ținând seama că, (așa cum rezultă din relația (5.522)):

$$\varphi_{n+1}(y) = \hat{A}\varphi_n(y), \quad (5.525)$$

iar

$$\varphi_0(y) = C_0 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right), \quad (5.526)$$

rezultă că se poate construi orice vector propriu $\varphi_n(y)$ sub forma:

$$\varphi_n(y) = \hat{A}^n \varphi_0(y) = \left(y - \frac{d}{dy}\right)^{(n)} C_0 \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right). \quad (5.527)$$

Scriind ecuația (5.509) pentru vectorul propriu $\varphi_{n-1}(y)$, adică:

$$\hat{B}\hat{A}\varphi_{n-1}(y) = (2\varepsilon_{n-1} + 1)\varphi_{n-1}(y), \quad (5.528)$$

unde

$$\hat{A}\varphi_{n-1}(y) = \varphi_n(y). \quad (5.529)$$

și

$$2\varepsilon_{n-1} + 1 = \{2(n-1) + 1\} + 1 = 2n, \quad (5.530)$$

rezultă:

$$\hat{B}\varphi_n(y) = 2n\varphi_{n-1}(y). \quad (5.531)$$

Înmulțind la stânga ecuația (5.531) cu $\varphi_{n-1}^*(y)$ și integrând pe domeniul de variație a lui y rezultă:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n-1}^*(y) \hat{B}\varphi_n(y) dy = 2n \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n-1}^*(y) \varphi_{n-1}(y) dy. \quad (5.532)$$

Dar

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n-1}^*(y) \hat{B}\varphi_n(y) dy &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n-1}^*(y) \left(y + \frac{d}{dy}\right) \varphi_n(y) dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(y - \frac{d}{dy}\right) \varphi_{n-1}^*(y) \varphi_n(y) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{A}\varphi_{n-1}^*(y) \varphi_n(y) dy. \end{aligned} \quad (5.533)$$

Cantitatea $\varphi_{n-1}^*(y) \varphi_n(y) \Big|_{-\infty}^{+\infty}$ se anulează deoarece vectorii $\varphi_n(y)$ tind la zero când $y \rightarrow \pm\infty$. Ținând seama de relația (5.533), rezultă succesiv:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{n-1}^*(y) \hat{B}\varphi_n(y) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{A}\varphi_{n-1}^*(y) \varphi_n(y) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) \varphi_n(y) dy. \quad (5.534)$$

Comparând relațiile (5.531) și (5.534), se obține:

$$(\varphi_n, \varphi_n) = 2n(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1}) = 2n \cdot 2(n-1)(\varphi_{n-2}, \varphi_{n-2}) = \dots = 2^n n! (\varphi_0, \varphi_0) = 2^n n! \sqrt{\pi}, \quad (5.535)$$

pentru că:

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sqrt{\pi}. \quad (5.536)$$

Revenind la variabila x , adică înlocuind $y = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, condiția de normare se poate

scrie sub forma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (N_n \varphi_n(x))^* (N_n \varphi_n(x)) dx = N_n^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) \varphi_n(y) dy = 1, \quad (5.537)$$

de unde

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\pi \hbar}{m\omega} \right)^{-1/4} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \quad (5.538)$$

unde

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (5.539)$$

Astfel, vectorii proprii ai operatorului hamiltonian pentru oscilatorul armonic cuantificat sunt:

$$\begin{aligned} \varphi_n(y) &= N_n \left(y - \frac{d}{dy} \right)^{(n)} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \\ &= N_n (-1)^n \left\{ \exp(y^2) \frac{d^n}{dy^n} \exp(-y^2) \right\} \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right), \end{aligned} \quad (5.540)$$

pentru că:

$$\left(y - \frac{d}{dy} \right) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) = -\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \frac{d}{dy}. \quad (5.541)$$

Funcțiile date de relația (5.540) pot fi scrise sub forma:

$$\varphi_n(y) = N_n H_n(y) \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right), \quad (5.542)$$

unde

$$H_n(y) = (-1)^n \left\{ \exp(y^2) \frac{d^n}{dy^n} \exp(-y^2) \right\}, \quad (5.543)$$

sunt *polinoamele lui Hermite*.

$$H_0(y) = 1, \quad (5.544)$$

$$H_1(y) = 2y, \quad (5.545)$$

$$H_2(y) = 4y^2 - 2, \quad (5.546)$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y, \quad (5.547)$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12, \quad (5.548)$$

$$H_5(y) = 32y^5 - 160y^3 + 120y, \text{ etc.} \quad (5.549)$$

Din relațiile (5.544)-(5.549) se observă că *polinoamele Hermite sunt alternativ pare și impare odată cu valorile lui n*. Vectorii proprii (5.542) se scriu funcție de variabila x sub forma:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\alpha x) \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2} x^2\right). \quad (5.550)$$

Se poate demonstra că vectorii proprii (5.550) sunt *ortogonali*.

5.9. Teoria cuantică a momentului cinetic

În vederea studierii nivelelor energetice ale unei microparticule, aflată într-un câmp central, este necesară prezentarea teoriei cuantice a momentului cinetic.

5.9.1. Operatorii momentului cinetic

Operatorii momentului cinetic în coordonate carteziane au expresiile:

$$\hat{l}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (5.551)$$

$$\hat{l}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (5.552)$$

$$\hat{l}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (5.553)$$

iar

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = -\hbar^2 \left\{ \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \right\}. \quad (5.554)$$

De multe ori în calcule sunt utile expresiile operatorilor (5.551)-(5.554) în coordonate sferice (fig. 5. 45). Între coordonatele carteziane și cele sferice există relațiile:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad (5.555)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad (5.556)$$

$$z = r \cos \theta \quad (5.557)$$

sau

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (5.558)$$

$$\theta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (5.559)$$

$$\varphi = \arctg \frac{y}{x} \quad (5.560)$$

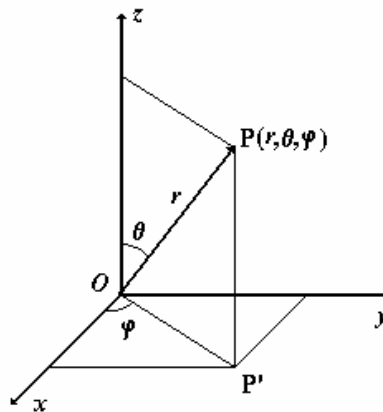


Fig. 5. 45. Coordonate carteziane și sferice.

Făcând schimbarea de variabile $(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \varphi)$ se obțin expresiile operatorilor momentului cinetic (5.551)-(5.554) în coordonate sferice:

$$\hat{l}_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cotg \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (5.561)$$

$$\hat{l}_y = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \quad (5.562)$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad (5.563)$$

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\}. \quad (5.564)$$

Între operatori există următoarele *relații de comutare*:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z, \quad (5.565)$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x, \quad (5.566)$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y, \quad (5.567)$$

și

$$[\hat{l}_x, \hat{l}^2] = 0, \quad (5.568)$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}^2] = 0, \quad (5.569)$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}^2] = 0. \quad (5.570)$$

Ca exemplificare se demonstrează relațiile (5.565) și (5.568):

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}_y] \psi(x, y, z) &= \hat{l}_x \hat{l}_y \psi - \hat{l}_y \hat{l}_x \psi = \\ &= -\hbar^2 \left\{ \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right\} \psi \\ &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi = i\hbar \hat{l}_z \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (5.571)$$

și

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}^2] \psi(x, y, z) &= \hat{l}_x (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) \psi - (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) \hat{l}_x \psi \\ &= (\hat{l}_x \hat{l}_y^2 - \hat{l}_y \hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_x \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z \hat{l}_x \hat{l}_z - \hat{l}_y^2 \hat{l}_x + \hat{l}_y \hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_z^2 \hat{l}_x + \hat{l}_z \hat{l}_x \hat{l}_z) \psi \\ &= i\hbar \hat{l}_z \hat{l}_y \psi - i\hbar \hat{l}_y \hat{l}_z \psi + i\hbar \hat{l}_y \hat{l}_z \psi - i\hbar \hat{l}_z \hat{l}_y \psi = 0. \end{aligned} \quad (5.572)$$

5.9.2. Vectorii proprii și valorile proprii ai operatorului $\hat{l}_z$

Ecuția cu vectori și valori proprii pentru operatorul $\hat{l}_z$ (5.63) este:

$$\hat{l}_z \Phi(\varphi) = l_z \Phi(\varphi) \quad (5.573)$$

sau

$$-i\hbar \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = m\hbar \Phi(\varphi) \quad (5.574)$$

unde

$$l_z = m\hbar, \quad (5.575)$$

având în vedere că $\hbar$ are dimensiunea fizică a unui moment cinetic. Ecuția (5.574) mai poate fi scrisă sub forma:

$$\frac{d\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = imd\varphi, \quad (5.576)$$

soluția acesteia fiind:

$$\Phi_m(\varphi) = C \exp(im\varphi), \quad (5.577)$$

constanta C rezultând din condiția de normare, adică:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \cdot \Phi_m(\varphi) d\varphi = 1, \quad (5.578)$$

de unde

$$C = 1/\sqrt{2\pi}. \quad (5.579)$$

Ținând seama de relațiile (5.577) și (5.579) vectorii proprii ai operatorului $\hat{l}_z$ pot fi scriși sub forma:

$$\Phi_m(\varphi) = (1/\sqrt{2\pi}) \exp(im\varphi). \quad (5.580)$$

Pentru ca soluția (5.580) să fie univocă, având în vedere că φ este o variabilă ciclică, trebuie ca:

$$\exp(im\varphi) = \exp(im(\varphi + 2\pi)), \quad (5.581)$$

adică:

$$\exp(im2\pi) = 1, \quad (5.582)$$

sau

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (5.583)$$

Din cele prezentate mai sus rezultă că măsurând componenta z a momentului cinetic se pot obține valori care să reprezinte multipli întregi ai cuantei de moment cinetic $\hbar$, numărul m numindu-se *număr cuantic magnetic*.

5.9.3. Vectorii proprii și valorile proprii ai operatorului $\hat{l}^2$

Deoarece operatorul $\hat{l}^2$ depinde de variabilele θ și φ se aleg ca vectori proprii funcții de variabilele θ și φ , $Y(\theta, \varphi)$. De asemenea, întrucât operatorii $\hat{l}_z$ și $\hat{l}^2$ *comută*, aceștia admit *aceeași bază ortonormată de vectori proprii*, deci se poate scrie că:

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta) \cdot \exp(im\varphi). \quad (5.584)$$

Ecuția cu vectori și valori proprii pentru operatorul $\hat{l}^2$ este de forma:

$$\hat{l}^2 Y(\theta, \varphi) = \beta^2 \hbar^2 Y(\theta, \varphi), \quad (5.585)$$

sau ținând seama de relația (5.584):

$$\hat{l}^2 \{P(\theta) \cdot \exp(im\varphi)\} = \beta^2 \hbar^2 P(\theta) \cdot \exp(im\varphi). \quad (5.586)$$

Înlocuind expresia (5.584) a operatorului $\hat{l}^2$ în relația (5.586) rezultă:

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\} \{P(\theta) \cdot \exp(im\varphi)\} = \beta^2 \hbar^2 P(\theta) \cdot \exp(im\varphi) \quad (5.587)$$

sau:

$$\left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} + \beta^2 \right\} P(\theta) = 0. \quad (5.588)$$

Pentru a rezolva ecuația (5.578) se caută mai întâi valorile posibile ale lui β , observând că întrucât diferența

$$\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 \quad (5.589)$$

este operatorul unei mărimi fizice pozitive $(\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2)$ rezultă că la o valoare dată a lui $\hat{l}^2$ trebuie să fie îndeplinită inegalitatea:

$$\beta^2 \geq m^2 \quad (5.590)$$

sau

$$-\beta \leq m \leq \beta. \quad (5.591)$$

Pentru aflarea valorilor proprii ale momentului cinetic se introduc operatorii:

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y \quad (5.592)$$

și

$$\hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y \quad (5.593)$$

care verifică următoarele relații de comutare:

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hbar\hat{l}_z, \quad (5.594)$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_+] = \hbar\hat{l}_+, \quad (5.595)$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_-] = -\hbar\hat{l}_-. \quad (5.596)$$

Pentru exemplificare se verifică relația (5.595):

$$\begin{aligned} [\hat{l}_z, \hat{l}_+] \psi &= \hat{l}_z(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\psi - (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\hat{l}_z\psi = (\hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z)\psi + i(\hat{l}_z\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_z)\psi \\ &= [\hat{l}_z, \hat{l}_x]\psi + i[\hat{l}_z, \hat{l}_y]\psi = (i\hbar\hat{l}_y + i(-i\hbar)\hat{l}_x)\psi = \hbar(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\psi = \hbar\hat{l}_+\psi \end{aligned} \quad (5.597)$$

Aplicând pe rând operatorii $\hat{l}_z\hat{l}_+$ și $\hat{l}_z\hat{l}_-$ vectorului propriu Φ_m corespunzător operatorului $\hat{l}_z$ se obține succesiv:

$$\hat{l}_z\hat{l}_+\Phi_m(\varphi) = (\hbar\hat{l}_+ + \hat{l}_+\hat{l}_z)\Phi_m(\varphi) = \hbar(m+1)\hat{l}_+\Phi_m(\varphi) \quad (5.598)$$

și

$$\hat{l}_z\hat{l}_-\Phi_m(\varphi) = (-\hbar\hat{l}_- - \hat{l}_-\hat{l}_z)\Phi_m(\varphi) = \hbar(m-1)\hat{l}_-\Phi_m(\varphi). \quad (5.599)$$

Pentru deducerea relațiilor (5.598) și (5.599) s-au folosit regulile de comutare (5.835) și respectiv (5.836). Din relațiile (5.598) și respectiv (5.599) se observă că $\hat{l}_+\Phi_m(\varphi)$ este vectorul propriu al operatorului $\hat{l}_z$ corespunzător valorii proprii $\hbar(m+1)$ iar $\hat{l}_-\Phi_m(\varphi)$ este vectorul propriu al operatorului $\hat{l}_z$ corespunzător valorii proprii $\hbar(m-1)$. Se poate scrie că:

$$\Phi_{m+1}(\varphi) = \text{const.} \hat{l}_+\Phi_m(\varphi), \quad (5.600)$$

$$\Phi_{m-1}(\varphi) = \text{const.} \hat{l}_-\Phi_m(\varphi). \quad (5.601)$$

Dacă în ecuația (5.600) se pune condiția ca $m = \beta$ rezultă că:

$$\hat{l}_+\Phi_\beta(\varphi) = 0, \quad (5.602)$$

deoarece stările cu $m > \beta$ nu există conform condiției (5.891). Aplicând operatorul $\hat{l}_-$ relației (5.602) rezultă:

$$\begin{aligned} \hat{l}_-\hat{l}_+\Phi_\beta(\varphi) &= (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)(\hat{l}_x + i\hat{l}_y)\Phi_\beta(\varphi) \\ &= (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + i(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x))\Phi_\beta(\varphi) = (\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar\hat{l}_z)\Phi_\beta(\varphi) = 0. \end{aligned} \quad (5.603)$$

Notând cu ℓ valorile proprii ale operatorului $\hat{L}$ și ținând cont de faptul că funcțiile $\Phi_\beta(\varphi)$ sunt vectori proprii atât ai operatorului $\hat{L}$ cât și $\hat{L}_z$, din ecuația (5.603), se obține:

$$\hbar^2 \beta^2 - \hbar^2 \ell^2 - \hbar^2 \ell = 0 \quad (5.604)$$

de unde

$$\beta^2 = \ell(\ell + 1). \quad (5.605)$$

Astfel, valorile proprii ale operatorului moment cinetic total $\hat{L}$ sunt $\ell\hbar$, iar valorile proprii ale operatorului pătrat al momentului cinetic sunt $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$. Operatorul proiecției pe axa Oz a momentului cinetic ($\hat{L}_z$) are valorile proprii $m = \ell, \ell - 1, \dots, -\ell$, adică $(2\ell + 1)$ valori (proiecții) pentru fiecare valoare a lui ℓ . Înlocuind rezultatul (5.605) în (5.588) rezultă ecuația:

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \ell(\ell + 1) \right\} P(\theta) = 0. \quad (5.606)$$

Această ecuație este bine cunoscută în teoria funcțiilor sferice având soluții care sunt finite și univoce pentru $\ell \geq |m|$ întregi și pozitivi. Soluțiile ecuației (5.606) sunt *polinoamele Legendre asociate* $P_\ell^{|m|}(\cos \theta)$, definite de:

$$P_\ell^{|m|}(\cos \theta) = \sin^{|m|} \theta \frac{d^{|m|} P_\ell(\cos \theta)}{(d \cos \theta)^{|m|}} = \frac{\sin^{|m|} \theta}{2^\ell \ell!} \frac{d^{|m|+\ell}}{(d \cos \theta)^{|m|+\ell}} (\cos^2 \theta - 1)^\ell, \quad (5.607)$$

unde

$$P_\ell(\cos \theta) = \frac{\sin^{|m|} \theta}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{(d \cos \theta)^\ell} (\cos^2 \theta - 1)^\ell \quad (5.608)$$

sunt *polinoamele Legendre*. Pe baza celor prezentate mai sus vectorii proprii (5.34) sunt dați de relația:

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = C \cdot P_\ell^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (5.609)$$

Constanta C se calculează din condiția de normare:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} C^2 \left| P_\ell^{|m|}(\cos \theta) \right|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1. \quad (5.610)$$

Soluția completă este dată expresia:

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}} \sin^{|m|} \theta \frac{d^{\ell+|m|} (\sin^{2\ell} \theta)}{d(\cos \theta)^{\ell+|m|}} e^{im\varphi}, \quad (5.611)$$

aceste funcții numindu-se *armonici sferice*, orice funcție putând fi dezvoltată în armonici sferice. *Paritatea* vectorilor proprii ai momentului cinetic este determinată de comportarea lor la schimbările de coordonate sferice: $r' = r$, $\theta' = \pi - \theta$, $\varphi' = \pi + \varphi$. Din condiția (5.604) a rezultat că operatorul modul al vectorului moment cinetic are valorile proprii $\hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}$, diferitelor valori ale lui ℓ corespunzându-le stări diferite pentru sistem. În fizica atomică se obișnuiește să se noteze diferitele stări cu valori diferite ale momentului cinetic prin litere în felul următor:

$\ell =$	0, 1, 2, 3,...
----------	----------------

starea	$s, p, d, f, \dots$
--------	---------------------

În tabelul 5. 4 sunt prezentate stările, valorile lui ℓ , m , vectorii proprii corespunzători și valorile momentului cinetic și a componentelor sale pentru stările cu $\ell \in [0, 2]$. Se observă că momentul cinetic $\vec{l}$ are modulul determinat de *numărul cuantic orbital (azimutal)* $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ și este egal cu $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$, fiecărei valori a lui ℓ corespunzându-i $(2\ell+1)$ valori a proiecției pe axa Oz a momentului cinetic, care sunt multipli întregi de $\hbar$. Celelalte două proiecții $\hat{l}_x$ și $\hat{l}_y$ sunt nedeterminate. Numerele întregi (în unități $\hbar$) care dau proiecția momentului cinetic pe axa Oz se pot interpreta ca o cuantificare a direcției lui $\vec{l}$, cu rezerva că nu este determinată decât una din direcțiile vectorului $\vec{l}$. Pentru a înțelege mai clar esența acestui fenomen se exprimă starea determinată de $\ell = 1$ (starea p). Vectorii proprii ai operatorului $\hat{l}^2$ în această stare sunt: $Y_{+1} = \sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{i\varphi}$, $Y_0 = \sqrt{3/4\pi} \cos \theta$, $Y_{-1} = \sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{-i\varphi}$, în toate aceste stări operatorul $\hat{l}^2$ având valoarea proprie $2\hbar^2$. Deci, starea p fiind triplu degenerată aceasta trebuie descrisă prin combinația liniară a celor trei vectori: $\Psi = C_1 Y_{+1} + C_2 Y_0 + C_3 Y_{-1}$. Datorită izotropiei spațiului nu există nici o direcție privilegiată. Deci, cunoscând proiecția momentului cinetic pe axa Oz , se poate izola într-un fel această direcție, de exemplu, aplicând paralel cu această direcție un câmp magnetic exterior și măsurând proiecția momentului cinetic pe această direcție. Dacă, de exemplu, rezultatul acestei măsurători este $+\hbar$, atunci după măsurătoare, starea sistemului este descrisă de vectorul $\Psi = Y_{+1}$, adică $|C_1|^2 = 1$ și $|C_2|^2 = |C_3|^2 = 0$. Proiecția l_z a momentului cinetic are o valoare bine determinată, dar nu se poate spune nimic despre celelalte două proiecții l_x și l_y . Acest lucru este rezultatul faptului că vectorul propriu Y_{+1} nu este și vector propriu pentru operatorii $\hat{l}_x$ și $\hat{l}_y$. Pentru a măsura proiecția momentului cinetic după altă direcție, se aplică un câmp magnetic după această nouă direcție, dar prin aceasta perturbăm starea inițială, sistemul trecând într-o nouă stare. Astfel, întotdeauna, în orice stare a sistemului, se poate măsura doar o singură proiecție a momentului cinetic. În acest caz axa Oz este cea după care se poate măsura proiecția momentului cinetic, de obicei, paralelă cu direcția unui câmp exterior. Pentru a înțelege particularitățile mișcării unei microparticule într-un câmp central este util să se calculeze densitatea de probabilitate de localizare a unei particule după diferite direcții, în câteva cazuri particulare.

Tabel 5. 4.

Starea	ℓ	m	Vectorul propriu	l	l_z	l_x, l_y
s	0	0	0	0	0	0
p	1	1	$\sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{i\varphi}$	$\sqrt{2}\hbar$	$\hbar$	nedeterminate
		0	$\sqrt{3/4\pi} \cos \theta$	$\sqrt{2}\hbar$	0	nedeterminate
		-1	$\sqrt{3/8\pi} \sin \theta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{2}\hbar$	$-\hbar$	nedeterminate

d	2	2	$\sqrt{15/32\pi} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}$	$\sqrt{6}\hbar$	$2\hbar$	nedeterminate
		1	$\sqrt{15/8\pi} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$	$\sqrt{6}\hbar$	$\hbar$	nedeterminate
		0	$\sqrt{5/16\pi} (3\cos^2 \theta - 1)$	$\sqrt{6}\hbar$	0	nedeterminate
		-1	$\sqrt{15/8\pi} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}$	$\sqrt{6}\hbar$	$-\hbar$	nedeterminate
		-2	$\sqrt{15/32\pi} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}$	$\sqrt{6}\hbar$	$-2\hbar$	nedeterminate

Din punct de vedere cuantic, orientarea spațială a vectorului moment cinetic este într-o anumită măsură nedeterminată, deoarece există întotdeauna o probabilitate nenulă de localizare a microparticulei în afara planului perpendicular pe direcția vectorului moment cinetic. În starea s ($\ell = 0$), probabilitatea de localizare după orice direcție este aceeași, adică microparticula se poate găsi oriunde pe suprafața unei sfere cu raza egală cu distanța față de centrul de mișcare. Raza sferei rămânând constantă se poate considera egală cu unitatea și probabilitatea de localizare a microparticulei după diferite direcții este dată de relația: $dP = \Psi^* \Psi d\sigma = |\Psi|^2 \sin \theta d\theta d\varphi$, unde $d\sigma$ este elementul de suprafață al sferei de

rază egală cu unitatea, iar $\Psi(\theta, \varphi) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$. Deci,

$$dP = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |e^{im\varphi}|^2 d\varphi \left| P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) \right|^2 \sin \theta d\theta = \left| P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) \right|^2 \sin \theta d\theta, \quad (5.612)$$

reprezintă probabilitatea de a găsi microparticula pe suprafața sferei de rază egală cu unitatea între cercurile de θ și $\theta + d\theta$. Aria cuprinsă între aceste două cercuri fiind egală cu $2\pi \sin \theta d\theta$, densitatea de probabilitate de localizare a microparticulei pe suprafața sferei este dată de relația:

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2\pi} \left| P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) \right|^2, \quad (5.613)$$

funcția $\left| P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) \right|^2$ caracterizând în mod deosebit distribuția microparticulei pe suprafața sferei după latitudine. În tabelul 5. 5 sunt prezentate valorile densității de probabilitate (5.63) și sumele acestor valori pentru toate valorile lui m corespunzătoare aceluiași ℓ , în cazurile în care $\ell \in [0, 2]$. În fig. 5. 46 sunt reprezentate densitățile de probabilitate de localizare a microparticulei, $\left| P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) \right|^2$, pe suprafața sferei de rază egală cu unitatea pentru $m = \pm \ell$ în cazurile $\ell = 0$ (fig. 5. 46 a), $\ell = 1$ (fig. 5.46 b), $\ell = 2$ (fig. 5. 46 c), $\ell = 3$ (fig. 5. 46 d).

Tabel 5. 5.

ℓ	m	$\left P_{\ell}^{ m }(\cos \theta) \right ^2$	$\sum_{m=-\ell}^{m=\ell} \left P_{\ell}^{ m }(\cos \theta) \right ^2$
0	0	1/2	1/2

1	± 1	$(3/4)\sin^2 \theta$	$3/2$
	0	$(3/2)\cos^2 \theta$	
2	± 2	$(15/16)\sin^4 \theta$	$5/2$
	± 1	$(15/4)\sin^2 \theta \cos^2 \theta$	
	0	$(5/8)(3\cos^2 \theta - 1)^2$	

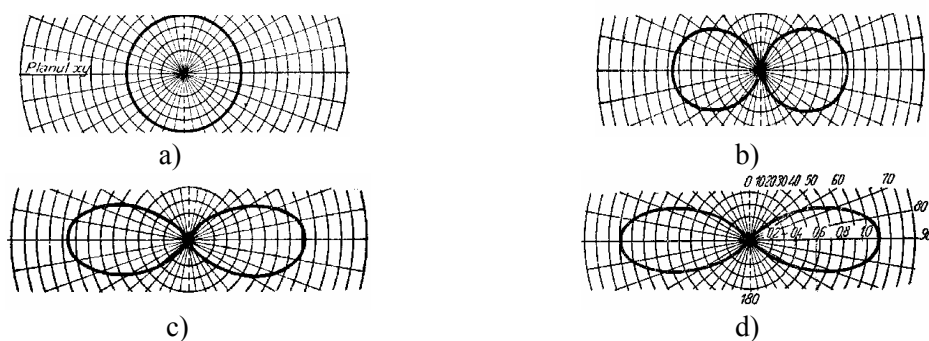


Fig. 5.46 a), b), c), d). Densitățile de probabilitate de localizare a microparticulei pentru $m = \pm \ell$ în cazurile: a) $\ell = 0$, b) $\ell = 1$, c) $\ell = 2$, d) $\ell = 3$.

Diagramele polare din fig. 5. 46 sunt astfel construite încât dacă dirijăm raza vectoare din centru spre punctul de pe curbă, lungimea segmentului până la intersecția cu curba determină densitatea de probabilitate de localizare a microparticulei pe sferă în orice punct de pe cercul corespunzător latitudinii respective θ , care este unghiul dintre raza vectoare și axa verticală Oz . Se observă că $\theta = \frac{\pi}{2}$ corespunde orientării orbitelor Bohr,

probabilitatea fiind maximă în acest caz, dar rămâne nenulă și pentru alte direcții. Rezultă că pentru a obține o imagine spațială trebuie construit solidul de revoluție obținut prin rotirea figurilor reprezentate în jurul direcției verticale. Din fig. 5. 46 se constată o ameliorare progresivă a concordanței cu teoria lui Bohr, pe măsură ce ℓ crește. Astfel, pentru $\ell = 0$ (starea s) nu există nici o concordanță, diagrama fiind un cerc. Odată cu creșterea lui ℓ diagrama se aplatizează din ce în ce mai mult, distribuția microparticulelor concentrându-se tot mai mult în apropierea planului orbitei Bohr.

5.10. Mișcarea într-un câmp de forțe central

5.10.1. Ecuația Schrödinger în cazul mișcării într-un câmp de forțe central

Operatorul energie (hamiltonian) asociat unei microparticule de masă M , aflată într-un potențial central oarecare $U(r)$ are expresia:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \hat{U}(\vec{r}) \quad (5.614)$$

care scrisă în coordonate sferice este¹:

¹ S-a notat masa particulei cu majuscula M , pentru a evita confuzia cu numărul cuantic magnetic m .

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} + \hat{U}(r). \quad (5.615)$$

Ținând seama că operatorul momentului cinetic total are expresia:

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}. \quad (5.616)$$

expresia lui $\hat{H}$ în coordonate sferice este de forma:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2(\theta, \varphi)}{2Mr^2} + \hat{U}(r). \quad (5.617)$$

Se observă că

$$[\hat{H}, \hat{l}^2] = 0 \text{ și } [\hat{H}, \hat{l}_z] = 0 \quad (5.618)$$

unde $\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, ceea ce înseamnă că putem cunoaște cu precizie valorile energiei și ale

momentului cinetic total simultan, pe de o parte, și ale energiei și proiecției momentului cinetic pe axa Oz pe de altă parte. Mai mult, dacă scriem ecuația cu vectori și valori proprii pentru operatorul energie, adică

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2(\theta, \varphi)}{2Mr^2} + \hat{U}(r) \right\} \Psi_n(r, \theta, \varphi) = W_n \Psi_n(r, \theta, \varphi) \quad (5.619)$$

și exprimăm vectorii proprii sub forma produsului:

$$\Psi_n(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (5.620)$$

atunci $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ sunt chiar vectorii proprii ai operatorului moment cinetic total. Ținând seama de ecuația cu vectori și valori proprii corespunzătoare pătratului momentului cinetic total

$$\hat{l}^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (5.621)$$

din ecuația (5.621) în urma simplificării cu $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ rezultă:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2Mr^2} + \hat{U}(r) \right\} R_{n\ell}(r) = W_n R_{n\ell}(r), \quad (5.622)$$

care poartă numele de *ecuație radială*.

5.10.2. Vectorii și valorile proprii corespunzători operatorului energie pentru atomii hidrogenoizi

În cazul mișcării unui electron în câmpul electric al unui nucleu încărcat electric cu sarcina $+Ze$ energia potențială este dată de relația:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (5.623)$$

Înlocuind relația (5.623) în ecuația (5.9) și introducând notațiile:

$$\frac{2MW}{\hbar^2} = \lambda, \quad \frac{MZe^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = \alpha, \quad (5.624)$$

rezultă:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left(\lambda + \frac{2\alpha}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R(r) = 0. \quad (5.625)$$

Ecuția (5.625) corespunde unei mișcări unidimensionale în potențialul echivalent prezentat în fig. 5. 47: $U'(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$.

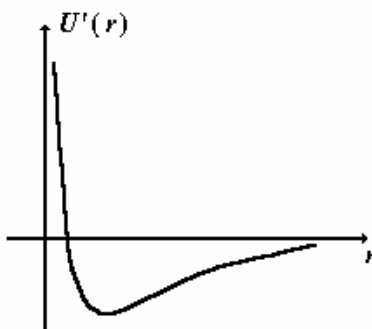


Fig. 5. 47. Reprezentarea grafică a potențialului $U'(r)$.

În relația (5.625) pentru r suficient de mare, primul termen este predominant, astfel că $U' < 0$, iar pentru r mic, dominant este cel de-al doilea termen și $U' > 0$. Astfel, pentru $U' < 0$, potențialul este de forma unei gropi de potențial, valorile energiei fiind cuantificate, iar pentru $U' > 0$, particula care vine de la dreapta la stânga este reflectată de bariera de înălțime infinită și își continuă mișcarea spre dreapta. În acest caz operatorului energie îi corespunde un spectru continuu de valori proprii. În cele ce urmează se va considera cazul $U' < 0$, căruia îi corespunde și $W < 0$. Cazul energiei totale pozitive corespunde problemelor de ciocniri, de exemplu, problema difuziei electronilor; cazul valorilor proprii continue fiind mult mai complex din punct de vedere matematic.

Din relația (5.625) se observă că mărimea λ are dimensiunea fizică a inversului pătratului unei lungimi. Notând cu:

$$\lambda = -\frac{1}{r_0^2} \quad (5.626)$$

ecuația (5.624) devine:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left(\frac{2\alpha}{r} - \frac{1}{r_0^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R(r) = 0. \quad (5.627)$$

În cazul când $r \rightarrow \infty$ ecuația (5.627) se scrie sub forma:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} - \frac{1}{r_0^2} R(r) = 0. \quad (5.628)$$

Soluția ecuației (5.628) este:

$$R(r) = \exp\left(\pm \frac{r}{r_0}\right). \quad (5.629)$$

Din cele două soluții (5.629) numai cea cu semnul minus respectă condiția ca funcția $R_\infty(r)$ să fie mărginită. Introducând variabila adimensională $\rho = 2\frac{r}{r_0} = 2r\sqrt{-\lambda}$,

unde $\frac{d}{dr} = \frac{d}{d\rho} \frac{d\rho}{dr} = \frac{2}{r_0} \frac{d}{d\rho}$ și $\frac{d^2}{dr^2} = \frac{d}{d\rho} \left(\frac{2}{r_0} \frac{d}{d\rho} \right) \frac{d\rho}{dr} = \frac{4}{r_0^2} \frac{d^2}{d\rho^2}$, ecuația (5.627) devine:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}} \frac{1}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) R = 0. \quad (5.630)$$

Soluția ecuației (5.630) este de forma:

$$R(\rho) = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) f(\rho). \quad (5.631)$$

Înlocuind soluția (5.631) în (5.630) și ținând seama că: $\frac{dR}{d\rho} = \left(\frac{df}{d\rho} - \frac{f}{2} \right) \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$

și $\frac{d^2 R}{d\rho^2} = \left(\frac{d^2 f}{d\rho^2} - \frac{df}{d\rho} + \frac{1}{4} f \right) \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$, ecuația (5.630) devine:

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \left(\frac{2}{\rho} - 1 \right) \frac{df}{d\rho} + \left\{ \left(\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}} - 1 \right) \frac{1}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right\} f = 0. \quad (5.632)$$

Alegând funcția $f(\rho)$ sub forma unei serii de puteri de forma: $f(\rho) = \rho^v (a_0 + a_1 \rho^1 + a_2 \rho^2 + \dots) = \rho^v \sum_{\mu=0} a_\mu \rho^\mu = \sum_{\mu=0} a_\mu \rho^{v+\mu}$, în urma înlocuirii funcției

$f(\rho)$ în (5.632) și ținând seama că: $\frac{df}{d\rho} = \sum_{\mu=0} (v+\mu) a_\mu \rho^{v+\mu-1}$ și

$\frac{d^2 f}{d\rho^2} = \sum_{\mu=0} (v+\mu)(v+\mu-1) a_\mu \rho^{v+\mu-2}$, rezultă:

$$\sum_{\mu=0} \{ (v+\mu)(v+\mu+1) - \ell(\ell+1) \} a_\mu \rho^{v+\mu-2} - \sum_{\mu=0} \left\{ v+\mu+1 - \frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}} \right\} a_\mu \rho^{v+\mu-1} = 0. \quad (5.633)$$

Pentru ca ecuația (5.633) să fie verificată identic, trebuie ca toți coeficienții puterilor lui ρ să fie nuli. Termenul inferior se obține pentru $\mu = 0$:

$$\{ v(v+1) - \ell(\ell+1) \} a_0 \rho^{v-2} = 0. \quad (5.634)$$

Alegând $a_0 \neq 0$ rezultă că:

$$v(v+1) = \ell(\ell+1) \quad (5.635)$$

de unde:

$$v = \ell \text{ și } v = -(\ell+1) \quad (5.636)$$

Pentru $v = -(\ell+1)$ seria $f(\rho)$ tinde la infinit în $\rho = 0$. Rezultă că este acceptabilă doar soluția:

$$v = \ell. \quad (5.637)$$

Înlocuind relația (5.637) în (5.633) rezultă:

$$\sum_{\mu=0} \{ (\ell+\mu)(\ell+\mu+1) - \ell(\ell+1) \} a_\mu \rho^{\ell+\mu-2} - \sum_{\mu=0} \left\{ \ell+\mu+1 - \frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}} \right\} a_\mu \rho^{\ell+\mu-1} = 0. \quad (5.638)$$

Alegând $\mu = i$ și anulând coeficientul puterii lui $\rho^{\ell+i-1}$ se obține formula de recurență:

$$a_{i+1} = \frac{\ell + i + 1 - \frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}}{(\ell + i + 1)(\ell + i + 2) - \ell(\ell + 1)} a_i. \quad (5.639)$$

Soluția (5.633) este finită pentru orice ρ dacă seria care înmulțește pe ρ^ℓ se transformă într-un polinom. Admițând că ultimul termen nenul al seriei este cel pentru care $i = n_r$, rezultă:

$$a_{n_r+1} = \frac{\ell + n_r + 1 - \frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}}{(\ell + n_r + 1)(\ell + n_r + 2) - \ell(\ell + 1)} a_{n_r} = 0, \quad (5.640)$$

unde a_{n_r} . Din relația (5.640) se obține:

$$\sqrt{-\lambda} = \frac{\alpha}{\ell + n_r + 1} = \sqrt{-\frac{2MW}{\hbar^2}}, \quad (5.641)$$

de unde ținând seama de notațiile (5.11) rezultă:

$$W_n = -\frac{MZ^2 e^4}{32\pi^2 (\ell + n_r + 1)^2 \hbar^2 \epsilon_0^2}. \quad (5.642)$$

Numărul întreg n_r introdus este un nou număr cuantic. Se observă că valorile proprii ale energiei depind doar de suma:

$$n = \ell + n_r + 1. \quad (5.643)$$

Valoarea minimă a lui ℓ este zero iar valoarea maximă se obține pentru $n_r = 0$, aceasta fiind $n - 1$. Deci, pentru o valoare dată a *numărului cuantic principal* n , numărul cuantic ℓ ia valorile:

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, (n-1). \quad (5.644)$$

Diferitele stări ale atomului hidrogenoid se pot descrie cu ajutorul celor trei numere cuantice n_r, ℓ, m , dar fiind cunoscuți n și ℓ , numărul n_r se poate determina cu ajutorul relației (5.39). Pentru comoditate se obișnuiește să se folosească cele trei numere cuantice n, ℓ, m . Cu excepția stării fundamentale, pentru care $n = 1$ și $\ell = m = 0$, toate celelalte stări sunt *degenerate*. *Gradul de degenerare* se poate determina știind că pentru un n dat, deci pentru o anumită valoare a energiei, numărul de stări este dat de cele $(2\ell + 1)$ valori ale lui m , unde ℓ ia valori între 0 și $(n-1)$, adică numărul de stări ale atomului hidrogenoid care corespund aceleiași valori ale energiei este egal cu:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = n^2 \quad (5.645)$$

Se obișnuiește să se noteze fiecare stare printr-un simbol care conține un coeficient egal cu numărul cuantic principal n și o literă care desemnează numărul cuantic azimutal ℓ . Astfel, de exemplu, starea cu $n = 1$ și $\ell = 0$ se notează cu $1s$, iar starea cu $n = 2$ și $\ell = 0$ se notează cu $2s$, $\ell = 1$ cu $2p$ etc.

Expresia (5.642) corespunzătoare valorilor energiei se poate scrie și sub forma:

$$W_n = -\frac{MZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} Mc^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2}, \quad (5.646)$$

unde

$$n = \ell + n_r + 1 = 1, 2, 3, \dots, \infty \quad (5.647)$$

și

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \quad (5.648)$$

este *constanta de structură fină*, utilizată ca *măsură a tăriei interacției electromagnetice*.

Ținând seama de cele prezentate mai sus rezultă:

$$R_{n\ell}(\rho) = C_{n\ell} \rho^\ell \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \sum_{\mu} a_{\mu} \rho^{\mu}. \quad (5.649)$$

Revenind la variabila

$$r = \frac{\rho r_0}{2} = \frac{\rho}{2\sqrt{-\lambda}} = \frac{na_0}{2Z} \rho \quad (5.650)$$

unde

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Me^2} \quad (5.651)$$

este *prima rază Bohr* și ținând seama că:

$$\Psi_n(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (5.652)$$

s-au obținut *vectorii proprii ai operatorului energie pentru atomii hidrogenoizi*. În tabelul 5. 6 sunt prezentați acești vectori proprii normați pentru stările cu $n = 1, 2$.

În cazul atomului de hidrogen ($Z = 1$) și în starea fundamentală ($n = 1$) vectorul propriu a operatorului energie are expresia:

$$\Psi_{100} = \left(1/\sqrt{\pi a_0^3}\right) \exp(-r/a_0), \quad (5.653)$$

iar densitatea de probabilitate de localizare a electronului în câmpul coulombian al nucleului atomului de hidrogen este dată de $|\Psi_{100}|^2 = (1/\pi a_0^3) \exp(-2r/a_0)$. Se observă că expresia (5.653) nu depinde de variabilele unghiulare θ și φ . Aceasta înseamnă că densitatea de probabilitate de localizare a electronului în atomul de hidrogen în starea fundamentală are o simetrie sferică, concluzie care nu apare în teoria lui Bohr deoarece acolo orbitele erau plane. Probabilitatea de a găsi electronul într-un strat de grosime dr la distanța r de nucleu este egală cu

$$d\mathcal{P} = |\Psi_{100}|^2 r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{4r^2}{a_0^3} \exp(-2r/a_0) dr \quad \text{care are un maxim pentru}$$

$$\frac{d\mathcal{P}}{dr} = \left(\frac{8r}{a_0^3} - \frac{8r^2}{a_0^4}\right) \exp(-2r/a_0) = 0 \quad \text{adică pentru } r = a_0 \text{ (prima rază Bohr).}$$

Tabel 5. 6.

Starea	ℓ	m	$\Psi_n(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$
1s	0	0	$(1/\sqrt{\pi})(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr/a_0)$
2s	0	0	$(1/4\sqrt{2\pi})(Z/a_0)^{3/2} (2 - Zr/a_0) \exp(-Zr/2a_0)$
		1	$(1/8\sqrt{\pi})(Z/a_0)^{3/2} Zr/a_0 \exp(-Zr/2a_0) \sin \theta e^{i\varphi}$

$2p$	1	0	$(1/4\sqrt{\pi})(Z/a_0)^{3/2} Zr/a_0 \exp(-Zr/2a_0) \cos \theta$
		-1	$(1/8\sqrt{\pi})(Z/a_0)^{3/2} Zr/a_0 \exp(-Zr/2a_0) \sin \theta e^{-i\varphi}$

În aceeași stare valoarea medie a energiei potențiale este egală cu:

$$\langle U \rangle = - \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi a_0^3} \exp(-2r/a_0) \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = - \frac{1}{\pi a_0^3} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} 4\pi \cdot 2 \frac{a_0^2}{8} = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = 2W_1,$$

rezultat obținut și în cadrul teoriei Bohr. În fig. 5. 48 sunt reprezentate nivelele energetice ale atomului de hidrogen (diagrama Grotrian). În cazul seriilor Lyman, Balmer și Paschen lungimile de undă corespunzătoare diferitelor tranziții sunt exprimate în Å, iar în cazul seriei Brackett acestea sunt în μm.

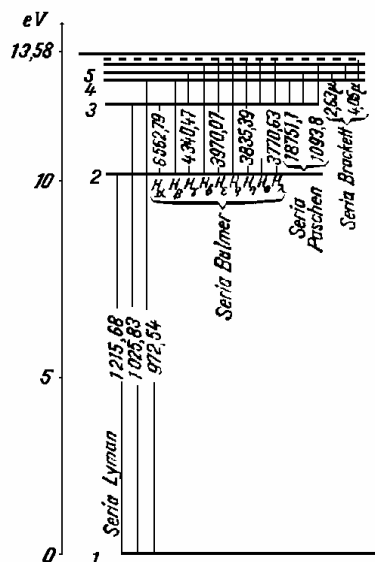


Fig. 5. 48. Diagrama nivelelor energetice ale atomului de hidrogen.

5.11. Atomul în câmp magnetic

5.11.1. Magnetorul Bohr-Procopiu

Pentru a studia influența unui câmp magnetic exterior asupra nivelurilor energetice ale atomilor trebuie calculat *momentul magnetic al atomului*. În electrodinamică momentul magnetic al curentului electric circular se exprimă cu ajutorul intensității curentului și a ariei suprafeței închisă de curent, S , adică momentul magnetic are modulul (direcția este perpendiculară pe suprafața traiectoriei iar sensul este dat de regula burghiului): $\mu = I \cdot S$. Intensitatea curentului creat de mișcarea electronului se evaluează cu relația:

$$I = \frac{e}{T} = \int \vec{J} \cdot d\vec{A} \text{ unde } \vec{J} \text{ este densitatea de curent electric creat de electron iar } |\vec{A}| \text{ este}$$

secțiunea transversală a volumului toroidal în care se află electronul în mișcarea sa. În mecanica cuantică, electronul este reprezentat printr-o distribuție spațială de sarcină electrică, pentru care se poate calcula densitatea de curent de probabilitate. Astfel, densitatea de curent se definește ca fiind produsul dintre sarcina electronului și densitatea de curent de probabilitate, adică:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2M} \left(\psi_{n\ell m}^* \nabla \psi_{n\ell m} - \psi_{n\ell m} \nabla \psi_{n\ell m}^* \right). \quad (5.654)$$

Întrucât în coordonate sferice expresia operatorului ∇ este:
 $\nabla = \vec{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{u}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{u}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$, componentele lui $\vec{J}$ în coordonate sferice sunt:

$$J_r = -\frac{i\hbar}{2M} \left(\psi_{n\ell m}^* \frac{\partial \psi_{n\ell m}}{\partial r} - \psi_{n\ell m} \frac{\partial \psi_{n\ell m}^*}{\partial r} \right) = 0, \quad (5.655)$$

deoarece $R_{nl}(r)$ este o funcție reală de r ,

$$J_\theta = -\frac{i\hbar}{2M} \left(\psi_{n\ell m}^* \frac{\partial \psi_{n\ell m}}{\partial \theta} - \psi_{n\ell m} \frac{\partial \psi_{n\ell m}^*}{\partial \theta} \right) = 0, \quad (5.656)$$

din același motiv. și anume că $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ este o funcție reală de θ ,

$$J_\varphi = -\frac{i\hbar}{2Mr \sin \theta} \left(\psi_{n\ell m}^* \frac{\partial \psi_{n\ell m}}{\partial \varphi} - \psi_{n\ell m} \frac{\partial \psi_{n\ell m}^*}{\partial \varphi} \right) = \frac{e\hbar m}{Mr \sin \theta} |\psi_{n\ell m}|^2, \quad (5.657)$$

deoarece

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi). \quad (5.658)$$

Relația (5.657) permite calculul momentului magnetic μ al atomului. În fig. 5. 49 este reprezentat un curent electric elementar de formă toroidală care parcurge cercul de latitudine θ la distanța r de centru.

Intensitatea curentului dI care traversează secțiunea transversală dA este dată de:

$$dI = J_\varphi dA \quad (5.659)$$

iar momentul magnetic al acestui curent elementar circular este exprimat prin relația:

$$d\mu_z = S dI = S J_\varphi dA, \quad (5.660)$$

unde S este aria suprafeței închisă de curentul electric, adică

$$S = \pi r^2 \sin^2 \theta. \quad (5.661)$$

Astfel,

$$d\mu_z = \pi r^2 \sin^2 \theta J_\varphi dA = \frac{\pi r^2 \sin^2 \theta}{Mr} \frac{e\hbar m}{\sin \theta} |\psi_{n\ell m}|^2 dA, \quad (5.662)$$

iar *momentul total* μ_z al curentului circular, produs de electron în mișcarea sa în jurul nucleului, se obține integrând relația (5.662):

$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2M} m \int |\psi_{n\ell m}|^2 2\pi r \sin \theta dA. \quad (5.663)$$

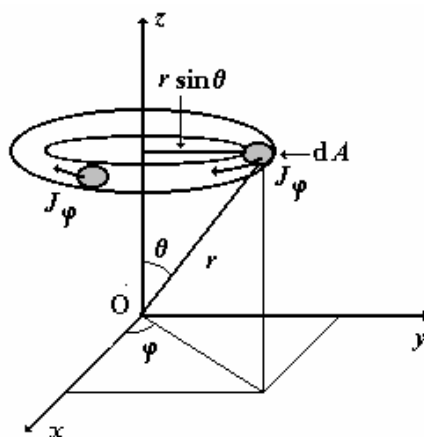


Fig. 5. 49. Curent electric elementar de formă toroidală.

Din fig. 5. 49 se observă că $2\pi r \sin \theta dA$ este volumul unui tub de formă toroidală, iar

$$\int |\psi_{n\ell m}|^2 dV = 1. \quad (5.664)$$

reprezintă condiția de normare pentru vectorii $\psi_{n\ell m}$.

Astfel,

$$\mu_z = m \frac{e\hbar}{2M} = m\mu_B \quad (5.655)$$

unde

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2M} \quad (5.666)$$

este *magnetronul Bohr-Procopiu* ($\mu_B = 9,2729 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$). Faptul că valorile proprii ale momentului magnetic, care are proiecția doar pe axa Oz sunt cuantificate de numărul cuantic $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$, justifică numele de număr cuantic magnetic a lui m .

Raportul dintre momentul magnetic μ_z și momentul cinetic $l_z = m\hbar$ se numește *raport magneto-mecanic* și este dat de relația:

$$\frac{\mu_z}{l_z} = \frac{\frac{e\hbar}{2M} m}{m\hbar} = \frac{e}{2M} (= 8,79447 \cdot 10^{10} \text{ C/kg}). \quad (5.667)$$

Extrapolând relația (5.667) la cazul când vectorii $\vec{\mu}$ și $\vec{l}$ au o direcție oarecare se poate scrie că:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2M} \vec{l}, \quad (5.668)$$

relație care se menține și între operatorii atașați acestor mărimi:

$$\hat{\vec{\mu}} = \frac{e}{2M} \hat{\vec{l}}. \quad (5.669)$$

16.2. Nivelele energetice ale unei particule încărcată electric aflată în câmp magnetic

Operatorul energie atașat unei particule de masă M încărcată cu sarcina q care se află într-un câmp electromagnetic are expresia:

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2M} \left(\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}} \right)^2 + qV \quad (5.670)$$

unde $\vec{A}$ reprezintă potențialul vector iar V este potențialul scalar al câmpului electromagnetic. În continuare se consideră cazul când $V = 0$ iar câmpul magnetic care are inducția $\vec{B} = B\vec{u}_z$ este descris de potențialul vector $\vec{A}$ de componente:

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0. \quad (5.671)$$

Într-adevăr,

$$B_x = 0, \quad B_y = 0, \quad B_z = -\frac{\partial A_x}{\partial y} = B. \quad (5.672)$$

Înlocuind relația (5.671) în (5.670) rezultă:

$$\begin{aligned} \hat{H}_B &= \frac{1}{2M} \left(\hat{\vec{p}} - q\hat{\vec{A}} \right)^2 = \frac{1}{2M} \left(\hat{p}^2 - q\vec{p}\hat{\vec{A}} - q\hat{\vec{A}}\vec{p} + q^2\hat{\vec{A}}^2 \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + 2\frac{iq\hbar}{2M} \vec{A}\nabla + \frac{q^2}{2M} \vec{A}^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 - \frac{iq\hbar}{M} By\vec{u}_x \nabla + \frac{q^2 B^2 y^2}{2M}, \end{aligned} \quad (5.673)$$

deoarece

$$\nabla \vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} = 0 \quad (5.674)$$

și

$$\nabla(\vec{A}\Psi) = \Psi\nabla\vec{A} + \vec{A}\nabla\Psi = \vec{A}\nabla\Psi. \quad (5.675)$$

Ecuția cu vectori și valori proprii pentru operatorul (5.673) este:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \Psi(x, y, z) - \frac{iq\hbar}{M} By\vec{u}_x \nabla \Psi(x, y, z) + \frac{q^2 B^2 y^2}{2M} \Psi(x, y, z) = W\Psi(x, y, z). \quad (5.676)$$

Soluția ecuației (5.676) este de forma:

$$\Psi(x, y, z) = C \exp\{i(\alpha x + \beta z)\} \phi(y), \quad (5.677)$$

unde C , α , β sunt constante. Înlocuind soluția (5.27) în ecuația (5.676) și simplificând cu $\exp\{i(\alpha x + \beta z)\}$ rezultă:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left(-\alpha^2 - \beta^2 + \frac{d^2}{dy^2} \right) \phi(y) - \frac{iq\hbar}{M} By(i\alpha)\phi(y) + \frac{q^2 B^2 y^2}{2M} \phi(y) = W\phi(y). \quad (5.678)$$

Făcând notațiile:

$$y' = y + \frac{\hbar\alpha}{q\beta}, \quad \frac{d^2}{dy'^2} = \frac{d^2}{dy^2}, \quad \omega_0 = \frac{qB}{M}, \quad \varepsilon = W - \frac{\hbar^2\beta^2}{2M}. \quad (5.679)$$

și înlocuindu-le în ecuația (5.678), se obține:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \phi}{dy'^2} + \frac{M\omega_0^2}{2} y'^2 \phi = \varepsilon \phi. \quad (5.680)$$

Ținând seama că (5.680) este ecuația cu vectori și valori proprii corespunzătoare oscilatorului armonic cuantificat, rezultă că nivelele energetice ε_n sunt cuantificate:

$$\varepsilon_n = W_n - \frac{\hbar^2 \beta^2}{2M} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0, \quad (5.681)$$

sau

$$W_n(\beta) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2M}. \quad (5.682)$$

Primul termen din relația (5.682) reprezintă energia mișcării din planul xOy , perpendicular pe direcția câmpului magnetic, iar ultimul termen reprezintă energia cinetică a mișcării de-a lungul axei Oz (de-a lungul inducției câmpului magnetic), adică:

$$W_n(0) = (2n+1) \hbar \frac{qB}{2M} = (2n+1) \mu_B \cdot B = \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{q}{2M} B l_z. \quad (5.683)$$

În general:

$$W_n(\beta) = \frac{q}{2M} B l_z + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2M}. \quad (5.684)$$

5.11.3. Efectul Zeeman normal

În cazul când particula încărcată electric este electronul unui atom aflat într-un câmp magnetic exterior ($q = -e$), operatorul energie are expresia:

$$\hat{H}_B = \hat{H} - \frac{e}{2M} B \hat{l}_z \quad (5.685)$$

unde $\hat{H}$ este operatorul în lipsa câmpului magnetic exterior. Ecuația Schrödinger în acest caz se scrie sub forma:

$$\left(\hat{H} - \frac{e}{2M} B \hat{l}_z\right) \Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = \left(W_n - \frac{e\hbar}{2M} mB\right) \Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = W_n^B \Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi), \quad (5.686)$$

adică:

$$W_n^B = W_n - \frac{e\hbar}{2M} mB = -\frac{1}{2} M c^2 \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2} - \frac{e\hbar}{2M} mB. \quad (5.687)$$

Din relația (5.687) se observă că în prezența unui câmp magnetic exterior nivelul de energie definit prin numărul cuantic principal n se despică în $(2\ell + 1)$ subnivele (numărul valorilor diferite ale lui m , pentru un ℓ dat). Ecartul energetic dintre două subnivele este:

$$\Delta W = \frac{e\hbar}{2M} B. \quad (5.688)$$

și depinde de inducția câmpului magnetic B și nu depinde de n și ℓ . Această despicare a unui nivel energetic în subnivele în prezența unui câmp magnetic se numește *efect Zeeman normal*. Efectul duce la ridicarea degenerării, astfel că fiecărei stări (fiecărui vector de stare) îi corespunde o altă valoare a energiei (un subnivel). Acest efect nu explică toate cazurile experimentale cunoscute de despicare a nivelelor energetice în câmp magnetic. Pentru explicarea acestora este necesară introducerea unei noi proprietăți a electronului, cunoscută sub numele de *spin*.

5.11.4. Spinul electronului

Numerele cuantice introduse până în prezent permit explicarea liniilor spectrale ale atomilor, fără a da o explicație și *structurii fine* a acestor linii. Din experiență se știe, de exemplu, că *linia D (linia galbenă) a sodiului este un dublet* a cărui componente sunt

separate printr-un interval de $6 \text{ \AA}$ (cele două linii au lungimile de undă de 588,9953 nm și respectiv 589,5930 nm. Toate metalele alcaline au linii cu structură de dublet. Pentru a ieși din impasul imposibilității explicării teoretice a existenței dubleților, W. Pauli a formulat, într-un mod prudent și confuz, o nouă ipoteză conform căreia *structura de dubleți a spectrelor metalelor alcaline este rezultatul naturii duale a proprietăților cuantice ale electronului, care nu pot fi interpretate clasic*. În realitate ipoteza lui Pauli se reduce la descrierea stării electronului cu ajutorul introducerii formale a unui nou număr cuantic suplimentar, descriind comportarea electronului prin patru numere cuantice în loc de trei, ceea ce permite ridicarea degenerării. În dezvoltarea acestei idei în pas important a fost făcut de fizicienii olandezi J. Uehlenbeck și S. Goudsmit, care au înlocuit formularea confuză de *natură duală* printr-o reprezentare a rotației electronului în jurul propriei sale axe, numită mișcare de *spin* (de la *to spin* care înseamnă *a se roti* în limba engleză). În acest mod se atribuie și mișcării de spin un moment cinetic notat cu $\vec{S}$, ale cărui valori sunt cuantificate, adică:

$$S = s\hbar, \quad (5.689)$$

unde s este *numărul cuantic de spin*. Modulul momentului cinetic de spin total are valoarea:

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar, \quad (5.690)$$

conform regulii găsită pentru momentul cinetic orbital. Vectorul moment cinetic de spin are o singură direcție, cea a axei de rotație, dar două sensuri posibile, după sensul de rotație. Deci, momentul cinetic de spin total coincide cu proiecția sa pe axa Oz . Dacă numărul proiecțiilor posibile pe axa Oz este egal cu 2 se poate scrie că: $2s+1=2$, de unde $s = \frac{1}{2}$, iar proiecțiile pe axa Oz (axa de rotație proprie) ale momentului cinetic de spin sunt: $+\frac{1}{2}\hbar$ și $-\frac{1}{2}\hbar$. Electronul în mișcarea sa de spin reprezintă un curent electronic circular căruia îi corespunde un *moment magnetic de spin* μ_s .

Folosind relația dintre momentul cinetic și cel magnetic, găsită în cazul mișcării orbitale, rezultă că ar trebui ca momentul magnetic de spin să fie egal cu $\frac{1}{2}\mu_B$, dar toate datele experimentale arată că momentul magnetic de spin este egal cu un magneton Bohr-Procopiu μ_B . Rezultă că în cazul spinului relația dintre cele două momente magnetic și cinetic este: $\mu_s = 2(e\hbar)/2M = 2\mu_B$. Deci raportul giromagnetic (mecano-magnetic) pentru spin este egal cu dublul raportului pentru momentele orbitale. Ipoteza electronului în rotație în jurul axei proprii explică dubleții din seriile spectrale ale atomilor alcalini, dar nu explică toate fenomenele cunoscute azi. Această ipoteză este acceptată pentru simplitatea sa și deoarece permite crearea unui model simplu al electronului din atom, cu ajutorul căruia se pot explica unele fenomene.

Momentul cinetic total al electronului și structura de multiplu spectrelor de energie.

Din cele prezentate până acum reiese că momentele cinetice orbital $\vec{l}$ și cel de spin $\vec{s}$ nu exprimă nici unul întregul moment cinetic al unei particule. Se introduce o nouă observabilă, *momentul cinetic total* $\vec{j}$, care descrie atât mișcarea orbitală cât și pe cea de spin a electronului. Operatorul moment cinetic total are expresia:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}. \quad (5.691)$$

Ca și în cazul componentelor lui $\hat{\mathbf{l}}$ și $\hat{\mathbf{s}}$, între componentele lui $\hat{\mathbf{j}}$ există următoarele relații de comutare:

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hbar\hat{j}_z, [\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hbar\hat{j}_x, [\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hbar\hat{j}_y. \quad (5.692)$$

În plus

$$\hat{J}^2 = (\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}})^2 = \hat{l}^2 + \hat{s}^2 + 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}, \quad (5.693)$$

și

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_x] = [\hat{j}^2, \hat{j}_y] = [\hat{j}^2, \hat{j}_z] = 0. \quad (5.694)$$

Pentru a găsi valorile proprii ale operatorilor $\hat{j}^2$ și $\hat{j}_z$ se scriu ecuațiile cu valori și vectori proprii:

$$\hat{j}^2\Psi = \beta_j^2\hbar^2\Psi \quad (5.695)$$

$$\hat{j}_z\Psi = m_j\hbar\Psi \quad (5.696)$$

și se compară cu ecuațiile corespunzătoare momentului cinetic orbital. Pe baza celor prezentate mai sus rezultă:

$$\beta_j^2 = j(j+1) \quad (5.697)$$

unde

$$j = \ell \pm s, \quad (5.698)$$

adică

$$\left| \ell - \frac{1}{2} \right| \leq j \leq \ell + \frac{1}{2}, \quad (5.6999)$$

deoarece

$$s = \frac{1}{2}, \quad (5.700)$$

iar

$$m_j = m \pm \frac{1}{2} = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j. \quad (5.701)$$

Ținându-se seama de existența spinului electronului, fiecare din stările energetice ale electronului supus acțiunii unui câmp de forțe central, descrisă de vectorii de stare

$\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)$ este, de fapt, o stare dublă, spinul având două orientări: $s_z = \pm \frac{1}{2}\hbar$. Dacă se ține cont de spin, vectorul de stare al electronului devine:

$$\Psi_{n\ell m m_s}(r, \theta, \varphi, s) = \Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) \cdot S_{m_s}(s), \quad (5.702)$$

nivelele energetice fiind $W_{n\ell}$, iar cele patru numere luând valorile:

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.703)$$

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1, \quad (5.704)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell, \quad (5.705)$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (5.706)$$

Pentru fiecare nivel energetic $W_{n\ell}$ există $(2\ell+1)$ stări care se deosebesc prin orientarea momentului cinetic orbital, fiecare stare descompunându-se, la rândul său, în două stări care se deosebesc prin orientarea spinului. Astfel, fiecărui nivel energetic îi corespund $2(2\ell+1)$ stări, ceea ce corespunde unei degenerări de ordinul $2(2\ell+1)$.

5.12. Atomul cu mai mulți electroni

5.12.1. Descrierea sistemelor fizice de particule identice

Prin definiție, *particulele identice* nu se pot distinge între ele prin nici una din proprietățile lor intrinseci. În mecanica clasică, particulele identice nu-și pierd individualitatea, deși proprietățile lor fizice sunt identice. Astfel, descrierea mișcării particulelor identice în mecanica clasică, se face prin specificarea traiectoriilor particulelor individuale. În cazul clasic, particulele pot fi *numerotate* și astfel se poate urmări mișcarea particulară a fiecărei particule. Orice permutare a particulelor conduce tot la o soluție a ecuației mișcării, datorită naturii identice a particulelor, soluția respectivă corespunzând unor condiții inițiale. În teoria cuantică comportarea sistemului cu multe particule identice este descrisă de un vector de stare, care depinde de variabilele dinamice ale tuturor particulelor. În principiu, nu există nici o posibilitate de a urmări comportarea individuală a fiecărei particule. Particulele identice își pierd individualitatea, adică devin *indiscernabile*.

Pentru simplitate, se consideră un *sistem format din două particule identice* a și b a căror comportare este descrisă de *două mulțimi complete de variabile* q^a și q^b . Stările *individuale* posibile ale celor două particule sunt:

$$\Psi_\alpha(q^a), \Psi_\beta(q^a), \dots, \Psi_\omega(q^a), \quad (5.707)$$

și

$$\Psi_\alpha(q^b), \Psi_\beta(q^b), \dots, \Psi_\omega(q^b). \quad (5.708)$$

Datorită indiscernabilității particulelor toate *observabilele fizice sunt simetrice* față de variabilele celor două particule, adică:

$$\hat{A}(q^a, q^b) = \hat{A}(q^b, q^a). \quad (5.709)$$

Relația (5.707) este adevărată și pentru operatorul energie, adică:

$$\hat{H}(q^a, q^b) = \hat{H}(q^b, q^a). \quad (5.710)$$

Produsele între vectorii de stare din mulțimile (5.707) și (5.708), cum ar fi:

$$\Psi_\alpha(q^a)\Psi_\alpha(q^b), \Psi_\alpha(q^a)\Psi_\beta(q^b), \Psi_\beta(q^a)\Psi_\alpha(q^b), \dots, \Psi_\rho(q^a)\Psi_\sigma(q^b), \Psi_\sigma(q^a)\Psi_\rho(q^b), \dots, \quad (5.711)$$

reprezintă tot *stări proprii ale sistemului*. Astfel, de exemplu $\Psi_\rho(q^a)\Psi_\sigma(q^b)$ ne indică faptul că particula a se află în starea ρ și particula b în starea σ , iar produsul $\Psi_\sigma(q^a)\Psi_\rho(q^b)$ indică faptul că particula a se află în starea σ și particula b în starea ρ .

Dar cele două particule fiind identice stările descrise de produsele $\Psi_\sigma(q^a)\Psi_\rho(q^b)$ și $\Psi_\rho(q^a)\Psi_\sigma(q^b)$ sunt indiscernabile, fiind descrise prin același vector de stare în spațiul Hilbert. Deci, *starea generală a sistemului de două particule identice* este reprezentată printr-o *suprapunere de stări* (5.711), adică:

$$\Psi(q^a, q^b) = \sum_{\rho, \sigma=\alpha}^{\omega} C_{\rho\sigma} \Psi_\rho(q^a) \Psi_\sigma(q^b) \quad (5.712)$$

unde $|C_{\rho\sigma}|^2$ este probabilitatea de existență a particulei a în starea ρ simultan cu particula b , care ocupă starea σ . Probabilitatea de existență a particulei a în starea ρ indiferent de starea ocupată de particula b este egală cu: $\sum_{\sigma=\alpha}^{\omega} |C_{\rho\sigma}|^2$. Permutând particulele între ele, adică făcând schimbarea $q^a \leftrightarrow q^b$, vectorul de stare este: $\Psi(q^b, q^a) = \sum_{\rho, \sigma=\alpha}^{\omega} C_{\sigma\rho} \Psi_{\sigma}(q^a) \Psi_{\rho}(q^b)$. În acest caz probabilitatea ca particula a să se afle în starea σ când particula b se află în starea ρ este $|C_{\sigma\rho}|^2$. Dar, datorită indiscernabilității particulelor

$$|C_{\rho\sigma}|^2 = |C_{\sigma\rho}|^2. \quad (5.713)$$

Condiția (5.713) este satisfăcută în următoarele cazuri: $\Psi(q^a, q^b) = \Psi(q^b, q^a)$, adică *vectorul de stare este simetric* în q^a și q^b , ceea ce implică $C_{\rho\sigma} = C_{\sigma\rho}$ și $\Psi(q^a, q^b) = -\Psi(q^b, q^a)$, ceea ce implică $C_{\sigma\rho} = -C_{\rho\sigma}$, adică *vectorul de stare este antisimetric* în q^a și q^b . Matematic, permutarea particulelor a și b este echivalentă cu aplicarea unui *operator de permutare* $\hat{P}$ vectorului de stare, adică: $\hat{P}\Psi(q^b, q^a) = p\Psi(q^a, q^b)$. Din cele două cazuri prezentate mai sus rezultă că $p = \pm 1$, adică valorile proprii ale operatorului $\hat{P}$.

Dacă la $t = 0$ vectorul de stare Ψ corespunde uneia din valorile proprii $p = \pm 1$, această situație rămâne constantă în timp, adică:

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{P}] = 0 \quad (5.714)$$

unde

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{H}\Psi &= \hat{P}\{\hat{H}(q^a, q^b)\Psi(q^a, q^b)\} = \hat{H}(q^b, q^a)\Psi(q^b, q^a) \\ &= \hat{H}(q^a, q^b)\hat{P}\Psi(q^a, q^b) = \hat{H}\hat{P}\Psi, \end{aligned} \quad (5.715)$$

sau

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0. \quad (5.716)$$

Din (5.714) rezultă că $\hat{P}$ este o constantă a mișcării, adică valorile proprii p nu se modifică în decursul evoluției temporale a sistemului.

5.12.2. Postulatul mecanicii cuantice referitor la sistemele fizice formate din particule identice

Postulatul 7. Al șaptelea postulat al mecanicii cuantice, care se referă la un sistem fizic cuantic format dintr-un număr foarte mare de particule se enunță în modul următor: *pentru orice sistem fizic cuantic de particule identice sunt realizabili numai acei vectori de stare care sunt fiecare complet simetric sau complet antisimetric în raport cu toate variabilele particulelor.*

Conform acestui postulat, în fizica cuantică varietatea soluțiilor posibile pentru sistemele de particule identice este mai limitată decât în fizica clasică. *Nu se poate realiza suprapunerea soluțiilor simetrice cu cele antisimetrice.*

Astfel, proprietățile sistemelor de particule identice depind de caracterul vectorilor de stare de a fi simetrice sau antisimetrice la operația de permutare. Operatorul permutare $\hat{P}$ nu are nici o semnificație fizică pentru sistemele formate dintr-o singură particulă.

5.12.3. Particule pentru care vectorul de stare este antisimetric (fermionii)

Din cele prezentate mai sus rezultă că o stare antisimetrică a unui sistem format din două particule este descrisă de un vector de stare de tipul:

$$\Psi_{\rho\sigma}^A(q^a, q^b) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{\rho}(q^a) \Psi_{\sigma}(q^b) - \Psi_{\sigma}(q^a) \Psi_{\rho}(q^b) \}, \quad (5.717)$$

unde $\rho, \sigma = \alpha, \beta, \dots, \omega$. Vectorul de stare (5.17) descrie starea în care una din particule se află în starea ρ , iar cealaltă în starea σ , fără a putea preciza care din particulele a sau b se află în starea ρ sau în starea σ , adică probabilitatea de apariție a stării sistemului în care particula a se află în starea ρ , și particula b în starea σ este egală cu probabilitatea de apariție a stării sistemului în care particula b se află în starea ρ și particula a în starea σ . O stare generală antisimetrică a unui sistem de două particule a și b care se află în una din stările $\alpha, \beta, \dots, \omega$ este o combinație liniară a mulțimii de stări (5.17) liniar independente, adică:

$$\Psi^A(q^a, q^b) = \sum_{\rho, \sigma=\alpha}^{\omega} C_{\rho\sigma} \Psi_{\rho\sigma}^A(q^a, q^b). \quad (5.718)$$

Dacă se face permutarea $q^a \leftrightarrow q^b$, rezultă:

$$\Psi^A(q^b, q^a) = -\Psi^A(q^a, q^b). \quad (5.719)$$

Din (5.717) se observă că $\Psi_{\rho\sigma}^A = 0$, dacă $\rho = \sigma$, adică: *în cazul când un sistem de particule identice este descris de vectori de stare antisimetrice, fiecare stare individuală poate fi ocupată de cel mult o particulă (principiul de excluziune Pauli).*

Dacă un sistem de fermioni conține f particule $a, b, c, \dots, r$, fiecare putând să se afle în una din stările liniar independente $\alpha, \beta, \dots, \omega$, atunci o stare antisimetrică particulară a sistemului este descrisă de funcția:

$$\Psi_{\alpha, \beta, \dots, \omega}(q^a, q^b, \dots, q^r) = \frac{1}{\sqrt{f!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\alpha}(q^a) & \Psi_{\beta}(q^a) & \dots & \Psi_{\omega}(q^a) \\ \Psi_{\alpha}(q^b) & \Psi_{\beta}(q^b) & \dots & \Psi_{\omega}(q^b) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_{\alpha}(q^r) & \Psi_{\beta}(q^r) & \dots & \Psi_{\omega}(q^r) \end{vmatrix}. \quad (5.720)$$

Determinantul (5.720) este antisimetric.

17.2.2. Particule pentru care vectorul de stare este simetric (bosonii)

O mulțime completă a stărilor unui sistem format din două particule pentru care vectorul de stare este simetric este descrisă de:

$$\Psi_{\rho\sigma}^S(q^b, q^a) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{\rho}(q^a) \Psi_{\sigma}(q^b) + \Psi_{\sigma}(q^a) \Psi_{\rho}(q^b) \}, \quad (5.721)$$

unde $\rho, \sigma = \alpha, \beta, \dots, \omega$. Se observă că fiecare stare este ocupată de una din particule fără a ști care particulă în care stare se află. Dacă se face permutarea $q^a \leftrightarrow q^b$ rezultă:

$$\Psi^S(q^a, q^b) = \Psi^S(q^b, q^a), \quad (5.722)$$

adică este posibil ca două particule să ocupe aceeași stare în același timp. Deci, în cazul sistemelor de particule identice descrise de vectori de stare simetrici nu acționează nici un principiu de excluziune.

Dacă *sistemul de bosoni conține f particule $a, b, c, \dots, r$* , fiecare putând să se afle în una din *stările liniar independente $\alpha, \beta, \dots, \omega$* , atunci o *stare simetrică particulară a sistemului* este descrisă de funcția:

$$\Psi_{\alpha, \beta, \dots, \omega}(q^a, q^b, \dots, q^r) = \frac{\sum_p \Psi_{\alpha}(q^a) \Psi_{\beta}(q^b) \dots \Psi_{\omega}(q^r)}{\sqrt{f! N_1! N_2! \dots N_k!}}, \quad (5.723)$$

unde p reprezintă permutarea, iar $N_1, N_2, \dots, N_k$ sunt *numerele de ocupare ale stărilor neidentice* ($N_1 + N_2 + \dots + N_k = f$).

5.12.5. Statisticile cuantice

Se consideră N *particule indiscernabile și identice*. Pentru a găsi repartitia particulelor pe nivelele de energie se consideră că *energia totală a sistemului*

$$W = \sum_i N_i \varepsilon_i \quad (5.724)$$

rămâne constantă în timp la fel ca și numărul total de particule

$$N = \sum_i N_i \quad (5.725)$$

în absența fenomenelor de creere și anihilare de particule. În plus nivelele energetice ε_i ale particulelor sunt discrete. Este posibil ca g_i stări să aibă aceeași valoare a energiei. În acest caz g_i se numește *factor de degenerare* sau *pondere statistică a nivelului i* . Conform relației de incertitudine Heisenberg nu este posibil să se localizeze o particulă într-un volum mai mic decât $\hbar^3$. Împărțind spațiul fazelor în celule de volum $\delta \approx \hbar^3$, în fiecare celulă se poate afla o singură particulă a cărei stare este determinată de celula respectivă. Unei stări macroscopice îi corespund mai multe stări microscopice care diferă prin repartitia particulelor în celulele elementare din spațiul fazelor. *Se postulează că toate stările microscopice au o probabilitate de realizare egală*. De asemenea, *se postulează că starea de echilibru termodinamic este starea macroscopică cea mai probabilă, adică cea care se realizează prin numărul maxim de stări microscopice*.

În cazul fermionilor este necesar să se respecte principiul de excluziune Pauli.

Statistica cuantică Bose-Einstein. Pentru a calcula numărul de posibilități de a repartiza N particule indiscernabile pe nivelele de energie $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_i, \dots$ cu degenerescențele $g_1, g_2, \dots, g_i, \dots$, adică probabilitatea P_{BE} de a găsi N_1 particule pe nivelul de energie ε_1 , N_2 particule pe nivelul de energie ε_2 etc, se consideră că nivelul ε_i poate fi reprezentat printr-o cutie (fig. 5. 50) divizată în g_i compartimente. Numărul de pereți

interni este $g_i - 1$. Plecând de la o anumită repartiție se poate obține o altă repartiție permutând cele N_i particule și cei $(g_i - 1)$ pereți, obținându-se $(N_i + g_i - 1)$ permutări. Dar, când se permută două particule aflate în aceeași stare ($N_i!$) sau două compartimente $[(g_i - 1)!]$ repartiția inițială rămâne neschimbată.

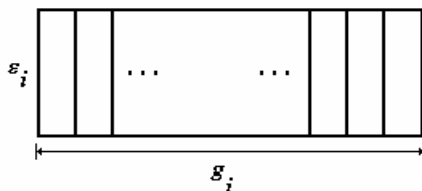


Fig. 5. 50. Reprezentarea schematică a nivelului energetic ε_i cu degenerescența g_i .

Deci, numărul de permutări posibile este egal cu:

$$P_{BE} = \prod_i \frac{(N_i + g_i - 1)!}{N_i! (g_i - 1)!} \approx \prod_i \frac{(N_i + g_i)!}{N_i! g_i!}. \quad (5.726)$$

Pentru a calcula valorile de echilibru ale numerelor de ocupare a stărilor N_i , adică N_i^0 pentru care probabilitatea P_{BE} este maximă trebuie calculat maximul funcției P_{BE} . Deoarece numărul de particule N_i și degenerescențele g_i sunt presupuse mari se poate utiliza formula lui Stirling:

$$\ln x! \approx x \ln x - x. \quad (5.727)$$

Astfel,

$$d(\ln P_{BE}) = \sum_i d\{\ln[(N_i + g_i)!]\} - \sum_i d\{\ln[N_i!]\} - \sum_i d\{\ln[g_i!]\} = \sum_i \ln \frac{N_i + g_i}{N_i} dN_i = 0 \quad (5.728)$$

deoarece valorile g_i sunt constante. Variațiile dN_i nu sunt independente, deoarece din relațiile (5.724) și (5.725) rezultă constrângerile:

$$\sum_i dN_i = 0 \quad (5.729)$$

$$\sum_i \varepsilon_i dN_i = 0 \quad (5.730)$$

deoarece N și W sunt constante. Pentru a rezolva ecuația (5.728) cu constrângerile (5.729) și (5.730) se introduc multiplicatorii Lagrange λ_1 și λ_2 pentru cele două constrângeri, adică:

$$\sum_i \left(\ln \frac{N_i + g_i}{N_i} + \lambda_1 + \lambda_2 \varepsilon_i \right) dN_i = 0. \quad (5.731)$$

Întrucât dN_i sunt arbitrari, rezultă că:

$$\ln \frac{N_i + g_i}{N_i} = -\lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_i \quad (5.732)$$

sau

$$N_i^0 = \frac{g_i}{\exp(-\lambda_1) \exp(-\lambda_2 \varepsilon_i) - 1}. \quad (5.733)$$

Introducând notațiile

$$B = \exp(-\lambda_1) \quad \text{și} \quad \lambda_2 = -\beta \quad (5.734)$$

relația (5.33) devine:

$$N_i^0 = \frac{g_i}{B \exp(\beta \varepsilon_i) - 1}. \quad (5.735)$$

Din punct de vedere fizic, particulele sunt mai numeroase pe nivelele de energie mai coborâte, astfel că $\beta > 0$. Impunând condiția ca

$$\sum_i N_i^0 = N = \text{constant} \quad (5.736)$$

rezultă că $B = 1$, deci

$$N_i^0 = \frac{g_i}{\exp(\beta \varepsilon_i) - 1}. \quad (5.737)$$

Înlocuind relația (5.737) în

$$d(\ln P_{BE}) = \sum_i \ln \frac{N_i^0 + g_i}{N_i^0} dN_i \quad (5.738)$$

rezultă:

$$d(\ln P_{BE}) = \sum_i \ln \left(1 + \frac{g_i}{N_i^0} \right) dN_i = \sum_i \ln(1 + \exp(\beta \varepsilon_i) - 1) dN_i = \beta \sum_i \varepsilon_i dN_i. \quad (5.739)$$

Scriind relația Boltzmann care leagă entropia sistemului macroscopic de probabilitatea de apariție a stărilor microscopice:

$$dS = k d(\ln P_{BE}) = k\beta \sum_i \varepsilon_i dN_i = k\beta dQ = \frac{dQ}{T} \quad (5.740)$$

după identificare rezultă:

$$\beta = \frac{1}{kT}. \quad (5.741)$$

Ținând seama de relația (5.41) numerele de ocupare ale stărilor la echilibru sunt

$$(N_i)_{BE}^0 = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i}{kT}\right) - 1}. \quad (5.742)$$

În cazul sistemelor deschise, care schimbă particule cu exteriorul în locul lui ε_i se introduce $(\varepsilon_i - \mu)$ unde μ este potențialul chimic, iar relația (5.742) devine:

$$(N_i)_{BE}^0 = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T}\right) - 1}. \quad (5.743)$$

Relația (5.743) s-a obținut în cadrul distribuției macrocanonice ca un caz particular.

Statistica cuantică Fermi-Dirac. În cadrul statisticii Fermi-Dirac, datorită principiului de excluziune al lui Pauli, în fiecare stare cuantică se pot găsi 0 sau 1 particulă. Deci:

$$N_i \ll g_i. \quad (5.744)$$

În consecință trebuie repartizate N_i particule indiscernabile pe g_i subnivele, ținând cont că nu se poate așeza mai mult de o particulă pe un subnivel (stare). Pornind de la o repartiziție arbitrară a celor N_i particule în cele g_i stări, care sunt fie ocupate, fie vide,

se poate obține o nouă repartiție permutând locurile vide cu cele ocupate, adică efectuând $g_i!$ permutări. Dar, dacă se permută două locuri ocupate între ele, nu se obține o nouă repartiție. De aceea trebuie ca $g_i!$ să fie împărțit la numărul de permutări care nu conduc la o nouă stare, adică:

$$P_{FD}^i = \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} = C_{g_i}^{N_i}. \quad (5.745)$$

Numărul de posibilități de a repartiza cele N particule indiscernabile pe nivelele de energie $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_i, \dots$ care au gradele de degenerare $g_1, g_2, \dots, g_i, \dots$ așezând câte $N_1, N_2, \dots, N_i, \dots$ particule pe aceste subnivele, este egal cu:

$$P_{FD} = \prod_i P_{FD}^i = \prod_i \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \quad (5.746)$$

Ca și în cazul statisticii cuantice Bose-Einstein se pune condiția ca: $d(\ln P_{FD}) = -\sum_i \ln N_i dN_i + \sum_i \ln(g_i - N_i) dN_i = \sum_i \ln \frac{g_i - N_i}{N_i} dN_i = 0$ și după introducerea multiplicatorilor Lagrange rezultă condiția: $\ln \frac{g_i - N_i}{N_i} = -\lambda_1 - \lambda_2 \varepsilon_i$ sau

$$N_i^0 = \frac{g_i}{B \exp(\beta \varepsilon_i) + 1}. \quad (5.747)$$

Din condiția ca $\sum_i N_i^0 = N$ rezultă că $B = 1$ și asemănător ca în cazul distribuției Bose-Einstein $\beta = \frac{1}{kT}$. Ținând seama de relația (5.747) numerele de ocupare ale stărilor la echilibru sunt

$$(N_i)_{FD}^0 = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i}{kT}\right) + 1}. \quad (5.748)$$

În cazul sistemelor deschise, ε_i se înlocuiește cu $(\varepsilon_i - \mu)$ unde μ este potențialul chimic, iar relația (5.52) devine:

$$(N_i)_{FD}^0 = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (5.749)$$

Relația (5.749) s-a obținut ca un caz particular al distribuției macrocanonice. Se observă că în cazul când densitatea de populație, adică numărul mediu de particule pe un subnivel, $\frac{N_i}{g_i}$ este mic, trebuie ca: $\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right) \pm 1 \gg 1$ sau $\exp\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right) \gg 1$, adică se poate neglija 1 în raport cu valoarea exponențială și cele două statistici au o limită comună: $N_i^0 \approx \frac{g_i}{B} \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}\right)$ unde B rezultă din condiția ca $\sum_i N_i^0 = N$.

Se obține repartiția Maxwell-Boltzmann:

$$(N_i)_{MB}^0 = \frac{N}{Z} g_i \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}\right) \quad (5.750)$$

unde funcția de partiție Z are expresia: $Z = \sum_i g_i \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_i}{kT}\right)$.

5.12.8. Modelul vectorial al atomului

Cele patru numere cuantice și principiul de excluziune Pauli. Într-un atom, stările unui electron se caracterizează prin cele patru numere cuantice:

- n , numărul cuantic principal, care cuantifică energia;
- ℓ , numărul cuantic orbital, care cuantifică momentul cinetic orbital;
- m , numărul cuantic magnetic, care cuantifică componenta momentului cinetic orbital pe axa de cuantificare;
- s , numărul cuantic de spin, care cuantifică momentul cinetic de spin.

Principiul de excluziune Pauli, care este o consecință a indiscernabilității electronilor, afirmă că într-un atom vectorii de stare ai electronilor individuali trebuie să fie toți diferiți, adică doi electroni dintr-un atom nu pot avea valori identice pentru toate cele patru numere cuantice: n , ℓ , m și m_s . Acest principiu are următoarele consecințe importante în fizica atomului:

a) permite stabilirea numărului maxim de electroni dintr-un atom care pot avea aceeași energie;

b) dă posibilitatea evaluării ordinului de degenerare al unei configurații. O anumită configurație ne precizează pentru fiecare electron numerele cuantice n și ℓ . Introducând și numerele cuantice m și s apare o degenerare, care poate fi ridicată ținând cont de corecțiile energetice cu diferite aproximații. În prima aproximație se presupune că electronii din atom nu interacționează între ei și că se găsesc în câmpul electrostatic al nucleului. Operatorul energie în acest caz este dat de expresia:

$$\hat{H}_0 = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_i + \hat{U}(r_i) \right] \quad (5.751)$$

unde

$$U(r_i) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i}. \quad (5.752)$$

În următoarea aproximație se ține cont de interacția electrostatică dintre electroni, introducând termenul $\hat{W}_{es}$ și de interacția spin-orbită, dintre momentul magnetic de spin și câmpul magnetic creat de mișcarea orbitală a electronului, introducând termenul $\hat{W}_{so}$, astfel că operatorul energie devine:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}_{es} + \hat{W}_{so} \quad (5.753)$$

unde

$$\hat{W}_{es} = \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}. \quad (5.754)$$

Electronii dintr-un atom care au aceeași valoare a numărului cuantic n formează o *pătură electronică*, iar electronii (stările electronice) dintr-un atom care au aceeași valoare pentru numerele cuantice n și ℓ formează o *subpătură*. Momentul cinetic total al electronilor dintr-un atom care formează o subpătură completă este nul. Într-adevăr, dacă n și ℓ au aceleași valori atunci stările electronilor din subpătură se disting prin valorile lui

m și s . Valorile lui m variază între $-\ell$ și $+\ell$, iar $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Atunci, momentul cinetic total al electronilor subpăturii este egal cu:

$$j = \hbar \sum_{m=-\ell}^{m=\ell} m + \hbar \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{m_s=\frac{1}{2}} s. \quad (5.755)$$

Astfel, stările electronilor unei subpături complete au o simetrie sferică. Acest rezultat permite simplificarea studiului momentului cinetic total al unui atom în sensul că trebuie compuse doar momentele cinetice ale electronilor din subpăturile incomplete, care, în general este ultima subpătură. Un caz particular este cel al lantanidelor care au o subpătură internă incompletă, caz în care studiul nivelelor energetice și ale stărilor electronilor din atom este mai dificil.

Exemple. Configurația sodiului este următoarea: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. Pe ultima subpătură, incompletă, se află electronul $3s$, care are momentul cinetic orbital $\ell = 0$ și $j = s = \frac{1}{2} \hbar$.

Celelalte subpături fiind complete, momentul cinetic total al atomului este $j = \frac{1}{2} \hbar$.

Gadoliniul este un atom complex din grupa lantanidelor, care are două subpături incomplete, pentru $n = 4$ și $\ell = 3$ și respectiv $n = 5$ și $\ell = 2$. Momentul cinetic total se obține prin compunerea momentelor cinetice ale celor două subpături cu momentul cinetic al subpăturii exterioare.

5.12.8. Interacția spin-orbită

Cazul unui electron pe ultima subpătură incompletă. Se consideră electronul, cu sarcina $q = -e$, în mișcarea de spin în potențialul electrostatic al mișcării orbitale:

$$V(r) = \frac{U(r)}{q} = \frac{U(r)}{e} \quad (5.756)$$

unde $U(r)$ este energia electrostatică corespunzătoare mișcării orbitale. Într-un referențial exterior atomului, (referențialul laboratorului) acestui potențial electric îi corespunde câmpul electric de intensitate:

$$E = -\text{grad}V(r). \quad (5.757)$$

Dar, în referențialul legat de electron, apare, conform legilor electromagnetismului relativist și un câmp magnetic de inducție $\vec{B}$:

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}. \quad (5.758)$$

Energia de interacție spin-orbită, W_{so} , rezultă din interacția dintre inducția câmpului magnetic $\vec{B}$ și momentul magnetic de spin:

$$\vec{\mu}_s = \frac{e}{2M} \vec{l}_s = \frac{e}{2M} \hbar \vec{s} = \mu_B \vec{s} \quad (5.759)$$

adică

$$\begin{aligned}
 W_{so} &= -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = -\mu_B \vec{s} \cdot \left(-\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E} \right) = \frac{e\hbar}{2M} \vec{s} \cdot \frac{1}{c^2} \vec{v} \times [-\text{grad}V(r)] \\
 &= -\frac{e\hbar}{2Mc^2} \vec{s} \cdot \vec{v} \times \frac{dU}{dr} \frac{\vec{r}}{r} = \frac{\hbar}{2M^2rc^2} \vec{s} \cdot \frac{dU}{dr} \vec{r} \times M\vec{v} = \frac{\hbar^2}{2M^2rc^2} \frac{dU}{dr} \vec{s} \cdot \vec{l}. \quad (5.760)
 \end{aligned}$$

În relația (5.760) vectorii $\vec{s}$ și $\vec{l}$ sunt exprimați în unități $\hbar$, adică au modulul egal cu raportul dintre modulul fiecărui moment cinetic și cuanta de moment cinetic $\hbar$.

Produsul $\vec{s} \cdot \vec{l}$ rezultă din pătratul sumei $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$, adică:

$$\vec{j}^2 = (\vec{l} + \vec{s})^2 = \vec{l}^2 + \vec{s}^2 + 2\vec{l} \cdot \vec{s}, \quad (5.761)$$

de unde

$$\vec{l} \cdot \vec{s} = \frac{\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2}{2} = \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2}, \quad (5.762)$$

unde s-au înlocuit valorile proprii ale operatorilor pătrat al momentelor cinetice. Înlocuind relația (5.762) în (5.760) energia de interacție (cuplaj) spin-orbită devine:

$$W_{so} = a(\ell, n) \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2}, \quad (5.763)$$

unde

$$a(\ell, n) = \frac{\hbar^2}{2M^2rc^2} \frac{dU}{dr}. \quad (5.764)$$

este o constantă caracteristică subpăturii respective.

Pentru identificarea termenilor spectrali se folosește notația spectroscopică $^{2S+1}L_J$ unde S este momentul cinetic de spin al atomului, L este momentul cinetic orbital al atomului și J este momentul cinetic total al atomului

Cazul unui atom cu doi electroni pe ultima subpătură incompletă (doi electroni de valență). În afara atomului de heliu, în această categorie intră atomii elementelor alcalino-pământoase cum sunt: Hg, Ca, Sr, Ba și Zn, Cd, Hg sau unii ioni ca: Li^+ , C^{2+} , N^{3+} etc.

Cuplajul L-S. Cei doi electroni de valență au momentele cinetice $\vec{l}_1$, $\vec{l}_2$, $\vec{s}_1$ și $\vec{s}_2$. Compunerea acestor momente cinetice se poate face în două moduri. În cazul cuplajului L-S compunerea se face în modul următor: se compun momentele cinetice orbitale

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 \quad (5.765)$$

și cele de spin

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2, \quad (5.766)$$

iar la urmă se compun cele două momente cinetice $\vec{L}$ și $\vec{S}$:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (5.767)$$

Prin analogie cu cazul atomului cu un electron de valență se scrie energia de interacție spin-orbită sub forma unei sume de trei termeni:

$$W_{so} = a_1 \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + a_2 \vec{l}_1 \cdot \vec{l}_2 + A \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (5.768)$$

unde

$$\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{1}{2} (\vec{S}^2 - \vec{s}_1^2 - \vec{s}_2^2) = \frac{1}{2} \{S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)\} \quad (5.769)$$

$$\vec{l}_1 \cdot \vec{l}_2 = \frac{1}{2}(\vec{L}^2 - \vec{l}_1^2 - \vec{l}_2^2) = \frac{1}{2}\{L(L+1) - \ell_1(\ell_1+1) - \ell_2(\ell_2+1)\} \quad (5.770)$$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) = \frac{1}{2}\{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \quad (5.771)$$

Ținând seama de relațiile (5.769)-(5.771) rezultă:

$$\begin{aligned} W_{so} = & \frac{a_1}{2}\{S(S+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)\} + \frac{a_2}{2}\{L(L+1) - \ell_1(\ell_1+1) - \ell_2(\ell_2+1)\} \\ & + \frac{A}{2}\{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \end{aligned} \quad (5.772)$$

Cuplajul j-j. În cazul celui de-al doilea mod de compunere a momentelor cinetice se compun momentele cinetice orbital și de spin pentru fiecare electron obținându-se momentele cinetice totale pentru fiecare electron:

$$\vec{j}_1 = \vec{l}_1 + \vec{s}_1 \text{ și } \vec{j}_2 = \vec{l}_2 + \vec{s}_2 \quad (5.773)$$

și apoi se compun cele două momente cinetice totale ale electronilor rezultând momentul cinetic total al atomului $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$.

Pe baza aceleiași analogii cu cazul atomului cu un electron de valență, energia de interacție spin-orbită poate fi scrisă ca o sumă de trei termeni sub forma:

$$\begin{aligned} W_{so} = & a_3 \vec{l}_1 \cdot \vec{s}_1 + a_4 \vec{l}_2 \cdot \vec{s}_2 + A_1 \vec{j}_1 \cdot \vec{j}_2 \\ = & \frac{a_3}{2}[j_1(j_1+1) - \ell_1(\ell_1+1) - s_1(s_1+1)] + \frac{a_4}{2}[j_2(j_2+1) - \ell_2(\ell_2+1) - s_2(s_2+1)] \\ & + \frac{A_1}{2}[J(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]. \end{aligned} \quad (5.774)$$

Efectul Zeeman anomal. În absența unui câmp magnetic exterior vectorii $\vec{L}$ și $\vec{S}$, care reprezintă momentele cinetice totale, orbital și de spin efectuează o mișcare de precesie în jurul rezultantei lor $\vec{J}$. Dacă se aplică un câmp magnetic exterior de inducție $\vec{B}$ apare cuplajul dintre $\vec{L}$ și $\vec{B}$ și respectiv dintre $\vec{S}$ și $\vec{B}$ (fig. 5. 51).

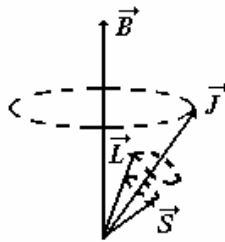


Fig. 5. 51. Mișcarea de precesie a vectorilor $\vec{L}$, $\vec{S}$ și $\vec{J}$.

În absența unui cuplaj între vectorii $\vec{L}$ și $\vec{S}$ aceștia efectuează o mișcare de precesie independentă în jurul vectorului $\vec{B}$, iar în cazul existenței unui cuplaj această mișcare devine foarte complexă. În cazul când câmpul magnetic este slab energia de cuplaj dintre momentul cinetic orbital și momentul cinetic de spin este mult mai mare decât cea corespunzătoare cuplajului dintre aceste momente cinetice și câmpul magnetic exterior.

Astfel, se poate admite că prezența câmpului magnetic nu perturbă cuplajul dintre $\vec{L}$ și $\vec{S}$, iar interacția cu câmpul magnetic se traduce prin precesia vectorilor în jurul inducției câmpului magnetic $\vec{B}$.

Momentul magnetic orbital $\vec{\mu}_L$ este coliniar cu momentul cinetic $\vec{L}$:

$$\vec{\mu}_L = -\mu_B \vec{L} \quad (5.775)$$

momentul magnetic de spin este un vector coliniar cu momentul cinetic de spin $\vec{S}$:

$$\vec{\mu}_S = -2\mu_B \vec{S}. \quad (5.776)$$

Astfel, triunghiul format din vectorii $\vec{\mu}_L$, $\vec{\mu}_S$ și $\vec{\mu}_J$ nu este asemenea cu triunghiul format de vectorii $\vec{L}$, $\vec{S}$ și $\vec{J}$. Energia de interacție dintre momentul magnetic total $\vec{\mu}_J$ și câmpul magnetic exterior de inducție $\vec{B}$ este:

$$W = -\langle \vec{\mu}_J \rangle \cdot \vec{B} \quad (5.777)$$

unde $\langle \vec{\mu}_J \rangle$ reprezintă proiecția vectorului $\vec{\mu}_J$ pe direcția lui $\vec{J}$. Notând cu $\vec{\mu}_J = \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}$

versorul direcției lui $\vec{J}$, rezultă:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\mu}_J \rangle &= \left(\text{proiecția lui } \vec{\mu}_L \text{ pe } \vec{J} + \text{proiecția lui } \vec{\mu}_S \text{ pe } \vec{J} \right) \cdot \vec{\mu}_J \\ &= -\left(\mu_B \vec{L} \cdot \vec{\mu}_J + 2\mu_B \vec{S} \cdot \vec{\mu}_J \right) \vec{\mu}_J = -\frac{\mu_B}{|\vec{J}|} \left(\vec{L} \cdot \vec{J} + 2\vec{S} \cdot \vec{J} \right) \vec{\mu}_J \\ &= -\frac{\mu_B \vec{J}}{|\vec{J}|^2} \left(\frac{\vec{J}^2 + \vec{L}^2 - \vec{S}^2}{2} + 2 \frac{\vec{J}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2}{2} \right) = -\mu_B \vec{J} \cdot \frac{3\vec{J}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2}{2\vec{J}^2} \quad (5.778) \\ &= -\mu_B \cdot \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \cdot \vec{J}. \end{aligned}$$

Astfel, energia de interacție devine:

$$W = \mu_B \left(1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right) \vec{J} \cdot \vec{B} = \mu_B g m_J B, \quad (5.779)$$

unde

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (5.780)$$

este *factorul Landé*. Se observă că dacă $S = 0$, $J = L$ și $g = 1$ (moment cinetic orbital), iar dacă $L = 0$, $J = S$ și $g = 2$ (moment cinetic de spin). Din relația (5.780) se observă că pentru un J dat nivelul energetic se despică în $(2J+1)$ subnivele Zeeman (numărul de valori ale lui m_J).

Probleme

P.5.1. Se consideră o incintă cu volumul $V = 1 \text{ cm}^3$ care conține radiație termică la temperatura $T = 10^3 \text{ K}$. Să se calculeze: a) capacitatea calorică la volum constant; b)

presiunea radiației din incintă. Se dau: constanta Stefan-Boltzmann, $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$ și viteza luminii $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

Rezolvare. a) Întrucât

$$R(T) = \frac{c \cdot w(T)}{4} = \sigma T^4 \text{ unde } w = \frac{E_i}{V} \quad (\text{P.5.1.1})$$

rezultă

$$C_V = \left(\frac{\partial E_i}{\partial T} \right)_V = \frac{16\sigma T^3 V}{c} = 3 \cdot 10^{-12} \text{ J/K}. \quad (\text{P.5.1.2})$$

$$\text{b) } p = \frac{w(T)}{3} = \frac{E_i}{3V} = \frac{4\sigma T^4}{3c} = 2,53 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}^2. \quad (\text{P.5.1.3})$$

P.5.2. Într-o cavitate de volum $V = 1 \text{ cm}^3$, care conține radiație termică temperatura variază de la $T_1 = 1000 \text{ K}$ la $T_2 = 2000 \text{ K}$. Să se calculeze variația entropiei radiației termice de echilibru din cavitate. Se dau: constanta Stefan-Boltzmann, $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$ și viteza luminii $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

Rezolvare. Ținând seama de relația entropiei :

$$dS = \frac{dQ_{rev}}{T} = \frac{V}{T} \frac{dw}{dT} dT + \frac{4}{3} \frac{w}{T} dV \quad (\text{P.5.2.1})$$

și a densității totale de energie radiantă

$$w = \frac{4\sigma T^4}{c} \quad (\text{P.5.2.2})$$

se obține în final

$$\Delta S = \frac{16V\sigma(T_2^3 - T_1^3)}{3c} \approx 71 \cdot 10^{-13} \text{ J/K}. \quad (\text{P.5.2.3})$$

P.5.3. Suprafața unui anumit metal este iluminată succesiv cu radiații având lungimile de undă λ_1 și λ_2 ($\lambda_1 < \lambda_2$). Știind că tensiunile de frânare corespunzătoare fotoelectronilor emiși sunt U_1 și respectiv U_2 , de n ori mai mică decât U_1 , să se calculeze: a) constanta Planck și b) lucrul de extracție.

Rezolvare. Din bilanțul energetic

$$\frac{hc}{\lambda_1} = eU_1 + \mathcal{L}_{ext}, \quad \frac{hc}{\lambda_2} = eU_2 + \mathcal{L}_{ext} \quad (\text{P.5.3.1})$$

și relația dintre tensiunile de frânare

$$U_2 = \frac{U_1}{n} \quad (\text{P.5.3.2})$$

se obține în final

$$\text{a) } h = \frac{eU_1(n-1)}{nc \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)} \quad (\text{P.5.3.3})$$

$$b) \quad \mathcal{L}_{ext} = eU_1 \left[\frac{n-1}{n\lambda_1 \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right)} - 1 \right]. \quad (P.5.3.4)$$

P.5.4. Un fascicul de fotoni X cu lungimea de undă inițială $\lambda_0 = 0,1 \text{ \AA}$ este difuzat prin efect Compton pe un electron cvasilibert. Știind că unghiul de difuzie al fotonului este $\theta = \frac{\pi}{2}$ să se calculeze: a) variația lungimii de undă a radiației, b) unghiul φ pe care îl face electronul de recul cu direcția fotonului incident și c) energia fotonului difuzat. Se dau: viteza luminii $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$, constanta Planck $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ și masa electronului $m_0 = 9,110 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$.

Rezolvare. a) Din relația

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\theta) = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (P.5.4.1)$$

se obține pentru variația lungimii de undă a radiației

$$\Delta\lambda = 0,0121 \text{ \AA}. \quad (P.5.4.2)$$

b) Ținând cont că înainte de difuzie electronul este practic în repaus, legea de conservare a impulsului (pe direcția impulsului fotonului incident (Ox) și pe o direcție perpendiculară (Oy)) se scriu sub forma (fig. P.5.4.1):

$$\frac{h\nu_0}{c} - \frac{h\nu}{c} \cos\theta = p \cos\varphi \quad (P.5.4.3)$$

$$\frac{h\nu_0}{c} \sin\theta = p \sin\varphi. \quad (P.5.4.4)$$

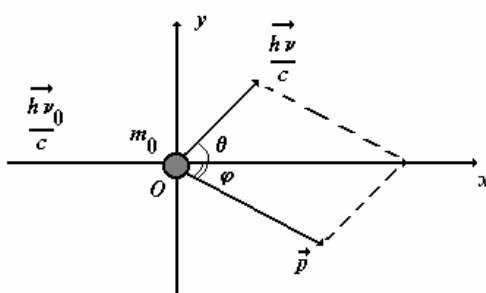


Fig. P.5.4.1. Diagrama impulsurilor.

Împărțind relațiile (P.5.4.3) și (P.5.4.4) și ținând seama de (P.5.4.1) se obține:

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{h\nu \sin\theta}{h\nu_0 - h\nu \cos\theta} = \frac{\sin\theta}{\frac{\nu_0}{\nu} - \cos\theta} = \frac{\operatorname{ctg}\frac{\theta}{2}}{1 + \frac{h}{m_0 c \lambda_0}} \quad (P.5.4.5)$$

de unde

$$\varphi = 43^{\circ}20' . \quad (\text{P.5.4.6})$$

c) energia fotonului difuzat este:

$$W = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda_0 + \Delta\lambda} = 1,6 \cdot 10^{-14} \text{ J} . \quad (\text{P.5.4.7})$$

P.5.5. Se consideră un atom cu doi electroni al cărui nucleu are sarcina $+2e$. Utilizând relația de incertitudine Heisenberg să se evalueze energia stării fundamentale. Se dau: masa electronului $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, constanta Planck normalizată $\hbar = h/2\pi = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$, sarcina electrică elementară $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ și permitivitatea electrică absolută a vidului $\varepsilon_0 = 8,86 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$.

Rezolvare. Considerând că electronii se află în poziții simetrice față de nucleu la distanța r și făcând aproximațiile

$$\Delta p \approx p \text{ și } \Delta r \approx r \quad (\text{P.5.5.1})$$

în relația de incertitudine Heisenberg

$$\Delta r \cdot \Delta p \approx \hbar \quad (\text{P.5.5.2})$$

energia totală se scrie sub forma:

$$W = 2 \frac{p^2}{2m_0} - 2 \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 2r} = \frac{\hbar^2}{mr^2} - \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 r} + \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} = \frac{\hbar^2}{mr^2} - \frac{7e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} . \quad (\text{P.5.5.3})$$

Din condiția de minim a energiei totale $\frac{dW}{dr} = 0$, rezultă:

$$r_{min} = \frac{16\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{7me^2} \text{ și respectiv } W_{min} = -\frac{49me^2}{256\pi\varepsilon_0 \hbar^2} = -132,3 \cdot 10^{-19} \text{ J} . \quad (\text{P.5.5.4})$$

P.5.6. Pe baza teoriei Bohr pentru atomul de hidrogen să se deducă raportul dintre frecvența de rotație ω_{nr} a electronului pe orbita n și frecvența liniei corespunzătoare excitării atomului de pe nivelul fundamental pe nivelul n .

Rezolvare. Din formulele frecvenței de rotație a electronului pe orbita n :

$$f_{nr} = \frac{v_n}{2\pi r_n} = \frac{mZ^2 e^4}{16\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \cdot \frac{1}{n^3} , \quad (\text{P.5.6.1})$$

și respectiv a frecvenței liniei corespunzătoare excitării atomului de pe nivelul fundamental pe nivelul n

$$\hbar\omega_{n1} = W_n - W_1 = R\hbar c \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) . \quad (\text{P.5.6.2})$$

se obține raportul sub forma:

$$\frac{\omega_{nr}}{\omega_{n1}} = \frac{\hbar^2}{n(n^2 - 1)} . \quad (\text{P.5.6.3})$$

P.5.7. Să se determine funcția proprie corespunzătoare operatorului $\left(x + \frac{d}{dx}\right)$.

Rezolvare. Ecuația cu valori proprii este de forma:

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi = a\psi. \quad (\text{P.5.7.1})$$

În urma separării variabilelor din ecuația (P.5.7.1) și integrării se obține

$$\psi(x) = C \exp\left(ax - \frac{x^2}{2}\right). \quad (\text{P.5.7.2})$$

P.5.8. Se consideră că la momentul inițial starea unei particule cuantice libere este descrisă de funcția de undă

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ikx\right) \quad (\text{P.5.8.1})$$

unde A , a și k sunt constante. Să se calculeze: a) constanta de normare A și b) densitatea curentului de probabilitate.

Se dă:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{P.5.8.2})$$

Rezolvare. a) Din condiția de normare

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (\text{P.5.8.3})$$

și ținând seama de valoarea integralei (P.5.8.2), rezultă

$$A = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}}. \quad (\text{P.5.8.4})$$

b) Înlocuind expresia funcției de undă (P.5.8.1) în formula densității curentului de probabilitate se obține succesiv:

$$j = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) = \frac{\hbar b}{ma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right). \quad (\text{P.5.8.5})$$

P.5.9. Considerând că la momentul inițial starea unei particule cuantice libere este descrisă de funcția de undă

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ikx\right) \quad (\text{P.5.9.1})$$

unde A , a și k sunt constante, să se demonstreze relația de incertitudine Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (\text{P.5.9.2})$$

Se dă:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (\text{P.5.9.3})$$

Rezolvare. Din condiția de normare

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (\text{P.5.9.4})$$

și ținând seama de valoarea integralei (P.5.9.3), rezultă

$$A = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}}. \quad (\text{P.5.9.5})$$

Impreciziile Δx și Δp sunt definite de relațiile:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad (\text{P.5.9.6})$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}. \quad (\text{P.5.9.7})$$

Explicitând relațiile (P.5.9.6) și (P.5.9.7) se obține succesiv

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx = 0, \quad (\text{P.5.9.8})$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx = \frac{a^2}{2}, \quad (\text{P.5.9.9})$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(\hbar k + \frac{i\hbar x}{a^2}\right) \psi(x) dx = \hbar k, \quad (\text{P.5.9.10})$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 \psi(x) dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} dx = \hbar^2 k^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}, \quad (\text{P.5.9.11})$$

Înlocuind relațiile (P.5.9.8)-(P.5.9.11) în (P.5.9.2), rezultă:

$$\Delta x \Delta p = \frac{a}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{a\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \hbar. \quad (\text{P.5.9.12})$$

P.5.10. Se consideră un electron ($m_0 = 9,110 \cdot 10^{-31}$ kg) aflat într-o groapă de potențial cu pereți infiniți, de lățime $a = 0,5 \text{ \AA}$ (fig. P.5.26.1) definită de potențialul:

$$U = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & x < 0, x > a \end{cases} \quad (\text{P.5.10.1})$$

Să se calculeze: a) funcțiile proprii și valorile proprii corespunzătoare și b) energiile primelor trei nivele energetice ale electronului și c) probabilitatea de a găsi electronul în domeniul $\frac{a}{4}, \frac{a}{2}$.

Rezolvare. a) Ecuația Schrödinger atemporală în domeniul $|x| \leq a$ se scrie:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = W \varphi, \quad (\text{P.5.10.2})$$

iar în domeniul $|x| > a$, $\varphi = 0$, deoarece aici particula ar trebui să aibă energie infinită pentru a exista.

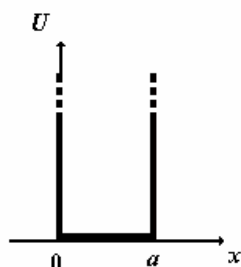


Fig. P.5.10.1. Groapa de potențial cu pereți infiniți.

Soluția ecuației (P.5.10.2) este de forma:

$$\varphi(x) = A \sin k_0 x, \quad (\text{P.5.10.3})$$

unde s-a introdus notația

$$k_0^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}. \quad (\text{P.5.10.4})$$

Din condițiile de continuitate pentru funcțiile de undă și derivatele acestora în raport cu x în punctele $x = 0$ și $x = a$:

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0, \quad (\text{P.5.10.5})$$

$$\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=a} = 0, \quad (\text{P.5.10.6})$$

rezultă:

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{P.5.10.7})$$

și respectiv valorile proprii ale energiei

$$W_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (\text{P.5.10.8})$$

Din condiția de normare

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (\text{P.5.10.9})$$

rezultă

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (\text{P.5.10.10})$$

și deci funcția proprie este de forma

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x. \quad (\text{P.5.10.11})$$

b) Din relația (P.5.10.8) se obțin valorile primelor trei nivele energetice ale electronului $W_1 = 24 \cdot 10^{-18} \text{ J}$, $W_2 = 96 \cdot 10^{-18} \text{ J}$, $W_3 = 216 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ (fig. P.5.10.2).

c) Probabilitatea P de a găsi electronul în domeniul $\frac{a}{4}, \frac{a}{2}$ este:

$$P = \int_{\frac{a}{4}}^{\frac{a}{2}} |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_{\frac{a}{4}}^{\frac{a}{2}} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 0,5. \quad (\text{P.5.10.12})$$

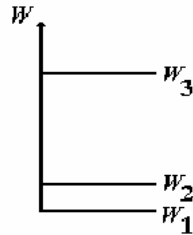


Fig. P.5.10.2. Diagrama primelor trei nivele energetice ale electronului.

P.5.11. Se consideră un atom pentru care numerele cuantice sunt $\ell = 3$, $s = 1$, iar $j = 3$. Să se determine: a) starea în care se găsește atomul și b) momentele magnetice total și efectiv ale atomului.

Rezolvare. a) Ținând seama de numerele cuantice din enunțul problemei și de notația consacrată stării rezultă că aceasta este 3F_3 .

b) Momentul magnetic total $\vec{\mu}_j$ al atomului este (fig. P.5.36.1)

$$\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s \quad (\text{P.5.11.1})$$

iar

$$|\vec{\mu}_j| = \sqrt{|\vec{\mu}_l|^2 + |\vec{\mu}_s|^2 + 2|\vec{\mu}_l||\vec{\mu}_s|\cos(\vec{\mu}_l, \vec{\mu}_s)}, \quad (\text{P.5.11.2})$$

unde

$$|\vec{\mu}_l| = \sqrt{\ell(\ell+1)}\mu_B \text{ și } |\vec{\mu}_s| = 2\sqrt{s(s+1)}\mu_B. \quad (\text{P.5.11.3})$$

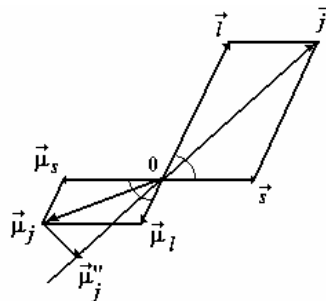


Fig. P.5.11.1. Reprezentarea schematică a momentelor cinetice și respectiv a momentelor magnetice.

Ținând seama că

$$\cos(\vec{\mu}_l, \vec{\mu}_s) = \cos(\vec{l}, \vec{s}) = \frac{\vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2}{2|\vec{l}| \cdot |\vec{s}|} = \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2\sqrt{\ell(\ell+1)}\sqrt{s(s+1)}} \quad (\text{P.5.11.4})$$

și de valorile numerelor cuantice, rezultă

$$|\vec{\mu}_j| = \sqrt{2j(j+1) + 2s(s+1) - \ell(\ell+1)} \mu_B = 3\sqrt{3} \mu_B. \quad (\text{P.5.11.5})$$

Momentul magnetic efectiv al atomului $\vec{\mu}_j''$, definit ca proiecția momentului magnetic total pe direcția momentului cinetic total $\vec{j}$ este

$$\vec{\mu}_j'' = g_j \sqrt{j(j+1)} \mu_B = \frac{13\sqrt{3}}{6} \mu_B, \quad (\text{P.5.11.6})$$

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)} = \frac{13}{12} \quad (\text{P.5.11.7})$$

reprezentând expresia factorului Landé.

P.5.12. Se consideră un rotator descris de funcția de undă

$$\psi = A \cos^2 \varphi. \quad (\text{P.5.12.1})$$

Să se calculeze: a) constanta de normare și b) valoarea medie a componentei l_z a momentului cinetic.

Rezolvare. a) Constanta A se calculează din condiția de normare

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} \cos^4 \varphi d\varphi = 1 \quad (\text{P.5.12.2})$$

rezultând

$$A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}, \quad (\text{P.5.12.3})$$

deci

$$\psi = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \cos^2 \varphi. \quad (\text{P.5.12.4})$$

b) Valoarea medie a componentei l_z a momentului cinetic este dată de relația

$$\langle l_z \rangle = \int_0^{2\pi} \psi^*(\varphi) \hat{l}_z \psi(\varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} \psi^*(\varphi) \left\{ -i\hbar \frac{d\psi(\varphi)}{d\varphi} \right\} d\varphi = \frac{-4i\hbar}{3\pi} \int_0^{2\pi} \cos^3 \varphi \sin \varphi d\varphi = 0. \quad (\text{P.5.12.5})$$

