

Fizica cuantica – partea I-a

I. Originile mecanicii cuantice

1 Radiația termică

1.1 Introducere

Este bine cunoscut faptul că pe seama diferitelor forme de energie, corpurile pot emite unde electromagnetice. Radiația electromagnetică obținută pe seama energiei interne a corpurilor poartă numele de radiație termică. Toate celelalte tipuri de radiație (obținute pe seama altor forme de energie decât cea internă) sunt combinate în termenul de “luminescență”.

Astfel descărcările în gaze reprezintă fenomenul de electroluminescență, emisia de radiație de către corpuri bombardate cu electroni poartă numele de catodoluminescență iar emisia de radiație pe baza radiației electromagnetice absorbită de corpuri este numită fotoluminescență, iar .

Orice substanță aflată la o temperatură superioară lui 0 K emite radiație termică.

Din punct de vedere fizic, principala problemă referitoare la radiația termică, care nu a putut fi explicată după descoperirea acesteia a fost legată de explicarea distribuției energiei în spectrul acesteia.

Realizările de la începutul secolului XX în domeniul instrumentației utilizate în cadrul tehnicilor de investigație au condus la rezultate care nu erau în concordanță cu rezultatele teoretice obținute până la acel moment.

1.2 Radiația termică de echilibru

Presupunem un corp, care emite unde electromagnetice pe seama energiei sale interne (radiație termică), aflat într-o încălț vidată cu pereții considerați suprafețe perfect reflectătoare. Radiația reflectată de pereții încălței va fi absorbită de corp (parțial sau complet). Ca urmare între corp și radiația din încălț va avea loc un schimb continuu de energie. Dacă distribuția de energie între corp și radiație rămâne constantă pentru orice lungime de undă, starea sistemului alcătuit din corp și radiație va fi una de echilibru termodinamic. Experiența arată că singura radiație, care se poate afla în echilibru cu corpurile emitatoare este radiația termică.

Existența radiației termice de echilibru (radiația electromagnetică aflată în echilibru cu corpul emițător) nu poate găsi o explicație corespunzătoare plecând de la legile fizicii clasice.

Este ușor de observat cum două fenomene asemănătoare din punctul de vedere al fizicii clasice nu pot fi explicate cu ajutorul acesteia. Astfel o bucată de fier, aflată la temperatura de 0°C într-o încălț vidată emite o energie de $3 \cdot 10^{-2}$ J/secundă pe fiecare centimetru al suprafeței sale în timp de o secundă și se află în echilibru cu o radiație termică având o densitate de energie de $4 \cdot 10^{-2}$ J/cm². Pe de altă parte densitatea energiei termice în interiorul bucății de fier este de $8 \cdot 10^7$ J/cm³, fiind mult mai mare decât aceea a radiației. Această energie este datorată vibrației atomilor în jurul pozițiilor lor de echilibru. Concluzia care se desprinde imediat este că în cazul atomilor de fier care vibrează, aflați în echilibru

termodinamic cu energia termică de echilibru, aproape toată energia este concentrată în atomii aflați în mișcare de vibrație și doar o mică parte din această energie se află în radiația termică de echilibru. Acest fenomen este de neînțeles din punct de vedere al mecanicii clasice. Un model simplu, corespunzător din punct de vedere clasic cu cel descris mai înaintea este cel în care la suprafața unei ape aflată într-o incintă se află un sistem de dopuri legate prin resorturi, într-un astfel de mod încât ele pot oscila unul față de altul. Dacă facem să vibreze dopurile, acestea vor comunica energia lor apei cu suprafața liniștită la momentul inițial, observându-se formarea unor unde. Undele se vor propaga la suprafață în direcții diferite, reflectându-se pe pereții rezervorului divizându-se în unde din ce în ce mai mici, iar ele se vor transforma ca urmare a vâscozității în energie calorică. După un timp energia dopurilor se va transforma în întregime în energie calorică, dopurile transferându-și energia mediului înconjurător. Deosebirea dintre cele două experiențe este evidentă. Pe baza conceptelor fizicii clasice este imposibil să se poată explica diferența dintre densitățile energiei electromagnetice din interiorul bucății de fier și aceea a radiației termice de echilibru.

Capacitatea radiației termice de a fi în echilibru cu corpurile ce emit radiație termică se datorează faptului că intensitatea ei este dependentă de temperatură. Astfel dacă se consideră o violare a echilibrului dintre radiație și corp, corpul va emite mai multă energie decât absoarbe, având loc o scădere a energiei corpului ceea ce va duce la o scădere a temperaturii. Acest lucru va conduce la o reducere a cantității de energie emise de corp. Temperatura corpului se va micșora până ce cantitatea de energie emisă va fi egală cu cantitatea de energie absorbită. Așadar violarea echilibrului dintre corp și radiație generează procese care conduc la restaurarea echilibrului.

Studiile experimentale asupra radiației termice arată ca aceasta are următoarele proprietăți caracteristice:

- spectrul său se întinde în mod continuu pe întreg domeniul de frecvențe între 0 și ∞ ;
- la echilibru termodinamic, radiația termică este omogenă și izotropă (are aceleași proprietăți în toate punctele și după toate direcțiile);
- radiația termică este total nepolarizată.

În continuare prezentăm mărimile care caracterizează radiația termică de echilibru. Intensitatea radiației termice este caracterizată de fluxul de energie măsurat în watt. Fluxul de energie emis de unitatea de suprafață a unui corp în toate direcțiile (în interiorul unui unghi solid de 2π) este cunoscut ca emitanță radiantă a corpului-R. Emitanța radiantă este o funcție de temperatură.

Energia radiației pe unitate de volum constituie densitatea de energie și va fi notată cu w fiind o mărime dependentă de temperatură. Densitatea de energie a radiației corespunzătoare unui interval de frecvență $d\omega$ este w_ω se numește densitate spectrală de energie și este legată de densitatea de energie prin relația:

$$w = \int_0^\infty w_\omega d\omega \quad (1.1)$$

Dacă se consideră că fluxul de energie R emis pe unitatea de suprafață a corpului în intervalul de frecvență $d\omega$ este dR_ω atunci se poate scrie:

$$R = \int_0^\infty dR_\omega \quad (1.2)$$

unde R este radianta iar R_ω este radianta spectrală, care se poate scrie:

$$dR_\omega = r_\omega d\omega \quad (1.3)$$

r_ω reprezentând puterea spectrală de emisie sau emisivitatea corpului.

Dacă fluxul de energie $d\Phi_\omega$ datorat radiației cu frecvența în intervalul $d\omega$ cade pe o suprafață elementară a corpului și $d\Phi_\omega^i$ este fluxul absorbit de corp atunci mărimea definită de relația:

$$a_{\omega T} = \frac{d\Phi_\omega^i}{d\Phi_\omega} \quad (1.4)$$

este puterea spectrală de absorbție sau absorbitivitatea corpului. Ea este o funcție de frecvență și de temperatură. Prin definiție puterea spectrală de absorbție este mai mică decât unitatea. Corpul ce absoarbe radiația asociată tuturor frecvențelor ce cade pe el este cunoscut ca fiind corp negru. Corpurile cu $a_{\omega T} \equiv \text{const} < 1$ sunt numite corpuri gri. O substanță cu $a_\omega = 1$ nu există în realitate. Carbonul negru și platina neagră au o putere spectrală de absorbție aproape de unitate în interiorul unui interval limitat de frecvențe. Puterea spectrală de absorbție a acestor substanțe este sensibil mai mică decât unitatea în regiunea infraroșului îndepărtat. Este posibil să se construiască un dispozitiv, ale cărui proprietăți să corespundă cu cele ale unui corp negru. Un astfel de dispozitiv este o incintă închisă aproape complet, prevăzută cu un mic orificiu (fig. 1.1).

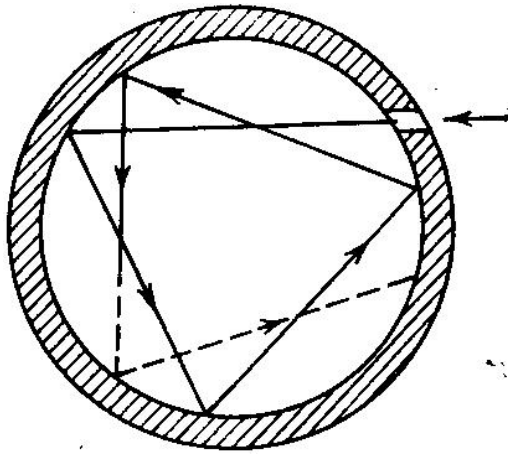


Fig. 1.1

Radiația care pătrunde în cavitate prin orificiu suferă un mare număr de reflexii pe pereții incintei înainte de a ieși din ea. O parte din energie este absorbită la fiecare reflexie și ca rezultat virtual, întreaga radiație de orice frecvență este absorbită de dispozitiv.

1.3 Legile radiației termice

1.3.1 Legea lui Kirchhoff

Prima încercare legată de studiul teoretic al radiației termice de echilibru a fost făcută de Gustav Kirchhoff, care a arătat pe considerente termodinamice că pentru o temperatură constantă, densitatea spectrală de energie a radiației este complet independentă de natura și proprietățile corpurilor ce se află în interiorul incintei. Kirchhoff a arătat că există o legătură între puterea spectrală de emisie și puterea spectrală de absorbție ale unui corp. Vom presupune că un număr de corpuri se află într-o incintă vidată la temperatura T (fig. 1.2)

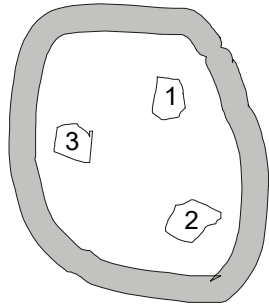


Fig. 1.2.

Corpurile pot schimba energie între ele doar prin emisie și absorbție de unde electromagnetice. Experiența arată că după un timp toate corpurile vor ajunge într-o stare de echilibru termodinamic atunci când ele vor avea aceeași temperatură T , egală cu temperatura incintei. În această stare, un corp cu o anumită putere spectrală de emisie va emite mai multă energie pe unitate de suprafață în unitatea de timp, decât un corp cu puterea spectrală de emisie mai mică. Deoarece temperatura (și deci energia) corpului nu se schimbă, atunci corpul ce emite mai multă energie va absorbi mai multă, deci va avea o putere spectrală de absorbție mai mare. Între cele două marimi există următoarea relație:

$$\left(\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_2 = \dots = \left(\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} \right)_i = \dots \quad (1.5)$$

Relația (1.5) reprezintă legea stabilită de Kirchhoff, care se enunță astfel: raportul dintre puterea spectrală de emisie și puterea spectrală de absorbție nu depinde de natura corpului, el este o funcție universală de frecvență și de temperatură pentru toate corpurile:

$$\frac{r_{\omega T}}{a_{\omega T}} = f(\omega, T) \quad (1.6)$$

unde $f(\omega, T)$ este funcția universală a lui Kirchhoff.

Este evident că pentru un corp negru funcția universală a lui Kirchhoff este egală cu puterea spectrală de emisie ($a_{\omega T} = 1$).

În studiile teoretice este mai convenabil să se utilizeze funcția de frecvență, iar în studiile experimentale se utilizează mai frecvent funcția dependentă de lungimea de undă $\varphi(\lambda, T)$. Cele două funcții sunt legate prin relația:

$$f(\omega, T) = \frac{2\pi c}{\omega^2} \varphi(\lambda, T) = \frac{\lambda^2}{2\pi c} \varphi(\lambda, T) \quad (1.7)$$

sau

$$f(\omega, T) = \frac{2\pi c}{\omega^2} \varphi\left(\frac{2\pi c}{\omega}, T\right) \quad (1.8)$$

1.3.2 Legătura dintre densitatea spectrală a energiei radiației termice de echilibru și funcția lui Kirchhoff

Densitatea de energie spectrală a radiației termice de echilibru este legată de emitanța corpului negru R^* printr-o expresie simplă, care va fi dedusă în continuare.

Considerăm o cavitate vidată cu pereți corp negru. La echilibru un flux de aceeași densitate va trece prin fiecare punct în interiorul cavității în orice direcție. Dacă radiația s-ar fi propagat într-o direcție dată (adică doar o rază ar trece printr-un punct), densitatea fluxului de energie la punctul considerat ar fi egală cu produsul dintre densitatea de energie și viteza luminii în vid c . Deoarece o multime de raze ale căror direcții sunt uniform distribuite în interiorul unui unghi solid de 4π , fluxul de energie cu este de asemenea distribuit uniform în interiorul limitei de unghi solid. În consecință, un flux de energie a cărui densitate este:

$$\Delta j = \frac{cu}{4\pi} d\Omega \quad (1.9)$$

va trece prin fiecare punct în interiorul limitei unghiului solid $d\Omega$.

Luăm o arie elementară ΔS pe suprafața cavității (fig. 1.3)

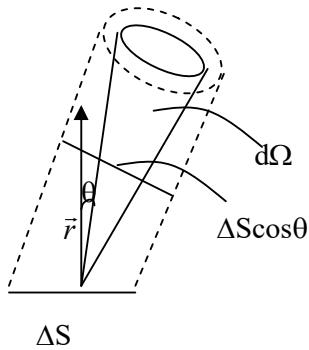


Fig. 1.3.

Această arie emite următorul flux de energie în interiorul limitei de unghi solid $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$, în direcția ce face unghiul θ cu normala \vec{r} :

$$d\Phi_e = dj \Delta S \cos \theta = \frac{cu}{4\pi} d\Omega \Delta S \cos \theta$$

sau

$$\Delta \Phi_e = \frac{cu}{4\pi} \Delta S \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi \quad (1.10)$$

Aria ΔS emite fluxul de energie:

$$\Delta \Phi_e = \int d\Phi_e = \frac{cu}{4\pi} \Delta S \int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{c}{4} u \Delta S \quad (1.11)$$

în toate direcțiile care se află în interiorul limitelor unghiului solid 2π .

În același timp, fluxul de energie emis de aria ΔS poate fi găsit multiplicând emitanța radiantă R^* cu ΔS :

$$\Delta\Phi_e = R^* \Delta S \quad (1.12)$$

Pe baza relațiilor (1.11) și (1.12) rezultă:

$$R^* = \frac{c}{4} u \quad (1.13)$$

Ecuția (1.13) trebuie să fie satisfăcută de fiecare componentă spectrală a radiației. Rezultă că

$$f(\omega, T) = \frac{c}{4} w(\omega, T) \quad (1.14)$$

Această relație leagă emitanța radiantă a corpului negru și densitatea spectrală a energiei radiației termice.

1.3.3 Legea Stefan-Boltzmann

O primă lege a radiației corpului negru a fost stabilită experimental în anul 1879 de fizicianul austriac Stefan. Din analiza datelor experimentale el a ajuns la concluzia că emitanța radiantă a oricărui corp este proporțională cu puterea a patra a temperaturii absolute. În 1884, fizicianul austriac Boltzmann a obținut pe baza unor considerente termodinamice valoarea emitanței radiante a corpului negru:

$$R^*(T) = \int_0^\infty f(\omega, T) d\omega = \sigma T^4 \quad (1.15)$$

unde σ este o constantă și T este temperatura absolută. Așadar concluzia lui Stefan este adevărată doar pentru corpul negru. Valoarea lui σ este:

$$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 R^4}$$

fiind obținută pe considerente experimentale. Pe considerente termodinamice se găsește și o altă formă a legii Stefan-Boltzmann, care leagă densitatea de energie a radiației termice de echilibru (corpului negru) de temperatură

$$w = aT^4 \quad (1.16)$$

1.3.4. Legea Wien și legea deplasării Wien

În anul 1893 fizicianul german Wilhelm Wien folosind teoria electromagnetismului în combinație cu conceptele termodinamicii a arătat că densitatea spectrală de energie a radiației termice de echilibru este dată de relația:

$$w_\omega(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (1.17)$$

care este cunoscută sub denumirea de legea Wien.

Relația (1.17) oferă o relație pentru w_ω care coincide cu rezultatele experimentale, doar în domeniul frecvențelor înalte.

Utilizând relația (1.7), relația (1.17) se scrie:

$$w_\lambda(\lambda, T) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \left(\frac{2\pi c}{\lambda} \right)^3 F \left(\frac{2\pi c}{\lambda T} \right) = \frac{1}{\lambda^5} \Psi(\lambda T) \quad (1.18)$$

unde Ψ este o funcție de produsul $(\lambda \cdot T)$.

Relația (1.18), oferă posibilitatea de a stabili o legătură între lungimea de undă λ_m ce corespunde maximumului funcției $w_\lambda(\lambda, T)$ și temperatură. Astfel, derivând relația (1.18) în raport cu λ se obține:

$$\frac{dw_\lambda}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda^5} T \Psi'(\lambda T) - \frac{5}{\lambda^6} \Psi(\lambda T) + \frac{1}{\lambda^6} [\lambda T \Psi'(\lambda T) - 5 \Psi(\lambda T)] \quad (1.19)$$

Expresia din paranteză este o anumită funcție $\Psi(\lambda, T)$. La lungimea de undă λ_m care corespunde maximumului funcției $w_\lambda(\lambda, T)$ derivata dată de (1.19) se anulează, încât:

$$\left(\frac{dw_\lambda}{d\lambda} \right)_{\lambda=\lambda_m} = \frac{1}{\lambda_m^6} \Psi(\lambda_m T) = 0 \quad (1.20)$$

Din experiență se știe că λ_m este finit, ceea ce înseamnă că va trebui satisfăcută condiția $\Psi(\lambda_m T) = 0$. Rezolvând ecuația (1.20) în raport cu $(\lambda_m T)$ se va obține pentru acest produs o valoare constantă, care se notează cu b . Deci putem scrie:

$$\lambda_m T = b \quad (1.21)$$

relație ce reprezintă legea deplasării Wien. Valoarea experimentală a constantei este:

$$b = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ mK} \quad (1.22)$$

În fig. 1.4 este reprezentată densitatea de energie pentru diferite temperaturi ale corpului

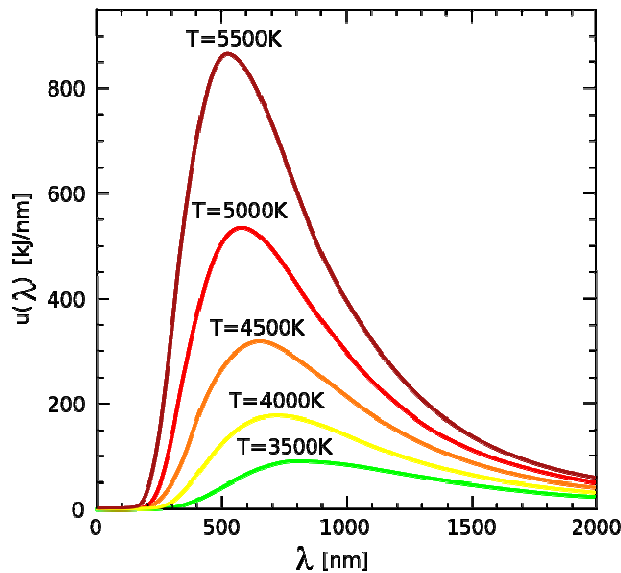


Fig. 1.4 Funcția $w(\lambda)$ pentru diferite temperaturi ale corpului.

1.3.5 Legea Rayleigh-Jeans

Fizicienii englezi John William Strutt (Lord Rayleigh) și James Jeans au determinat densitatea spectrală a energiei pe baza teoremei de echipartiție a energiei din fizica statistică și folosind densitatea de unde staționare rezultată din electromagnetism.

Noi vom deduce mai întâi numărul de unde staționare pe unitatea de volum existente într-o cavitate unde se află unde electromagnetice, care se reflectă pe pereții cavității.

Metoda utilizată se bazează pe ecuația de propagare a luminii în vid:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \quad (1.23)$$

unde Ψ este o variabilă a câmpului electromagnetic, care este funcție de x, y, z și t .

Considerand o unda armonica de frecvență ω :

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi_0(x, y, z) \cdot \exp(i\omega t) \quad (1.24)$$

Înlocuind (1.24) în ecuația (1.23) obținem ecuația atemporală sub forma:

$$\nabla^2 \Psi_0 + \frac{\omega^2}{c^2} \Psi_0 = 0 \quad (1.25)$$

Considerand ca undele se afla într-o cavitate cubică de latură a iar ca urmare a reflexiilor pe pereti se formeaza un sistem de unde stationare. Utilizând metoda separării variabilelor se obține pe baza ecuației (1.25) și utilizând condițiile la limită pentru undele stationare (anularea lui Ψ_0 pe peretii cavitatii: $x, y, z=0$ și $x, y, z=b$) se obtine următoarea formă pentru Ψ_0 :

$$\Psi_0 = A \sin\left(\frac{l\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi z}{a}\right) \quad (1.26)$$

unde A este amplitudinea, iar l, m și n sunt numere naturale.

Substituind (1.26) în (1.24) se obține:

$$\frac{l^2 \pi^2 + m^2 \pi^2 + n^2 \pi^2}{a^2} = \frac{\omega^2}{c^2}$$

sau

$$l^2 + m^2 + n^2 = \frac{\omega^2 a^2}{\pi^2 c^2} \quad (1.27)$$

Orice grup de numere (l, m, n) determină un mod particular de vibrație al undelor în cavitate și pentru o frecvență unghiulară dată ecuația (1.27) este o limitare a numerelor posibile. Putem considera valorile l, m, n ca punctele unei rețele cubice cu valorile descrise de l în lungul axei x , de m în lungul axei y și de n în lungul axei z . La valori foarte mari ale lui l, m, n putem privi distribuția ca un continuum, iar ecuația (1.27) reprezintă sfera de rază

$\left(\frac{\omega a}{\pi c}\right)$ în coordonate (l, m, n) . În particular, toate punctele cu frecvențe unghiulare mai mici decât o anumită valoare ω se află în interiorul octantului pozitiv al sferei (fig. 1.5)

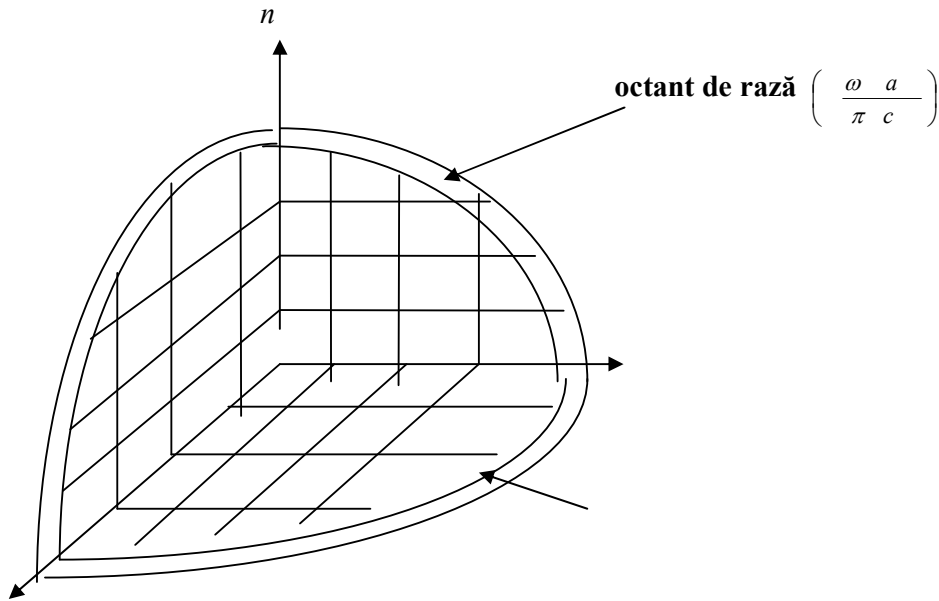


Fig. 1.5.

Dacă construim doi octanți de rază $\left(\frac{\omega a}{\pi c}\right)$ și respective $\frac{(\omega + d\omega)a}{\pi c}$, volumul închis în interiorul păturii sferice este egal cu numărul de moduri de vibrație dintre frecvențele unghiulare ω și $(\omega + d\omega)$. Avem deci:

$$N(\omega)d\omega = \frac{4\pi r^2 dr}{8} = \frac{\omega^2 a^3 d\omega}{2c^3 \pi^2} \quad (1.28)$$

dacă: $r = \frac{\omega a}{\pi c}$.

Această metodă permite enumerarea modurilor de vibrație posibile într-un sistem închis de orice formă. S-a găsit că numărul de moduri pe unitate de volum este independent de forma incintei.

Teoria completă a undelor electromagnetice arată că numărul de moduri trebuie să fie dublat ținând seama de existența a două unde polarizate transversal.

Numărul de unde pe unitatea de volum cu frecvențe cuprinse între ω și $\omega + d\omega$ este:

$$n(\omega)d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega \quad (1.29)$$

La echilibru fiecărui mod îi corespunde o energie medie egală cu kT , astfel încât densitatea spectrală a energiei va fi:

$$w_\omega d\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT d\omega \quad (1.30)$$

Expresia (1.30) este cunoscută ca formula Rayleigh-Jeans. Ea concordă cu rezultate experimentale în domeniul frecvențelor joase. Integrarea ecuației (1.30) cu privire la ω între 0 și ∞ dă o valoare infinit de mare pentru densitatea de energie $w(T)$. Acest rezultat, numit de Ehrenfest catastrofa de ultraviolet contrazice rezultatele experimentale.

1.3.6 Legea lui Planck

În anul 1900, fizicianul german Max Planck a determinat o formă a funcției $w_\omega(\omega, T)$ care a corespuns exact rezultatelor experimentale. El a făcut o presupunere în totală contradicție cu noțiunile fizicii clasice, aceea că radiația electromagnetică este emisă sub forma unor entități separate de energie numite cuante a căror mărime este proporțională cu frecvența radiației:

$$\varepsilon = h\nu \quad (1.31)$$

Constanta de proporționalitate h a fost numită constanta lui Planck. Valoarea ei este

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} J \cdot s \quad (1.32)$$

Relația (1.31) se mai scrie în funcție de frecvența unghiulară

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (1.33)$$

unde costanta \hbar are valoarea

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} J \cdot s$$

Așa cum se vede, unitatea de măsură a constantei lui Planck este aceeași cu a mărimii din mecanică numită acțiune.

În condițiile în care radiația este emisă în pachete de $\hbar\omega$, energia ei trebuie să fie un multiplu al acestei cantități:

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega \quad (n=0, 1, 2, \dots) \quad (1.34)$$

Într-o stare de echilibru energia este distribuită modurilor de oscilație în conformitate cu legea lui Boltzmann. În concordanță cu această lege probabilitatea P_n ca energia de oscilație să fie ε_n este dată de relația:

$$P_n = \frac{N_n}{N} = \frac{N_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right)}{N_0 \sum_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right)} \quad (1.35)$$

unde N_n reprezintă numărul de moduri de oscilație cu energia ε_n , iar N este numărul total de oscilatori. Utilizând probabilitatea P_n dată de relația (1.35) se poate scrie valoarea medie a energiei:

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_n P_n \varepsilon_n \quad (1.36)$$

deci:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega \exp(-n\hbar\omega/kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\hbar\omega/kT)} \quad (1.37)$$

Pentru a ușura calculele facem substituția : $\frac{\hbar\omega}{kT} = x$, relația (1.37) devenind:

$$\langle \varepsilon \rangle = \hbar \omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \exp(-nx)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx)} = -\hbar \omega \frac{d}{dx} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nx) \quad (1.38)$$

Suma de sub logaritm este suma termenilor unei progresii geometrice cu rația $\exp(-x)$. Progresia va fi una descrescătoare, iar suma va fi:

$$\sum \exp(-nx) = \frac{1}{1 - \exp(-x)}.$$

Introducând această sumă în relația (1.38) se obține:

$$\langle \varepsilon \rangle = -\hbar \omega \frac{d}{dx} \ln \frac{1}{1 - \exp(-x)} = \hbar \omega \frac{\exp(-x)}{1 - \exp(-x)}$$

sau prin înlocuirea lui x :

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar \omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} \quad (1.39)$$

Densitatea energiei ce cade în intervalul $d\omega$ se obține înmulțind $\langle \varepsilon \rangle$ cu densitatea de moduri de oscilație dată de relația (1.29):

$$w_{\omega}(\omega, T) = \frac{\hbar \omega}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} \cdot \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} \quad (1.40)$$

Această relație reprezintă formula lui Planck și este valabilă pe tot domeniul de frecvențe.

Utilizând relația (1.40) pot fi deduse legile radiației termice de echilibru ale căror expresii au fost scrise ceva mai înainte.

Probleme

1. O sferă de cupru de rază $r=1\text{cm}$ cu suprafața perfect neagră este plasată într-o incintă vidată ai cărei pereți sunt răciți în apropierea temperaturii de 0 K. Temperatura inițială a sferei este $T_0=300\text{ K}$. să se determine în cât timp temperatura sferei scade de $n=1,5$ ori. Se cunosc căldura specifică a cuprului $c=0,38\text{kJ/kg}\cdot\text{K}$ și densitatea cuprului $\rho=8,9\text{g/cm}^3$.

Rezolvare:

Conform legii Stefan-Boltzmann,

$$R = \frac{d\Phi}{dS} = \sigma T^4, \quad (1)$$

unde fluxul Φ este:

$$\Phi = \frac{dW}{dt} = \frac{mcdT}{dt} = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho c \frac{dT}{dt}. \quad (2)$$

Integrând relația (1) rezultă:

$$\Phi = \sigma T^4 S = 4\pi r^2 \sigma T^4. \quad (3)$$

Egalând relațiile (2) și (3) rezultă:

$$dt = \frac{1}{3} r \rho \frac{c}{\sigma} T^{-4} dT. \quad (4)$$

Integrând relația (4) între T_0 și T_0/n se obține:

$$t = c\rho r(n^3 - 1)/9\sigma T_0^3 = 1,6 \text{ ore.}$$

2. Folosind formula lui Planck referitoare la densitatea spectrală de energie să se determine:

- expresia ce dă numărul de fotoni pe cm^3 în interiorul intervalului spectral $(\omega, \omega+d\omega)$ și $(\lambda, \lambda+d\lambda)$;
- numărul de fotoni pe cm^3 la temperatura $T=300\text{ K}$;
- energia cea mai probabilă a fotonilor; d) valoarea medie a energiei fotonilor la temperatura $T=1000\text{ K}$.

Rezolvare

$$a) \quad n_\omega d\omega = \frac{w_\omega d\omega}{\hbar\omega} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \quad (1)$$

Cum $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ și deci $d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda$ din (1) rezultă:

$$n_\lambda d\lambda = 8\pi \frac{\lambda^{-4} d\lambda}{\exp\left(\frac{2\pi c\hbar}{kT\lambda}\right) - 1}. \quad (2)$$

b) Numărul total de fotoni din unitatea de volum va fi, ținând seama de (1),

$$n = \int_0^\infty \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \quad (3)$$

Cu notația $\frac{\hbar\omega}{kT} = x$, integrala din relația (3) este:

$$\int_0^\infty \frac{x^2 dx}{\exp[x] - 1} \approx 2,405. \quad (4)$$

Introducând (4) în (3):

$$n = 0,243 \left(\frac{kT}{\hbar c}\right)^3 = 5,5 \cdot 10^8 \text{ cm}^3. \quad (5)$$

c) Energia cea mai probabilă este $\varepsilon_{pr} = \hbar\omega_{pr}$, unde ω_{pr} se determină efectuând:

$$\frac{dn}{d\omega} = 0. \quad (6)$$

Cu notația $\frac{\hbar\omega}{kT} = x$, relația (6) devine:

$$2 - x = 2e^{-x}, \quad (7)$$

ecuație a cărei rezolvare grafică dă:

$$x \approx 1,6 \quad x \approx 1,6.$$

Așadar: $\hbar\omega_{pr} = 1,6kT = 0,14 \text{ eV}$.

d) Calculăm mai întâi energia tuturor cuantelor din unitatea de volum:

$$\mathcal{E} = \int_0^\infty \hbar\omega n_\omega d\omega. \quad (8)$$

Introducând în (8) $n_\omega d\omega$ dat de (1) se obține:

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \quad (9)$$

Utilizând din nou notația $\frac{\hbar\omega}{kT} = x$, (9) devine:

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{k^4 T^4}{\hbar^4} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{\exp[x] - 1} \approx 6,49 \cdot \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \cdot \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4. \quad (10)$$

Pe baza relațiilor (9) și (5) rezultă:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\mathcal{E}}{n} = 2,7kT = 0,23 \text{ eV}.$$

3. Cunoscându-se legea lui Wien $w_{\omega}(\omega, T) = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right)$, se cere:

- Să se arate cum aceasta conduce la legea Stefan-Boltzmann.
- Să se demonstreze că dacă se dă curba de distribuție a energiei în spectrul radiației corpului negru, pentru o temperatură T , se poate construi o curbă analoagă pentru o altă temperatură T_1 .
- Să se arate că din această lege rezultă expresiile $\frac{\omega_m}{T} = \text{const.}$ sau $\lambda_m T = \text{const.}$, unde ω_m și λ_m corespund maximului densității spectrale de energie.

Rezolvare

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad \omega(T) &= \int_0^{\infty} w_{\omega}(\omega, T) d\omega = \int_0^{\infty} \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right) d\omega = \\ &= T^4 \int_0^{\infty} \left(\frac{\omega}{T}\right)^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right) d\left(\frac{\omega}{T}\right) = T^4 \int_0^{\infty} x^3 f(x) dx = aT^4 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\text{b)} \text{ Ținând seama de relația:} \quad \frac{\omega}{T} = \frac{\omega_1}{T_1} = \text{const}, \quad (2)$$

se obține:

$$w_{\omega_1}(\omega_1, T_1) = \omega_1^3 f\left(\frac{\omega_1}{T_1}\right) = \left(\frac{T_1}{T}\right)^3 w_{\omega}(\omega, T). \quad (3)$$

Deci, dacă abscisele sunt în raportul $\frac{T}{T_1}$, atunci ordonatele sunt în raportul $\left(\frac{T_1}{T}\right)^3$.

Aceeași problemă se poate rezolva pornind de la relația

$$\lambda_1 T_1 = \lambda T = \text{const}. \quad (4)$$

Atunci, se obține:

$$\frac{w_{\lambda}(\lambda, T)}{w_{\lambda_1}(\lambda_1, T)} = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda}\right)^5 = \left(\frac{T}{T_1}\right)^5. \quad (5)$$

Deci, în acest caz, dacă abscisele sunt în raportul $\frac{T}{T_1}$, ordonatele sunt în raportul $\left(\frac{T_1}{T}\right)^5$.

d) Punând condiția:

$$\frac{dw_\omega(\omega, T)}{d\omega} = 3\omega_m^2 f\left(\frac{\omega m}{T}\right) + \omega_m^3 \frac{1}{T} f'\left(\frac{\omega m}{T}\right) = 0 \quad (6)$$

rezultă:

$$\frac{f'\left(\frac{\omega_m}{T}\right)}{f\left(\frac{\omega_m}{T}\right)} \frac{\omega_m}{T} + 3 = 0, \text{ adică,} \quad (7)$$

$$\frac{\omega_m}{T} = \text{const.}$$

Deoarece $w_\omega(\omega, T)d\omega = w_\lambda(\lambda, T)|d\lambda|$, din $w_\omega(\omega, T) = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right)$, ținând seama că $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$, rezultă:

$$w_\lambda(\lambda, T) = \frac{1}{\lambda^5} g(\lambda, T). \quad (8)$$

Dacă se pune condiția:

$$\frac{dw_\lambda(\lambda, T)}{d\lambda} = -5\lambda^{-6} g(\lambda T) + \lambda^{-5} T g'(\lambda T) = 0, \quad (9)$$

se obține:

$$\lambda_m T \frac{g'(\lambda_m T)}{g(\lambda_m T)} - 5 = 0, \text{ adică:}$$

$$\lambda_m T = \text{const.} = b \text{ (așa numită lege de deplasare a lui Wien)}$$

4. Cunoscând formula lui Planck pentru densitatea de energie spectrală emisă de un un corp negru:

$$w_\omega(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{\exp\left[\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right] - 1},$$

se cer:

- Să se obțină expresiile pentru $w_\nu(\nu, T)$ și $w_\lambda(\lambda, T)$.
- Să se determine constanta lui Stefan-Boltzmann $B = \sigma T^4$ și constanta lui Wien din legea de deplasare a lui Wien $\lambda_m T = b$, funcție de constantele \hbar , c și k_B .

Rezolvare

a) din expresia:

$$w_\omega(\omega, T)d\omega = w_\nu(\nu, T)d\nu, \quad (1)$$

rezultă:

$$w_\nu(\nu, T) = [w_\omega(\omega, T)]_{\omega=2\pi\nu} \frac{d\omega}{d\nu} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left[\frac{h\nu}{k_B T}\right] - 1}. \quad (2)$$

De asemenea, deoarece:

$$w_{\omega}(\omega, T)d\omega = w_{\lambda}(\lambda, T) \cdot |d\lambda|, \quad (3)$$

$$w_{\lambda}(\lambda, T) = [w_{\omega}(\omega, T)]_{\omega=\frac{2\pi c}{\lambda}} \frac{d\omega}{|d\lambda|} = \frac{8\pi ch}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left[\frac{hc}{k_B \lambda T}\right] - 1}, \quad (4)$$

unde: $\frac{d\omega}{|d\lambda|} = \frac{2\pi c}{\lambda^2}.$

$$b) \quad w(T) = \int_0^{\omega} w_{\omega}(\omega, T)d\omega = \frac{k_B^4}{\pi^2 c^3 h^3} T^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{\exp[x] - 1}. \quad (5)$$

Deoarece:

$$\frac{x^3}{\exp[x] - 1} = \frac{x^3 \exp[-x]}{1 - \exp[-x]} = x^3 (\exp[-x] + \exp[-2x] + \exp[-3x] + \dots) \text{ și}$$

$$\int_0^{\infty} x^3 \exp[-nx] dx = \frac{6}{n^4}, \text{ se obține:}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{\exp[x] - 1} = 6 \left[1 + \frac{1}{2^4} + \frac{1}{3^4} + \dots \right] = \frac{\pi^4}{15}. \quad (6)$$

Introducând rezultatul (6) în relația (5) rezultă:

$$w(T) = \frac{\pi^2}{15} \frac{k_B^4}{c^3 h^3} T^4. \quad (7)$$

Se știe că:

$$B(T) = \sigma T^4 = \frac{c}{4} w(T). \quad (8)$$

Din relațiile (7) și (8) rezultă:

$$\sigma = \frac{\pi^2}{60} \frac{k_B^4}{c^2 h^3} \approx 5,76 \cdot 10^{-8} W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}. \quad (9)$$

Din expresia $\frac{dw_{\lambda}(\lambda, T)}{d\lambda} = 0$, rezultă:

$$5(1 - \exp[-x]) = x, \quad (10)$$

unde: $x = \frac{hc}{k_B \lambda_m T}$ și $\lambda_m T = b$. (11)

În expresia (10), se înlocuiește $x = 5 - \eta$ și se obține:

$$5 \exp[-5] \exp[\eta] = \bar{\eta} \quad (12)$$

Dacă $\eta \ll 1$, atunci $\exp[\eta] \approx 1 + \eta$ și rezultă:

$$\eta_0 = \frac{1}{\frac{1}{5} \exp[5] - 1} \approx 0,035; \quad (13)$$

$$x_0 = 5 - \eta_0 = 4,965 \quad (14)$$

Din expresia (11) se obține:

$$b = \lambda_m T = \frac{hc}{k_B x_0} \approx 2,89 \cdot 10^3 \text{ m}\cdot\text{K}. \quad (15)$$

2. Natura corpusculară a luminii

2.1. Radiația X de frânare

Natura corpusculară a radiației este confirmată și de existența unei lungimi de undă limită pentru radiația X de frânare.

Radiațiile X sunt produse atunci când țintele solide sunt bombardate cu electroni rapizi. În figura 1.5. este prezentat un tub de radiații X. Catodul C încălzit, este o sursă de electroni produși prin efect termoelectric. Cilindrul E este introdus pentru focalizarea fascicolului. Anodul A este anticatodul ce reprezintă ținta și este confecționat dintr-un metal greu (W, Cu, Pt etc.). Electronii emiși de catod sunt accelerați de potențialul existent între catod și anticatod. Atunci când electronii cad pe țintă cea mai mare parte a energiei lor este eliberată sub formă de căldură. O mică parte a energiei (1-3%) este transformată în radiație. Pentru răcirea catodului, acesta este prevăzut cu canale prin care circulă un lichid de răcire (apă sau ulei).

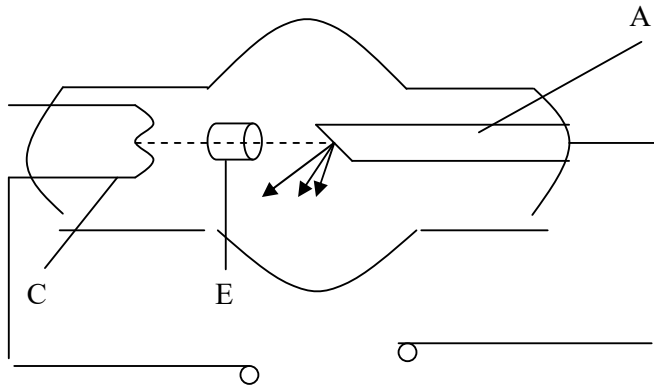


Fig. 1.5. Montajul experimental pentru studiul radiației X de frânare

Dacă tensiunea dintre catod și anticatod este U , electronii sunt accelerați căpătând energia eU . Pătrunzând în anticatod, electronii sunt puternic decelerați și devin surse de radiație. Ca urmare în exteriorul anticatodului este detectată radiația X de frânare, având un spectru continuu. Există de asemenea, o radiație având spectrul format din linii numită radiație X caracteristică, obținută ca urmare a excitării electronilor din păturile inferioare ale atomilor din țintă. Vom analiza în continuare doar radiația X de frânare. În figura 1.6 sunt înfățișate curbele experimentale care arată cum este distribuită pe lungimea de undă puterea radiației de frânare pentru diferite valori ale tensiunii U .

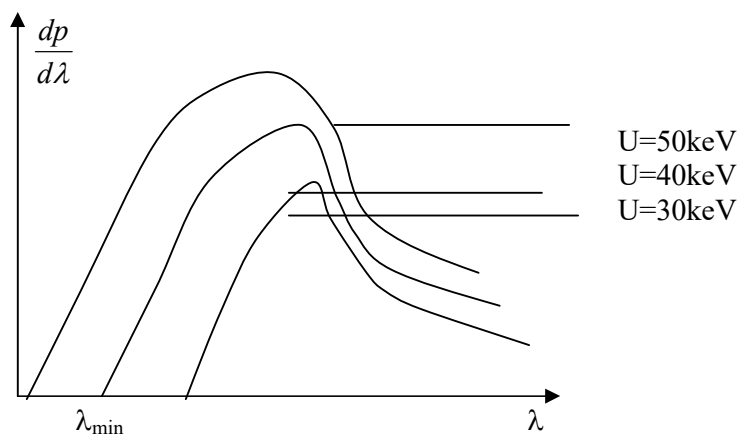


Fig. 1.6

În concordanță cu teoria electromagnetismului clasic, când un electron este decelerat, va apare radiație având toate lungimile de undă de la zero la infinit.

Rezultatele experimentale prezentate în figura 1.6 arată că teoria este infirmată, deoarece există o lungime de undă minimă (o frecvență maximă) asociată tensiunii de accelerare, dată de relația:

$$\lambda = \frac{12390}{U} \quad (2.1)$$

unde U este în volți, iar λ în angstromi. Existența lungimii de undă minime este legată de natura cuantică a radiației. Dacă radiația se obține pe seama energiei electronului, atunci energia cuantei $\hbar\omega$ nu poate depăși energia electronului eU , deci

$$\hbar\omega \leq eU \quad (2.2)$$

Relația (1.42) permite obținerea frecvenței ω_{\max} și deci alungimii de undă minime λ_{\min} , având valoarea:

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi c}{\omega_{\max}} = \frac{(2\pi\hbar c / e)}{U} \quad (2.3)$$

Determinând valoarea lui \hbar din ecuațiile (2.1) și (2.3) se obține un rezultat foarte precis .

2.2 Efectul fotoelectric

Prin efect fotoelectric se înțelege fenomenul de emisie a electronilor de către o substanță sub acțiunea luminii. Fenomenul a fost descoperit de fizicianul german Heinrich Hertz în 1887. El a observat că o descărcare care se produce între doi electrozi poate avea loc mult mai ușor dacă unul dintre electrozi este iluminat cu un fascicul de raze ultraviolete.

Dispozitivul experimental este reprezentat în figura 1.7.

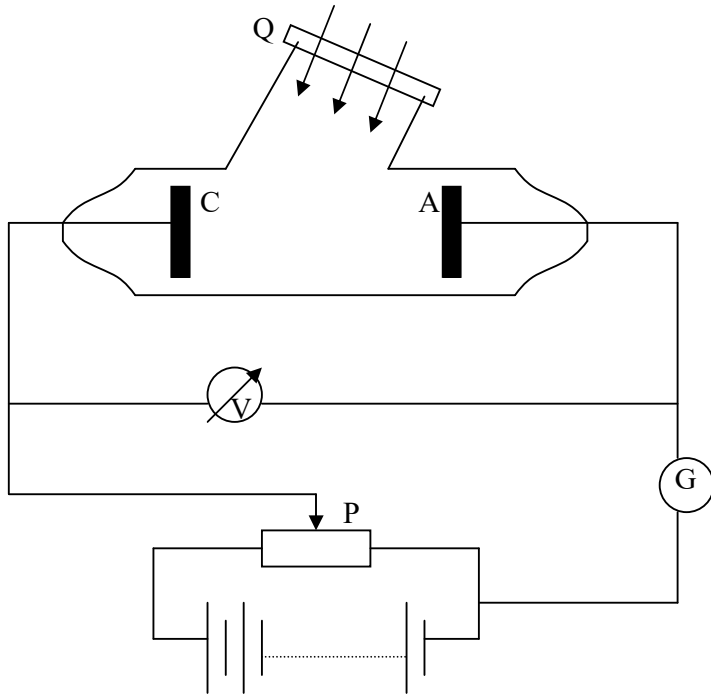


Fig 1.7 Dispozitivul experimental folosit la studiul efectului fotoelectric

Lumina care pătrunde prin fereastra de cuarț Q, cade asupra catodului C. Electronii emiși în urma efectului fotoelectric se mișcă sub acțiunea câmpului electric spre anodul A. În circuit apare un fotocurent, care este măsurat cu galvanometrul G. Tensiunea dintre anod și catod poate fi variată cu potențiometrul P.

Se obțin următoarele rezultate experimentale, care reprezintă legile experimentale ale efectului fotoelectric:

- a) Dacă se măsoară intensitatea curentului electric ca funcție de tensiunea dintre electrozi la $\omega = ct$, luând fluxul Φ ca parametru se obține o proporționalitate între curentul de saturație și fluxul luminos ce cade pe catodul celulei

$$I_s = C_1 \Phi \quad (2.4)$$

În figura 1.8 se prezintă evoluția fotocurenților ca funcție de tensiune luând luând fluxul ca parametru.

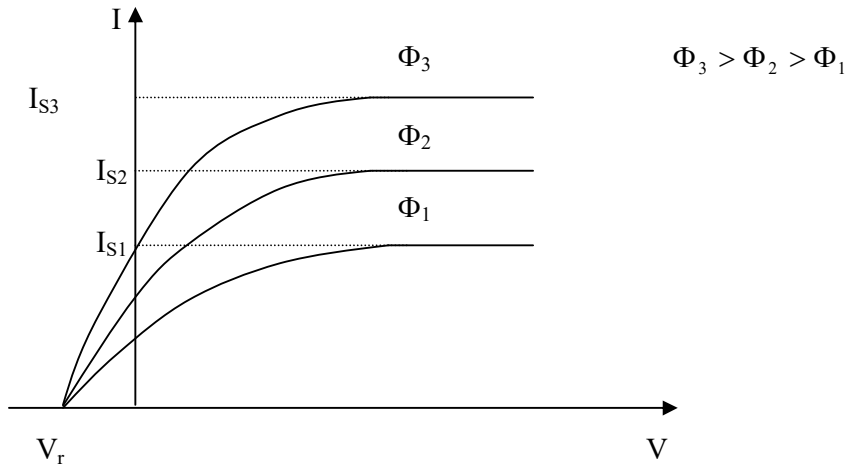


Fig 1.8 Evoluția fotocurentului în funcție de tensiune pentru diferite fluxuri de lumina

În figura 1.8 se observă că anularea tensiunii dintre anod și catod nu conduce la anularea fotocurentului. Acesta se anulează pentru o valoare negativă V_r a tensiunii, în această situație electronii sunt frânați și nu mai pot ajunge la catod.

- b) Menținând fluxul care cade pe catod constant și variind frecvența se obține rezultatul prezentat în figura 1.9, unde se vede că la creșterea frecvenței luminii are loc o scădere a tensiunii de frânare.

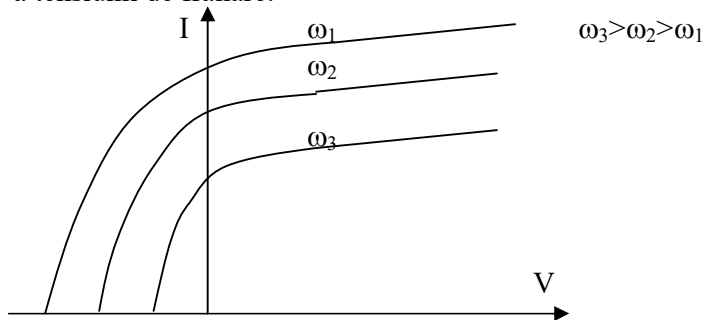


Fig. 1.9 Evoluția fotocurentului în funcție de tensiune pentru diferite valori ale frecvenței

- c) Experiența arată că există o frecvență limită sub care efectul fotoelectric nu se produce. Reprezentarea grafică a tensiunii de frânare ca funcție de frecvență este prezentată în figura 1.10. În figură ω_p reprezintă frecvența de prag, sub care efectul fotoelectric nu se produce.

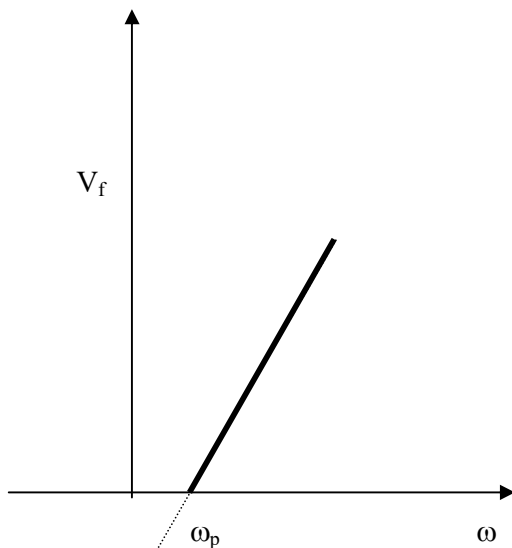


Fig. 1.10 Dependența tensiunii de franare în funcție de frecvența luminii. ω_p reprezintă frecvența de prag (anulare a fotocurentului)

- d) Efectul fotoelectric este practic instantaneu, timpul dintre momentul iluminării și cel al apariției fotocurentului fiind inferior lui $10^{-8} s$. Încercând să explice rezultatele experimentale prezentate mai sus, fizica clasică s-a aflat în fața unor bariere de natură necunoscută. Astfel electronii aflați în păturile superficiale ale atomilor sunt accelerați sub influența undelor luminoase, iar în momentul acumulării unei energii suficient de mari, ei vor fi eliberați indiferent de frecvența radiației, lucru care în realitate nu se petrece.

În cadrul teoriei clasice se consideră că energia este distribuită uniform pe suprafața de undă, ceea ce ar însemna că timpul în care electronul ar acumula suficientă energie pentru a părăsi metalul ar fi foarte mare, fapt ce contrazice realitatea.

Rezultatele experimentale obținute asupra efectului fotoelectric pot fi explicate ușor dacă se admite ipoteza lui Einstein (1905), care presupune că efectul fotoelectric se produce ca urmare a interacției dintre doi corpusculi foton-electron (cu anihilarea fotonului), fotonul fiind cuanta elementală a undelor electromagnetice. Pe baza acestei ipoteze se poate scrie ecuația bilanțului energetic ca urmare a ciocnirii foton-electron:

$$\hbar\omega = A + \frac{mv^2}{2} \quad (2.5)$$

unde $\hbar\omega$ este energia fotonului, A este lucrul de extracție al metalului, iar $\frac{mv^2}{2}$ reprezintă energia cinetică a fotoelectronului emis în urma interacției cu fotonul.

Efectul fotoelectric și lucrul de extracție depind puternic de suprafața metalului (în particular de oxizii și de substanțele absorbite de ea). Din acest motiv, formula lui Einstein nu a putut fi verificată pentru un lung timp.

Relația (2.5) a fost verificată cu o bună precizie de către R. Millikan (1916), care a descris un aparat în care suprafețele erau curățate în vid, după care au fost determinate lucrul de extracție și dependența energiei fotoelectronilor de frecvența luminii incidente. În ceea ce privește lucrul de extracție acesta este format din lucrul de extracție al electronului din atom și din lucrul necesar electronului pentru a părăsi suprafața substanței.

Remarcăm că în cadrul efectului fotoelectric prezentat mai sus electronul interacționează cu un singur foton. Descoperirea sistemelor care emit lumină de mare intensitate (laseri) a făcut posibilă apariția efectului fotoelectric bazat pe absorbția a mai multor fotoni de energie mică. În acest caz relația lui Einstein se scrie:

$$N\hbar\omega = \frac{1}{2}mv^2 + A \quad (2.6)$$

unde N este numărul fotonilor care duc la apariția unui fotoelectron.

Efectul prezentat mai sus este un efect fotoelectric extern, existând însă și substanțe care iluminate dau naștere unui curent intern (semiconductorii), în acest caz având de-a face cu un efect fotoelectric intern.

2.3 Efectul Compton

În anii 1922-1923 fizicianul american Arthur Compton a investigat difuzia radiației X pe diferite substanțe. Schema instalației experimentale utilizate de Compton este prezentată în figura 1.11.

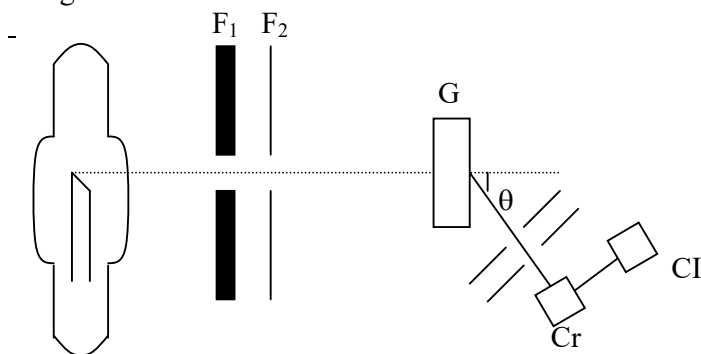


Fig. 1.11

Radiația unui tub Roentgen străbate fantele F_1 și F_2 , după care interacționează cu un cristal de grafit (G). Compoziția spectrală a radiației difuzate a fost studiată cu ajutorul unui spectrograf de raze X alcătuit dintr-un cristal Cr și o cameră de ionizare CI . Analizând radiația difuzată, Compton a constatat că pe lângă radiație cu aceeași lungime de undă ca a radiației inițiale există și radiație cu lungime de undă deplasată spre lungimi mai mari. De asemenea s-a observat că mărimea deplasării lungimii de undă a radiației depinde de unghiul de difuzare, crescând odată cu creșterea acestui unghi.

Rezultatele studiului făcut pe radiația difuzată (corespunzătoare liniei K_{α} a molibdenului) pe grafit sunt prezentate în figura 1.12

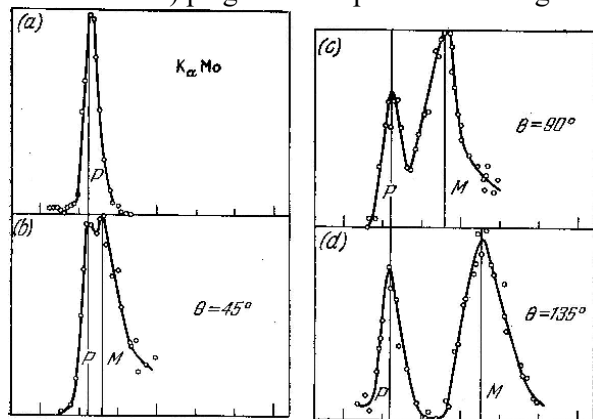


Fig. 1.12

În figura 1.13 sunt prezentate spectrele radiației X (linia K_{α} a argintului $\lambda=0,56267\text{\AA}$) difuzată sub același unghi pe diverse substanțe.

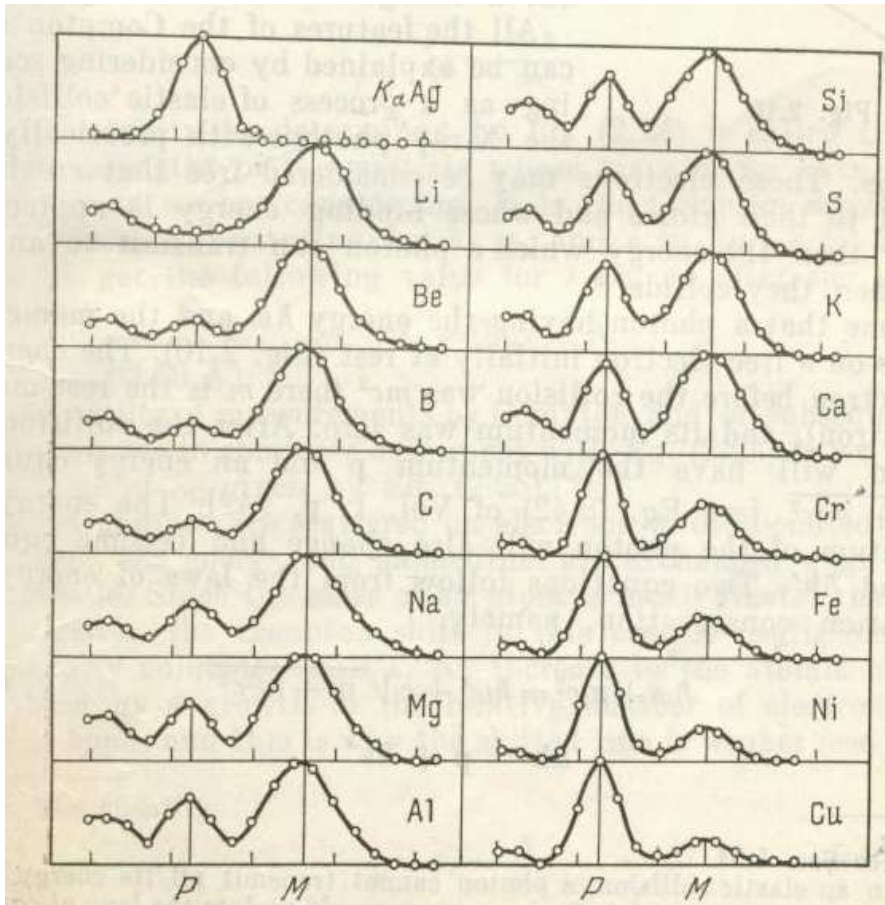


Fig. 1.13

Analizând această figură se ajunge la următoarele concluzii:

- mărimea deplasării nu depinde de natura substanței;
- cu creșterea numărului atomic al substanței care interacționează cu radiația, intensitatea radiației nedepasate crește, iar cea a radiației deplasate scade. Astfel pentru litiu radiația difuzată este practic constituită dintr-o singură lungime de undă deplasată, iar pentru cupru intensitatea radiației deplasate este foarte scăzută față de cea a radiației nedepasate.

Caracteristicile efectului Compton pot fi explicate dacă se admite că procesul de difuzie a radiației X se produce ca urmare a ciocnirii elastice a fotonilor ce alcătuiesc radiația cu electronii practic liberi ai substanței. Electronii pot fi considerați liberi sunt electroni slab legați de atom dacă energia lor de legătură este mult mai mică decât energia pe care fotonul o poate transmite electronului pe care îl ciocnește.

Presupunând că între foton și electron are loc o ciocnire elastică vom scrie în continuare legile de conservare pentru energie și impuls, considerând că un foton cu impulsul inițial $\hbar\vec{k}$ și energia $\hbar\omega$ ciocnește un electron aflat în repaus, cu energia mc^2 (cazul relativist). După ciocnire fotonul va avea impulsul $\hbar\vec{k}'$ și energia $\hbar\omega'$, iar electronul se va deplasa relativist cu impulsul \vec{p} și energia $c\sqrt{p^2 + m^2c^2}$. Putem scrie conform figurii 1.14 :

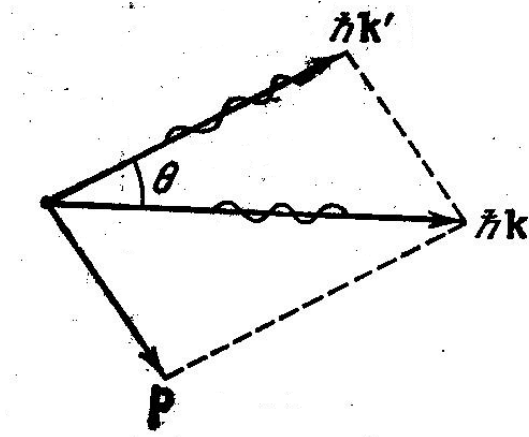


Fig. 1.14 Diagrama impulsurilor fotonilor incident și împrăștiat și respectiv al electronului eliberat de radiația X.

$$\hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + c\sqrt{p^2 + m^2c^2} \quad (2.7)$$

$$\hbar\vec{k} = \vec{p} + \hbar\vec{k}' \quad (2.8)$$

Împărțind relația (2.7) la c și ținând seama că $\frac{\omega}{c} = k$ vom avea:

$$\sqrt{p^2 + m^2c^2} = \hbar(k - k') + mc$$

sau ridicând la pătrat:

$$p^2 = \hbar^2(k^2 + k'^2 - 2kk') + 2\hbar mc(k - k') \quad (2.9)$$

Ecuția (2.8) se poate scrie:

$$p^2 = \hbar^2(\vec{k} - \vec{k}')^2 = \hbar^2(k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta) \quad (2.10)$$

Comparând ecuațiile (2.9) și (2.10) obținem:

$$mc(k - k') = \hbar k k' (1 - \cos\theta) \quad (2.11)$$

Înmulțind relația (2.11) cu 2π și împărțind-o la $mckk'$, rezultă:

$$\frac{2\pi}{k'} - \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\theta) \quad (2.12)$$

Cum $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, relația se mai scrie

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \Lambda(1 - \cos\theta) \quad (2.13)$$

unde: $\Lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}$ este numită lungimea de undă Compton. În cazul electronului Λ are valoarea:

$$\Lambda = 0,0243\text{\AA} \quad (2.14)$$

Experiența arată că atunci când are loc interacția radiației cu electroni puternic legați în atom (cazul atomilor grei) energia și impulsul sunt schimbate cu atomul ca un întreg. Deoarece masa unui atom este mult mai mare decât aceea a electronului, schimbarea lungimii de undă este neglijabilă, în acest caz λ' coincidând cu λ .

Se poate astfel defini de o manieră calitativă raportul intensităților radiației deplasate pe baza masei atomului. În atomii ușori toți electronii au legături slabe, iar în atomii grei doar electronii periferici sunt slab legați de nucleu. Așadar cu creșterea numărului atomic și în condiții identice, intensitatea radiației deplasate va scădea în timp ce aceea a radiației nedepasate va crește. Aceste rezultate coincid cu cele observate în figura 1.13.

Probleme

2.1. Suprafața unui metal oarecare este iluminată cu o radiație având lungimea de undă de 3500 Å. Alegând o anumită diferență de potențial de frânare se ‘taie’ fotocurentul.

Modificând lungimea de undă a luminii cu 500 Å, diferența de potențial de frânare a trebuit să fie mărită cu $\Delta V = 0,59V$ pentru a ‘taia’ din nou fotocurentul. Considerând cunoscute constanta lui Planck $h = 6,65 \cdot 10^{-34} Js$ și viteza luminii în vid, $c \approx 3 \cdot 10^8 ms^{-1}$, să se determine sarcina electronului și lucrul de ieșire al electronului din metal, considerând că $V = 3\Delta V$

Rezolvare:

Relația lui Einstein, în cele două cazuri, se scrie :

$$\frac{hc}{\lambda} = \varepsilon_{extr} + e(V + \Delta V), \quad (1)$$

$$\frac{hc}{\lambda - \Delta\lambda} = \varepsilon_{extr} + e(V + \Delta V). \quad (2)$$

Scăzând expresia (1) din expresia (2), rezulta :

$$e \frac{h \cdot c \cdot \Delta\lambda}{\lambda(\lambda - \Delta\lambda) \cdot \Delta V} = 1,6 \cdot 10^{-19} C \quad (3)$$

Introducând expresia lui e din relația (3) în ecuația (1), se obține

$$\varepsilon_{extr} = hc \frac{\lambda \cdot \Delta\lambda - \Delta\lambda(V + \Delta V)}{\lambda(\lambda - \Delta\lambda) \Delta V} = hc \frac{\lambda - 4\Delta\lambda}{\lambda(\lambda - \Delta\lambda)} = 1,76 eV$$

2.2. O radiație γ monocromatică este trimisă pe o placă metalică foarte subțire plasată în vid și se extrag electroni care sunt supuși acțiunii unui câmp magnetic de inducție uniformă $B = 1,5 \cdot 10^{-3} T$. Să se determine energia, frecvența și lungimea de undă a radiației incidente plecând de la următoarele date: raza de curbura $R = 0,1 m$ a traiectoriilor electronice într-un plan perpendicular pe B ; lungimea de undă $\lambda_k = 0,15 \text{ \AA}$ a radiației asociate nivelului K al electronului extras, constanta lui Planck $h = 6,62 \cdot 10^{-34} Js$, viteza luminii în vid, $c \approx 3,10^8 ms^{-1}$, masa de repaus a electronului, $m_e \approx 9 \cdot 10^{-31} kg$ și sarcina electronului. Se vor neglija corecțiile relativiste.

Rezolvare:

Bilantul energiei in actiunea fotoelectrică a fotonului γ de lungime de unda λ și de frecvența ν se scrie:

$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} = \varepsilon_e + \varepsilon_c, \quad (1)$$

ε_e fiind lucrul de iesire al electronului din metal și ε_c energia cinetică a electronului.

Energia cuantei γ fiind suficientă pentru a ioniza atomul metalic smulgându-i un electron de pe nivelul K, energia necesară pentru a extrage electronul de sub acțiunea potențialului mediu al metalului este neglijabilă. Ecuația (1) devine:

$$\frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda_k} + \frac{1}{2} m_e v^2 \quad (2)$$

Viteza v a electronului de sarcină e și masă m_e se deduce din raza de curbura R care are traiectoria sa normală la câmpul magnetic de inducție B :

$$v = \frac{eBR}{m_e} = 2,7 \cdot 10^7 \text{ ms}^{-1} \quad (3)$$

Energia fotonului γ va fi:

$$\varepsilon_\gamma = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda_k} + \frac{1}{2} eBR = 1,65 \cdot 10^{-14} \text{ J} = 1,03 \cdot 10^5 \text{ eV}, \quad (4)$$

iar frecvența $\nu_\gamma = \frac{\varepsilon_\gamma}{h} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ Hz}$ (5)

și lungimea de undă :

$$\nu_\gamma = \frac{c}{\lambda} = 0,12 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0,12 \text{ \AA} \quad (6)$$

2.3 Într-o experiență de difuzie Compton a radiațiilor γ s-a observat că fotonii cercuri cu raza $r=3\text{cm}$ într-un incidenti au fost difuzați sub unghiul $\theta=30^\circ$, iar electronii de recul au descris câmp magnetic $B=9,1 \cdot 10^{-2}\text{T}$.

Să se calculeze:

- Energia transferată unui electron de recul și lungimea de undă a fotonului incident.
- Unghiul de deviație al electronului de recul.
- Presupunând că electronii de recul sunt incidenti pe un monocristal cu constanta $d=2,4 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, să se calculeze unghiul de incidență pentru care se observă maximul de ordinul zece în fasciculul de electroni difractat pe monocristal.

Rezolvare

a) electronii de recul se rotesc în câmp magnetic pe cercul de rază r cu viteza v dată de condiția:

$$\frac{mv^2}{r} = evB, \quad (1)$$

adică cu impulsul $p=mv=erB$.

Energia transferată de foton electronului de recul este:

$$\varepsilon_{\text{recul}} = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} - 1 \right) \text{ sau}$$

$$E_{recol} = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{e^2 r^2 B^2}{m_0^2 c^2}} - 1 \right) = 7,21 \cdot 10^{-16} \text{ J.} \quad (2)$$

Energia de recul mai poate fi scrisă sub forma:

$$E_{recol} = h \left(\frac{c}{\lambda_0} - \frac{c}{\lambda_0 + \Delta\lambda} \right), \text{ unde } \Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c}, \quad (3)$$

deoarece $\theta = \frac{\pi}{2}$.

Astfel, lungimea de undă a fotonului incident este egală cu:

$$\lambda_0 = \frac{h}{2m_0 c} \left(\sqrt{1 + \frac{4m_0 c^2}{E_{recol}}} - 1 \right) = 0,26 \cdot 10^{-10} \text{ m.} \quad (4)$$

b) Unghiul de deviație al electronilor de recul:

$$\text{tg } \varphi = \frac{\text{ctg } \frac{\theta}{2}}{1 + \frac{m_0 c \lambda_0}{h}} = 0,91 \text{ și } \varphi = 42^\circ 30'. \quad (5)$$

c) Lungimea de undă asociată electronilor de recul va fi egală cu:

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{e r B} = 15 \cdot 10^{-13} \text{ m.} \quad (6)$$

Din relația Bragg: $2d \sin \theta = k \lambda$,

rezultă: $\sin \theta = 0,03125$ și $\theta = 1^\circ 47'$. (7)

2.4 Intr-un efect Compton cu raze γ lungimea de undă a radiației incidente este $\lambda_0 = 2 \text{ pm}$, iar lungimea de undă asociată electronilor de recul este egală cu lungimea de undă Compton pentru electroni.

Radiațiile incidentă și difuzată cad simultan, sub incidență normală pe o rețea de difracție de lungime totală $l = 2 \text{ cm}$, fiind observate distinct în spectrul de ordinul întâi. Să se calculeze:

- Deplasarea Compton, unghiul de difuzie al fotonilor și energia cinetică a electronilor de recul.
- Constanta rețelei și ordinul maxim al spectrului observat.

Rezolvare

a) Din condiția: $\lambda_B = \lambda_C$ rezultă că:

$$\frac{h}{mv} = \frac{h}{m_0 c}, \quad (1)$$

de unde $v = \frac{m_0}{m} c = c \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$, adică:

$$v = \frac{c}{\sqrt{2}}. \quad (2)$$

Scriind legea conservării energiei,

$$\frac{hc}{\lambda_0} + m_0c^2 = \frac{hc}{\lambda_0 + \Delta\lambda} + \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \text{ rezultă:} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= \frac{m_0c\lambda_0^2 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\right)}{h\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - m_0c\lambda_0 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\right)} = \\ &= \frac{\lambda_0(\sqrt{2} - 1)}{\frac{h}{m_0c\lambda_0} - (\sqrt{2} - 1)} = 2 \cdot 10^{-14} \text{ m} \end{aligned} \quad (4)$$

Din expresia:
$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta), \quad (5)$$

Rezultă unghiul de difuzie:

$$\cos\theta = 1 - \frac{m_0c\Delta\lambda}{h} = 0,9917585 \quad \text{și } \theta = 7^\circ 22'. \quad (6)$$

Energia cinetică a electronilor de recul este egală cu $E_C = (m - m_0)c^2 =$

$$= m_0c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) = m_0c^2(\sqrt{2} - 1) = 3,357 \cdot 10^{-14} \text{ J}. \quad (7)$$

b) Radiația difuzată are lungimea de undă $\lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda$. Puterea de rezoluție a rețelei este:

$$P = \frac{\lambda_m}{\Delta\lambda} = Nk \quad (8)$$

unde N este numărul total de linii ale rețelei, iar k ordinul de difracție.

$$\text{Constanta rețelei, } d = a + b = \frac{1}{n} = \frac{1}{N}.$$

$$\text{Astfel, } P = \frac{kl}{d}, \text{ iar } \lambda_m = \frac{1}{2}(\lambda + \lambda_0) = \lambda_0 + \frac{\Delta\lambda}{2}.$$

$$\text{Deci, } d = kl \frac{\Delta\lambda}{\lambda m} = \frac{2kl\Delta\lambda}{2\lambda_0 + \Delta\lambda}.$$

În cazul problemei, $k=1$, astfel că

$$d = \frac{2l\Delta\lambda}{2\lambda_0 + \Delta\lambda} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ m}. \quad (9)$$

Ordinul maxim al spectrului se obține pentru $\theta = \frac{\pi}{2}$ în $d\sin\theta = k\lambda_0$, astfel încât

$$k_{\max} = \frac{d}{\lambda_0} = 10^8. \quad (10)$$

2.5. Intr-o experienta de difuzie Compton a radiatiilor γ s-a observat ca fotonii incidenti au fost difuzati sub unghiul $\theta = 90^\circ$, iar electronii de recul au descris cercuri cu raza $r = 3$ cm intr-un camp magnetic de inductie $B = 9,1 \cdot 10^{-2} T$.

Sa se calculeze :

- Energia transferata unui electron de recul si lungimea de unda a fotonului incident ;
- Unghiul de deviatie al electronului de recul ;
- Presupunand ca electronii de recul sunt incidenti pe un monocristal cu constanta $d = 2,4 \cdot 10^{-10} m$ sa se calculeze unghiul de electroni difractat pe monocristal.

Rezolvare:

Electronii de recul se rotesc in camp magnetic pe cercul de raza r cu viteza v data de conditia:

$$\frac{mv^2}{r} = evB, \quad (1)$$

adica cu impulsul $p = mv = erB$.

Energia transferata de foton electronului de recul este:

$$\varepsilon_{recul} = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} \right) \quad \text{sau}$$

$$\varepsilon_{recul} = m_0 c^2 \left(\sqrt{1 + \frac{e^2 r^2 B^2}{m_0^2 c^2}} - 1 \right) = 7,21 \cdot 10^{-16} J. \quad (2)$$

Energia de recul mai poate fi scrisa sub forma:

$$\varepsilon_{recul} = h \left(\frac{c}{\lambda_0} - \frac{c}{\lambda_0 + \Delta\lambda} \right), \quad \text{unde} \quad \Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c}, \quad (3)$$

Deoarece $\theta = \frac{\pi}{2}$.

Astfel, lungimea de unda a fotonului incident este egala cu:

$$\lambda_0 \frac{h}{2m_0 c} \left(\sqrt{1 + \frac{4m_0^2 c^2}{\varepsilon_{recul}}} - 1 \right) = 0,26 \cdot 10^{-10} m \quad (4)$$

b) Unghiul de deviatie al electronilor de recul:

$$tg \phi = \frac{ctg \frac{\theta}{2}}{1 + \frac{h}{m_0 c \lambda_0}} = 0,91 \quad \text{si} \quad \phi = 42^\circ 30'. \quad (5)$$

d) Lungimea de unde asociata electronilor de recul va fi egala cu:

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{erB} = 15 \cdot 10^{-13} m \quad (6)$$

Din relatia Bragg: $2d \sin \theta = k\lambda$, (7)

Rezulta : $\theta = 0,03125$ si $\theta = 1^\circ 47'$

3. Fizica atomica clasica

3.1. Regularități ale spectrului atomic.

Radiația atomilor care nu interacționează unul cu altul (atomi în stare gazoasă) se prezintă sub forma unor linii discrete, caracteristice elementului. Totalitatea liniilor emise de un atom formează un spectru, numit spectru atomic. Un spectru poate fi constituit din mai multe serii spectrale. Prin serie spectrală se înțelege o submulțime de linii emise de un atom, ale căror frecvențe pot fi deduse pe baza aceleiași formule și care prezintă proprietăți identice în ceea ce privește despicarea liniilor în câmp magnetic sau în câmp electric.

Prima serie spectrală a fost observată de elevul J. Balmer în 1885, care a arătat că lungimile celor patru radiații vizibile ale hidrogenului, notate cu H_{α} , H_{β} , H_{γ} și H_{δ} pot fi obținute cu relația:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad n=3,4,5\dots \quad (3.1)$$

unde λ_0 este o constantă egală cu $3645,6 \cdot 10^{-10} m$. Scriind relația (3.1) prin

înlocuirea lungimii de undă cu frecvența ω se obține:

$$\omega = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n=3,4,5\dots \quad (3.2)$$

unde R se numește constanta Rydberg și are valoarea:

$$R = 2,07 \times 10^{16} \text{ rad} / s.$$

Relația (3.2) poartă numele de formula lui Balmer și corespunde seriilor de linii spectrale din spectrul vizibil.

Investigațiile ulterioare au pus în evidență existența altor serii spectrale în spectrul invizibil. Liniile acestor serii pot fi reprezentate prin relațiile:

$$\omega = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n=2,3,4\dots \quad (3.3)$$

Relația (3.4) descrie liniile care formează seria Lyman, linii ce sunt plasate în zona de ultraviolet.

Există, de asemenea, trei serii în regiunea de infraroșu date de relațiile:

- seria Paschen:

$$\omega = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n=4,5,6\dots \quad (3.5)$$

- seria Brackett:

$$\omega = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n=5,6,7\dots \quad (3.6)$$

-seria Phund:

$$\omega = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=6,7,8\dots \quad (3.7)$$

Analizând frecvențele liniilor din spectrul atomului de hidrogen, obținute pe baza relațiilor (3.2)-(3.7), se poate trage concluzia că liniile spectrale ale atomului de hidrogen pot fi deduse pe baza unei singure relații, de forma:

$$\omega_{mn} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.8)$$

unde m ia valori între 1 și 5. Relația (3.8) reprezintă formula generalizată a lui Balmer. Se observă că atunci când n crește, frecvența liniilor seriei tinde către valoarea $\frac{R}{m^2}$, numită limita seriei.

Studiind spectrele sitor atomi s-a observat că frecvențele liniilor în acest caz pot fi reprezentate ca diferențe între doi termeni:

$$\omega = T_1(m) - T_2(n) \quad (3.9)$$

Termenii $T(m)$ și $T(n)$ se numesc termeni spectrali. Termenul $T(n)$ are o formă mai complicată decât la atomul de hidrogen.

3.2. Modelul nuclear al atomului

Modelul nuclear al atomului a fost elaborat de savantul englez E. Rutherford ca urmare a rezultatelor pe care el și colaboratorii săi le-au obținut în experiențele de difuzie a particulelor α atunci când acestea străbat foițe metalice.

Schema montajului experimental folosit este prezentată în figura 1.14.

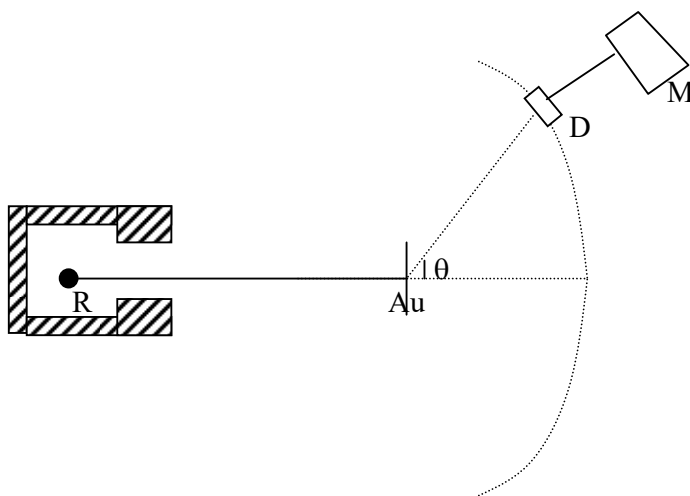


Fig. 1.14 Montajul experimental utilizat pentru studiul particulelor α ce interacționează cu o foaie de aur.

Un fascicul îngust de particule α (nuclee de He cu două sarcini pozitive) emise de substanța radioactivă R sunt trimise pe o foaie fină de aur(Au) . La trecerea prin foaie particulele sunt deviate de la direcția inițială a mișcării cu diferite unghiuri θ . Particulele difuzate ating un detector de ZnS, producându-se scintilații, care pot fi observate cu ajutorul microscopului M. Microscopul și detectorul au putut fi rotite în jurul unei axe ce trece prin centrul foii de metal, fiind astfel posibilă poziționarea sub orice unghi θ . Aparatul a fost plasat într-o încălț vidată, pentru a exclude difuzia particulelor α datorită ciocnirilor cu moleculele de aer.

Ca urmare a interacției fasciculului cu foaia metalică s-a observat că unele particule au fost deviate cu unghiuri foarte mari (aproape 180°). Analizând rezultatele experimentale, Rutherford a ajuns la concluzia că o deviere atât de mare a particulelor este posibilă doar dacă există un câmp electric puternic în interiorul atomului, care este produs de a sarcină încărcată asociată cu o masă mare concentrată într-un mic volum. Pe baza acestei concluzii, Rutherford a propus în 1911 un model nuclear al atomului. Conform acestui model un atom este un sistem de sarcini al căror centru este un nucleu pozitiv greu de sarcină Ze , având dimensiuni mai mici de 10^{-12} cm, în jurul nucleului existând Z electroni distribuți în întreg volumul ocupat de atom. Aproape toată masa atomului este concentrată în nucleu.

Pornind de la aceste presupuneri, Rutherford a dezvoltat o teorie cantitativă a difuziei particulelor α și a dedus o formulă pentru distribuția particulelor α difuzate în funcție de valorile unghiului θ . Prezentăm în continuare deducerea acestei formule, utilizând figura 1.15.

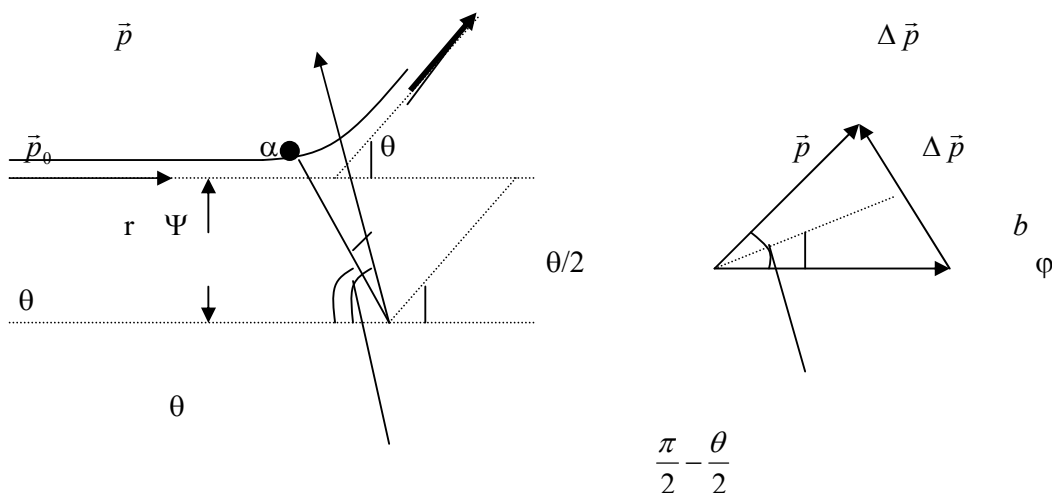


Fig. 1.15 Interacția dintre particula α și nucleu (Rutherford)

Deflexia particulei α nu poate avea loc ca urmare a interacției cu electronii, deoarece masa electronilor este cu patru ordine de mărime mai mică decât masa particulei α . Deflexia se produce ca urmare a interacției dintre particulă și nucleul atomului. Între particula α aflată în apropierea nucleului și nucleu se exercită forța Coulomb

$$F = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3.10)$$

Exercitându-se asupra particulei aflată în mișcare, traiectoria acesteia va fi o hiperbolă (vezi mișcarea particulei în câmp central). Presupunem că unghiul dintre asimptotele hiperbolei este θ . Acest unghi caracterizează devierea particulei de la direcția inițială. Distanța b de la

nucleu la direcția inițială a particulei se numește parametru de impact. Particulele ale căror traiectorii sunt mai apropiate de nucleu (b este mai mic) sunt deviate mai puternic. Între b și θ există o relație simplă ce va fi dedusă în continuare.

Deoarece mărimea impulsului particulei după ce a fost deviată rămâne nemodificată ($p=p_0$) putem scrie:

$$\Delta p = 2p_0 \sin \frac{\theta}{2} = 2m_\alpha v \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.11)$$

unde m_α este masa particulei α , iar v este viteza inițială a acesteia. Pe baza legii lui Newton se poate scrie:

$$\Delta \vec{p} = \int \vec{F} dt \quad (3.12)$$

Proiectând vectorii din ecuația (1.65) pe direcția lui $\Delta \vec{p}$ vom avea:

$$\Delta p = \int F_{\Delta p} dt \quad (3.13)$$

În figura 1.15 se vede că:

$$F_{\Delta p} = F \cos \Psi = F \sin \left(\varphi + \frac{\theta}{2} \right) = \frac{2Ze^2}{r^2} \sin \left(\varphi + \frac{\theta}{2} \right) \quad (3.14)$$

Introducând (3.14) în (3.13) și înlocuind dt cu $\frac{d\varphi}{\varphi}$ rezultă:
$$\Delta p = 2Ze^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}-\theta} \frac{\sin \left(\varphi + \frac{\theta}{2} \right) d\varphi}{r^2 \varphi^2} \quad (3.15)$$

Dar cum $L = m_\alpha r^2 \dot{\varphi}$ este mărimea momentului cinetic al particulei α în raport cu nucleul care o difuzează, iar forța ce se exercită asupra particulei este una centrală, putem spune că momentul cinetic rămâne constant, iar mărimea sa este cea inițială $L_0 = m_\alpha vb$.

Înlocuim $r^2 \dot{\varphi}$ cu vb în relația (3.15) și în urma integrării se obține:

$$\Delta p = \frac{2Ze^2}{vb} 2 \cos \frac{\theta}{2} \quad (3.16)$$

Comparând (3.16) și (3.15) se obține:

$$2m_\alpha v \sin \frac{\theta}{2} = \frac{2Ze^2}{vb} 2 \cos \frac{\theta}{2} \quad (3.17)$$

Deci:

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} = \frac{m_\alpha v^2}{2Ze^2} b \quad (3.18)$$

Considerăm un strat de difuzie foarte subțire astfel încât fiecare particulă ce o străbate trece doar prin apropierea unui singur nucleu. O particulă difuzată în interiorul unghiului θ și $\theta+d\theta$, va avea parametrul de impact cuprins între limitele b și $b+db$ așa cum se vede în figura 1.16.

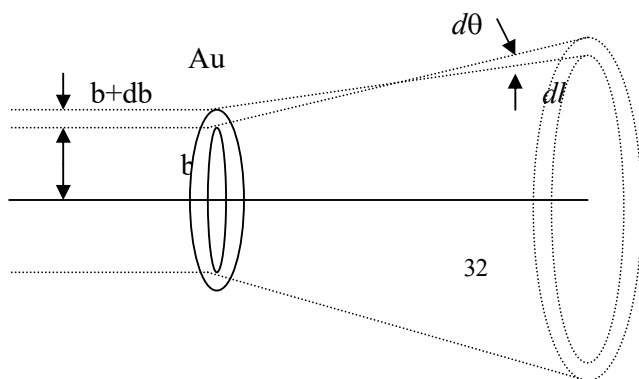


Fig. 1.16 Imprastierea particulelor α în urma interacției cu foita de Au

Fig 1.16

Pornind de la relația (3.18), prin diferențiere se obține:

$$-\frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \frac{d\theta}{2} = \frac{m_\alpha v^2}{2Ze^2} db \quad (3.19)$$

Semnul minus în (3.19) este legat de faptul că odată cu scăderea unghiului de deviere ($d\theta < 0$), parametrul de impact crește ($db > 0$).

Notăm aria fascicului de particule cu S . Numărul de atomi ai foiței, aflat în fața fascicului va fi nSa , unde n este numărul de atomi din unitatea de volum, iar a este grosimea foiței. Dacă particulele α sunt distribuite uniform pe secțiunea transversală a fascicului și numărul lor este foarte mare, atunci numărul relativ de particule α care trec în apropierea unui nucleu în lungul unei traiectorii cu parametrul

de impact de la b la $b+db$ va fi:

$$\frac{dN_\theta}{N} = \frac{nSa2\pi b db}{S} = na2\pi b db \quad (3.20)$$

În această expresie dN_θ este fluxul total de particule din fascicul. Folosind θ și $d\theta$ în locul lui b și db pe baza relației (3.19) relația (3.20) devine:

$$\frac{dN_\theta}{N} = na \left(\frac{2Ze^2}{m_\alpha v^2} \right)^2 2\pi \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2} \cdot \frac{1}{\sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)} \frac{d\theta}{2} \quad (3.21)$$

Transformând $\operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}$ relația se mai scrie:

$$\frac{dN_\theta}{N} = na \left(\frac{2Ze^2}{m_\alpha v^2} \right)^2 \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4 \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right)} \quad (3.22)$$

Relația (3.22) reprezintă formula lui Rutherford pentru difuzia particulelor α . Această formulă a fost verificată experimental de Rutherford și colaboratorii săi, numărând scintilațiile observate la diferite unghiuri θ , pentru intervale de timp identice. Interacția de tip Coulomb, admisă la deducerea formulei (3.22), s-a dovedit a fi în concordanță cu rezultatele experimentale, întrucât particulele care s-au aflat pe direcția nucleului au fost deviate cu un unghi de 180° , după ce s-au apropiat de nucleu la o distanță dată de relația:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\min}} \quad (3.23)$$

unde r_{\min} reprezintă distanța dintre particulă și centrul nucleului și a fost de aproximativ $6 \cdot 10^{-12}$ cm.

Modelul nuclear contrazice legile mecanicii și electrodinamicii clasice. Astfel, deoarece un sistem de sarcini staționare nu se poate afla în echilibru stabil (teorema lui Earnshaw) Rutherford a renunțat la modelul static al atomului și a admis că electronii se mișcă în jurul nucleului pe traiectorii curbe. În acest caz electronul se va mișca decelerat sub influența forței centripete și în concordanță cu legile electrodinamicii clasice el va emite continuu unde electromagnetice. Procesul de emisie duce la pierderea energiei ceea ce înseamnă că electronul va cădea pe nucleu. Experiența arată că atomii reprezintă sisteme deosebit de stabile, eliminând ipoteza de mai sus

3.3 Teoria lui Bohr asupra atomului

3.3.1 Modelul planetar al atomului și postulatele cuantice ale lui Bohr

În cadrul modelului nuclear al lui Rutherford, atomul a fost presupus ca fiind alcătuit dintr-o sarcină pozitivă grea și din electroni care se află în jurul acesteia. Așa cum am arătat modelul nuclear al atomului în combinație cu mecanica clasică și electrodinamica clasică au fost incapabile să explice stabilitatea atomului și natura spectrului atomic.

Am văzut de asemenea că deducerea formulei corecte (Planck) pentru radiația termică de echilibru s-a făcut pe baza ipotezei existenței stărilor staționare stabile ale oscilatorilor ce alcătuiesc corpul negru.

Pornind de la rezultatele de mai sus Bohr a introdus două ipoteze în totală contradicție cu legile mecanicii clasice. Acestea sunt cunoscute ca postulatele lui Bohr și au următoarele formulări:

1. Atomii și sistemele atomice nu se pot găsi un timp îndelungat decât în stări bine definite, numite stări staționare în care nu emit și nu absorb energie. În aceste stări sistemele atomice posedă un șir discret de energii: $E_1, E_2 \dots E_n$. Aceste stări se caracterizează prin stabilitatea lor. În interiorul atomilor, electronii se deplasează pe orbite bine definite, date de o relație de cuantificare a momentului cinetic:

$$l = n \hbar,$$

unde l reprezintă mărimea momentului cinetic: $l = mvr$, iar $n = 1, 2, \dots$

2. Orice trecere de la o stare staționară E_m la o altă stare E_n poate fi însoțită de absorbție sau de emisie de radiație, această radiație este monocromatică și frecvența sa este dată de relația:

$$\hbar \omega = E_n - E_m \quad (3.24)$$

Aceste postulate sunt în contradicție cu rezultatele electrodinamicii clasice, întrucât pe baza primului postulat, deși electronii din atomi execută mișcări de rotație, decelerate, iar conform cu cel de-al doilea postulat frecvențele emise nu au nimic comun cu frecvențele mișcărilor periodice ale electronilor.

3.3.2. Experiența lui Franck și Hertz

Existența nivelelor discrete de energie a fost confirmată prin șirul de experiențe efectuate în 1914 de fizicienii J. Franck și G. Hertz. În figura 1.17 este înfățișată diagrama aparatului utilizat de ei.

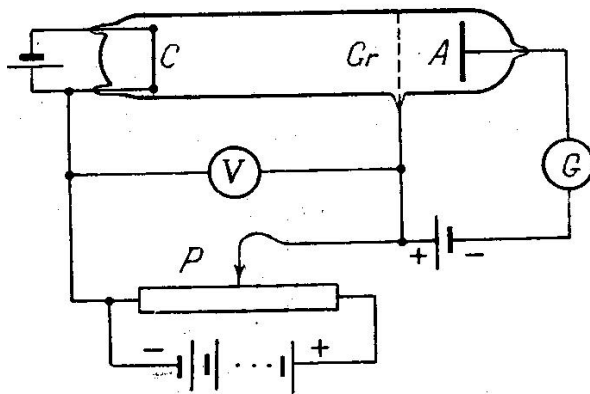


Fig 1.17

Tubul T umplut cu vapori de mercur, la o presiune scăzută (în jur de 1 mm Hg) a fost prevăzut cu trei electrozi. Electronii eliberați de catod (C) prin emisie termoelectronică au fost accelerați cu diferența de potențial U aplicată între catod și grilă (Gr). Diferența de potențial a fost variată cu potențiometrul P. Un câmp electric slab (corespunzător unei diferențe de potențial de 0,5V) a fost creat între grilă și anod (A). A fost studiată relația existentă între curentul I alcătuit din electronii colectați de anod și tensiunea U , măsurate galvanometrul G și respectiv voltmetrul V. Evoluția curentului în funcție de tensiunea U este prezentată în figura 1.18.

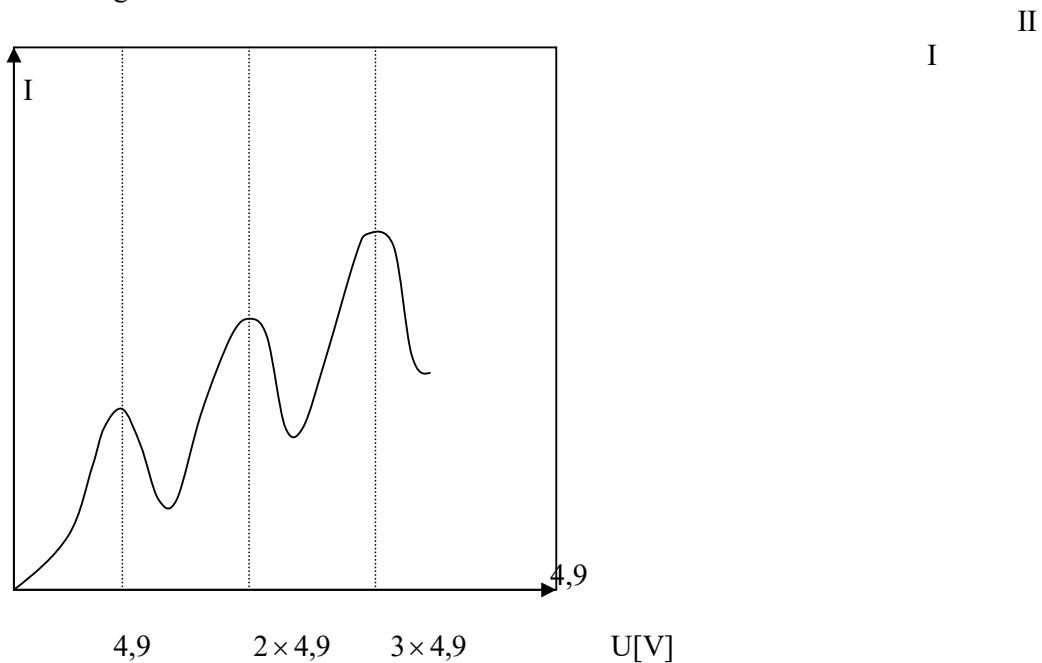


Fig. 1.18 Evoluția fotocurentului cu tensiunea ca urmare a ciocnirilor dintre electronii din descarcare și atomii de mercur

Așa cum se vede în figura 1.18, pornind de la 0V curentul are o creștere monotonă până la 4,9V, după care are loc o scădere urmată de o nouă creștere monotonă până la 9,8V.

Evoluția se repetă, maximele următoare ale curentului fiind atinse pentru multiplii ai tensiunii de 4,9V. O astfel de formă a curbei este explicată prin faptul că posedând nivele discrete de energie $E_1, E_2 \dots E_n$, atomii pot absorbi energie doar sub forma:

$$\Delta E_1 = E_2 - E_1, \quad \Delta E_2 = E_3 - E_2, \dots \quad \text{etc.}$$

Cât timp energia electronului emis de catod și accelerat cu tensiunea U este mai mică decât ΔE_1 ciocnirile între electroni și atomii de mercur sunt de natură elastică: deoarece masa electronului este mult mai mică decât masa atomului, iar energia electronului nu suferă o virtuală schimbare ca urmare a ciocnirilor. O parte a electronilor sunt captați de grilă, iar alții străbat grila și ajung la anod, producând curentul I , ce străbate galvanometrul G . Pentru tensiuni mai mari fracția de electroni ce ajunge la anod va fi mai mare și ca urmare curentul I va fi mai mare.

Când energia acumulată de electron în spațiul dintre catod și grilă atinge valoarea ΔE_1 , ciocnirile devin inelastice și electronii vor transfera energia ΔE_1 atomilor pe care îi ciocnesc și ei vor continua să se deplaseze cu o viteză mai mică. Ca urmare numărul de electroni ce ajung la anod este mai mic. Crescând tensiunea U , electronii vor căpăta o energie egală cu ΔE_1 mai aproape de catod, după care vor fi accelerați din nou. În cazul tensiunii de 9,8V, electronii au suferit două ciocniri inelastice în urma cărora au cedat energia atomilor. Prima la jumătatea distanței dintre catod și grilă și cea de-a doua în apropierea grilei. La o tensiune mai mare sunt posibile trei ciocniri inelastice ale electronului cu atomul, ceea ce conduce la apariția unui maxim la $3 \times 4,9 \text{ V}$.

În acest fel experiența Franck și Hertz pune în evidență existența nivelelor de energie discrete ale atomului.

3.3.3 Cuantificarea orbitelor circulare

Postulatele lui Bohr sunt în totală contradicție cu conceptele mecanicii clasice. Această contradicție este legată de faptul că în timp ce postulatele lui Bohr admit existența unui număr de nivele de energie discrete asociate în atom cu a serie de orbite cuantice, în cazul mecanicii clasice se obține o mulțime continuă de orbite.

Pornind de la ipoteza lui Planck, conform căreia pentru energia unui oscilator sunt posibile acele stări a căror energie este:

$$E_n = n\hbar\omega \quad (n \text{ fiind întreg}),$$

Bohr a obținut condiția de existență a orbitelor staționare.

Considerând coordonatele canonic-conjugate ale oscilatorului, coordonatele q și impulsul p , energia oscilatorului se scrie:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = n\hbar\omega \quad (3.25)$$

de unde rezultă:

$$\frac{q^2}{2n\hbar / m\omega} + \frac{p^2}{2mn\hbar\omega} = 1 \quad (3.26)$$

Planul cu coordonatele q și p poartă numele de plan al fazelor și o curbă ce determină pe p ca funcție de q pentru o mișcare dată se numește traiectoria fazei. Relația (3.26) arată că traiectoria fazei unui oscilator armonic este o elipsă cu semiaxele:

$$a = \sqrt{\frac{2n\hbar}{m\omega}} \quad \text{și} \quad b = \sqrt{2mn\hbar\omega}$$

Cum aria elipsei este egală cu produsul semiaxelor multiplicat cu π , rezultă:

$$S_n = \pi ab = 2\pi\hbar n \quad (3.27)$$

Aria elipsei mai poate fi însă scrisă sub forma:

$$S_n = \oint pdq \quad (3.28)$$

Pe baza relațiilor (3.27) și (3.28) rezultă:

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n \quad (3.29)$$

Pentru un electron ce se rotește în jurul nucleului pe o orbită circulară, coordonata generalizată va fi unghiul azimutal φ , iar impulsul asociat ei va fi momentul de inerție $L = mr^2\dot{\varphi}$. Așadar pentru un electron care se deplasează pe o orbită circulară condiția (1.83) are forma:

$$\oint Ld\varphi = 2\pi\hbar n \quad (3.30)$$

Doarece forța cre se exercită asupra electronului este o forță centrală, rezultă că $L = \text{const.}$ și relația (3.30) se va scrie:

$$L = n\hbar \quad (3.31)$$

Astfel ca în concordanță cu condiția lui Bohr, dintre toate orbitele posibile ale unui electron (din punctul de vedere al mecanicii clasice) sunt posibile doar acelea pentru care momentul cinetic este un număr întreg de cînstante Planck.

3.3. 4 Teoria elementară a lui Bohr pentru atomul de hidrogen

Vom considera un electron, care se ișcă în câmpul unui nucleu atomic cu sarcina Ze (atomul este așa zis “hidrogenoid”) unde Z este un număr întreg. Pentru $Z=1$ acest sistem este reprezentat de atomul de hidrogen, pentru $Z=2$ de atomul de He^+ simplu ionizat, pentru $Z=3$ de atomul de Li^{++} , etc.

Ecuția de mișcare a electronului aflat în câmpul nucleului este:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3.32)$$

Condiția de cuantificare a orbitelor (1.85) se scrie

$$mvr = n\hbar \quad (n=1,2,\dots) \quad (3.33)$$

Eliminând viteza v din relațiile (3.32) și (3.33) se obține pentru raza r_n a orbitei n expresia:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{4\pi\epsilon_0 me^2 Z} \quad (3.34)$$

Raza primei orbite a atomului de hidrogen este cunoscută ca fiind raza Bohr. Ea are valoarea:

$$r_0 = 0,529 \cdot \text{Å} \quad (3.35)$$

Energia internă a atomului este alcătuită din energia cinetică a electronului (nucleul fiind considerat staționar) și energia potențială a electronului aflat în câmpul nucleului, deci:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3.36)$$

Substituim mv^2 din relația (3.32) în (3.36) și obținem:

$$E = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r^2} \quad (3.37)$$

Introducând în relația (3.37) expresia razei orbitei n dată de (3.34) rezultă:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (3.39)$$

unde E_n reprezintă energia electronului aflat pe nivelul n al atomului.

Atunci când un atom trece din starea n în starea m este emis un foton a cărui energie ($\hbar\omega$) va fi:

$$\hbar\omega = E_m - E_n = \frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

și deci frecvența fotonului este:

$$\omega_{mn} = \frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.40)$$

Am obținut formula lui Balmer pentru cazul atomului de hidrogen (dacă $Z=1$) unde constanta Rydberg este:

$$R_H = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^3} \quad (3.41)$$

Dacă se introduc valorile constantelor în relația (3.41) se obține o valoare în foarte bună concordanță cu rezultatele experimentale pentru constanta Rydberg. Această corespondență între valoarea teoretică teoretice și cea experimentală a lui R pune în evidență că relația (3.39) dedusă de Bohr pentru nivelele de energie ale atomului de hidrogen este corectă. Astfel se poate spune că teoria lui Bohr are un rol important în dezvoltarea teoriei atomului.

Încercările de extindere a teoriei lui Bohr la atomul de He au rămas fără rezultat.

Întrucât teoria lui Bohr are o contradicție logică internă nefiind consistentă nici cu cea cuantică ea a rămas doar o etapă de trecere în studiul fenomenelor atomice.

4. Natura ondulatorie a particulei

4.1 Ipoteza lui de Broglie

Am văzut că pentru a putea explica rezultatele experimentale obținute în cazul curentului fotoelectric și efectului Compton a fost nevoie să se admită caracterul corpuscular al radiației electromagnetice, care în acest fel are o comportare duală de undă și de corpuscul.

În anul 1924 savantul francez Louis de Broglie, a pornit de la ideea că dualitatea nu reprezintă doar o caracteristică a radiației electromagnetice și a lansat ipoteza că particulele au o comportare ondulatorie. Pe baza acestei ipoteze de Broglie a presupus că mișcarea oricărei particule este asociată cu o undă a cărei lungime de undă este:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (4.1)$$

și a cărei frecvență este dată de o relație identică cu cea care exprimă energia fotonului:

$$E = \hbar\omega.$$

Așadar particulele au o comportare duală, iar undele asociate acestora sunt unde de Broglie.. Lungimea de undă asociată particulelor poartă numele de lungime de undă de Broglie. Relația (4.1) poate fi scrisă și în funcție de vectorul de undă k , ținând seama că:

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

deci:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (4.2)$$

Conform ipotezei lui de Broglie mișcarea particulelor materiale libere este descrisă de o funcie de undă de forma:

$$\Psi = A \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] = A \exp[i(xk_x + yk_y + zk_z - \omega t)] \quad (4.3)$$

unde A este amplitudinea undei, \vec{k} - vectorul de undă, iar \vec{r} vectorul de poziție al punctului în care se află unda. Ținând seama de (4.2) putem scrie:

$$\Psi = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(xp_x + yp_y + pk_z - Et)\right] \quad (4.4)$$

Deși undele de lumină sunt asociate fotonilor în același mod în care undele de Broglie sunt asociate particulelor materiale, între cele două unde există o deosebire esențială, undele electromagnetice având în plus proprietatea că ele constau din variații în timp ale câmpurilor electrice și magnetice și astfel pot fi puse în evidență cu ajutorul antenelor.

4.2 Experiența Davisson – Germer

Între anii 1921-1923 fizicienii americani Davisson și Kunsman au observat că în cursul difuziei electronilor pe filme metalice se obține o variație pronunțată a intensității în funcție de unghiul de difuzie. Ipoteza lui de Broglie a fost confirmată în mod strălucit de experiențele efectuate în 1927 de fizicienii Davisson și Germer. Ei au studiat reflexia electronilor pe un cristal de nichel. Un fascicul îngust de electroni este dirijat spre suprafața cristalului de nichel (fig. 1.19) prelucrat la un unghi drept în raport cu diagonala celulei cristalului (planurile cristalului paralele cu suprafața pe care cad electronii sunt descrise în cristalografie prin indicii (111)).

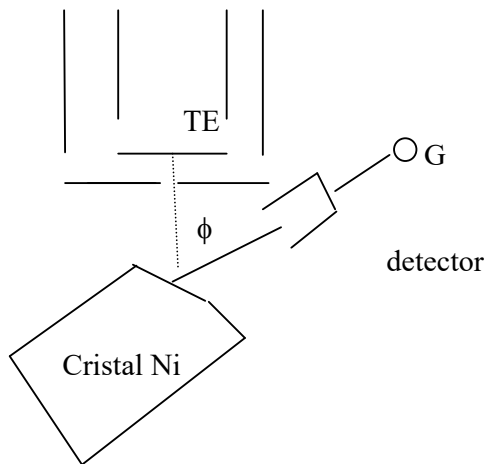


Fig 1.19 Montajul experimental utilizat pentru studiul electronilor ffractati de cristalul de Ni

Electronii reflectați sunt captati de un cilindru conectat la un galvanometru. Viteza electronilor și unghiul ϕ au fost variate. În figura 1.20 se arată dependența curentului

galvanometrului de unghiul φ la diferite energii ale electronilor. Axele verticale determină direcția razei incidente.

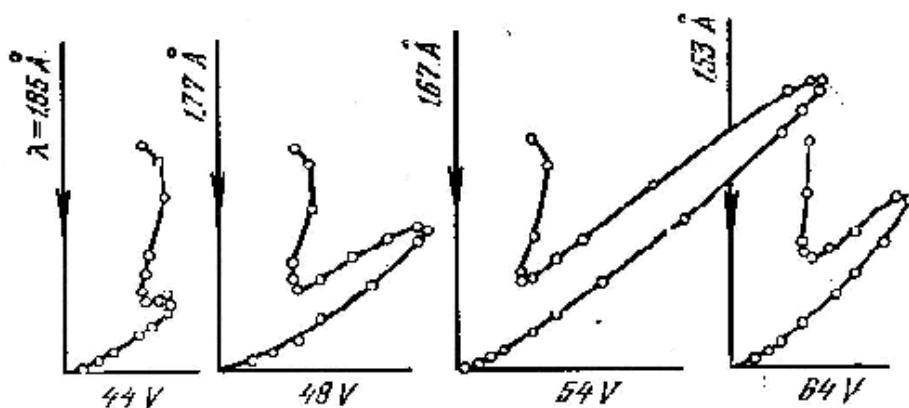


Fig. 1.20

Urmărind curbele din figura 1.20 se observă că intensitatea datorată electronilor (caracterizată prin curentul galvanometrului) este foarte intensă pentru o anumită valoare a unghiului φ . Acest unghi corespunde reflexiei unui fascicul de raze X de către un monocristal având distanța dintre planele atomice egală cu d . Maximul curentului datorat electronilor reflectați corespunde unei legi a opticii – legea lui Bragg obținută în cazul reflexiei radiației X de către cristale:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (4.5)$$

unde: $\theta = \frac{\pi}{2} - \frac{\varphi}{2}$.

Cunoscând distanța dintre planurile cristalului de nichel, $d = 0,91 \cdot 10^{-10}$ m și unghiul corespunzător primului maxim, pe baza relației (4.5) rezultă:

$$\lambda = 1,65 \text{ \AA}.$$

Acest maxim a fost obținut pentru o tensiune de accelerare de 54V. Impulsul electronilor ce cad pe monocristal pentru o tensiune U este $p = \sqrt{2meU}$, astfel că pe baza ipotezei de Broglie, lungimea de undă asociată electronilor va fi, pentru cazul considerat:

$$\lambda = \frac{12,25}{\sqrt{U}} \text{ \AA} = 1,67 \text{ \AA}.$$

Diferența de $2 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$ poate fi atribuită erorilor de măsură.

Faptul că pentru electronii accelerați s-a obținut o lungime de undă, pe baza ipotezei de Broglie, egală cu aceea obținută când electronii sunt tratați după o lege a opticii, duce la concluzia că aceștia au întradevăr o comportare ondulatorie.

Relația de Broglie se aplică nu numai electronilor ci și altor particule: protoni, neutroni, nuclee, atomi, molecule etc. Datorită, însă, masei relativ mari a acestor particule, lungimile de undă asociate sunt foarte mici, în acest fel caracterul ondulatoriu al acestora fiind greu de evidențiat.

O altă confirmare experimentală a naturii ondulatorii a fost obținută de fizicianul britanic G. Thomson, în anul 1927. Experimentul realizat de el a constatat în trimiterea unui flux de electroni accelerați, la o diferență mare de potențial asupra unei foi subțiri de metal, în

spatele căreia s-a aflat p placă fotografică. Rezultatul experienței a fost că figura de difracție obținută pe placa fotografică este similară cu aceea oținută în cazul difracției razelor X pe o foiță de aluminiu. Rezultatele experiențelor Davisson-Germer și Thomson confirmă așadar ipoteza lui de Broglie.

Problema

1. Un fascicul îngust de raze X cade pe un monocristal de NaCl. Unghiul minim la care se observă reflexia fasciculului pe fața cristalului este $\theta=4,1^\circ$. Cunoscând constanta rețelei $d=2,81\text{Å}$, să se determine valoarea tensiunii aplicate tubului de raze X.

Rezolvare:

Reflexia maximă se obține pentru acele valori ale lungimii de undă λ care satisfac relația Bragg:

$$2d\sin\theta=k\lambda. \quad (1)$$

În cazul nostru $k=1$.

În același timp pe baza ipotezei de Broglie se obține:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} \quad (2)$$

unde m este masa electronului.

Eliminând lungimea de undă λ din relațiile (1) și (2) rezultă:

$$U = \frac{h^2}{8med^2 \sin^2 \theta} = 31 \text{ kV}.$$

4. 3. Interpretarea statistică a undelor de Broglie

Microparticulele sunt definite ca particule elementare (electroni, protoni, neutroni, fotoni, precum și alte particule simple) ca și din particule complexe formate dintr-un număr relativ mic de particule elementare (atomi, molecule, nuclee etc.). Orice microparticulă combină într-un mod special proprietățile de microparticulă și de undă. O microparticulă nu este capabilă să acționeze direct asupra organelor noastre de simț (ea nu poate fi văzută sau simțită).

În cadrul fizicii clasice “a înțelege” înseamnă a forma o imagine vizuală asupra unui obiect sau proces. Acest lucru este de neconceput în cadrul fizicii cuantice. Remarcăm că dacă analizând proprietățile undei și ale particulei, o microparticulă nu se comportă nici ca o undă, nici ca o particulă. Spre deosebire de undă, microparticula este detectată ca un întreg (de exemplu nu se va observa niciodată o jumătate de electron). În același timp, o undă poate fi despătată în părți, de exemplu cu o oglindă semitransparentă.

O diferență între microparticulă și macroparticulă este aceea că în timp ce pentru o macroparticulă coordonata și impulsul pot fi cunoscute simultan, în cazul unei microparticule acest lucru nu este posibil, conceptul de traiectorie nemaifiind valabil.

Natura particulară a proprietăților unei microparticule poate fi pusă în evidență cu o deosebită claritate de următoarea experiență mentală. Presupunem un fascicul de electroni monoenergetic care cad asupra unui ecran în care sunt practicate două fante (fig. 1.21)

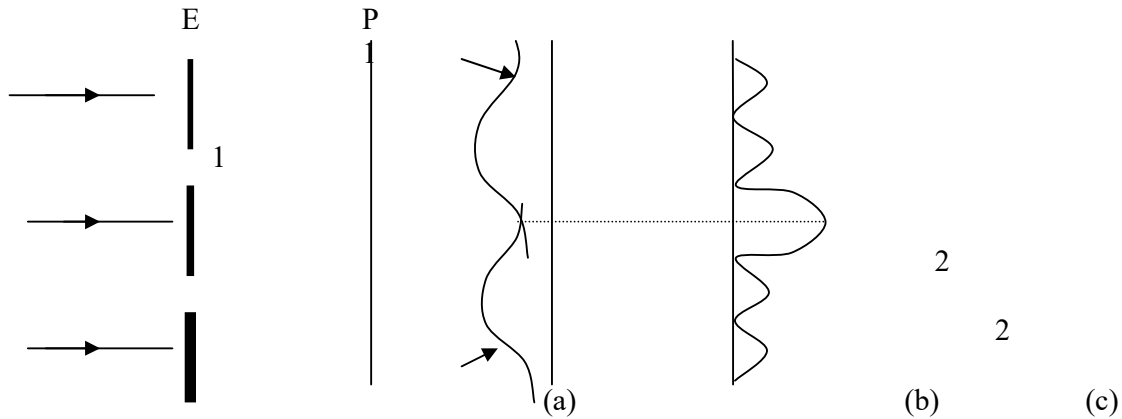


Fig. 1.21

În spatele ecranului este plasată o placă fotografică sensibilă la ciocnirile cu electronii din fascicul. La început vom închide fanta inferioară pentru un timp τ . Vom constata că înnegrirea pe placa prelucrată va avea aspectul curbei 1 din figura 1.21(b). Lăsând liberă fanta 2 și astupând-o pe cea superioară pentru același timp, urma fascicului pe placă va fi dată de curba 2. Dacă se lasă libere ambele fante asupra cărora fasciculul este trimis tot pe durata τ , figura obținută pe ecran va fi dată de curba din figura 1.21(c). Așa cum se vede, această figură nu este echivalentă cu superpoziția primelor două figuri, ci este similară cu figura de interferență obținută în dispozitivul Young, în cazul undelor coerente. Figura obținută arată că mișcarea fiecărui electron este afectată de ambele fante. Această concluzie este incompatibilă cu noțiunea pe care o avem despre traiectorie. Dacă un electron se va afla la fiecare moment de timp într-un anumit punct pe traiectorie, atunci el va trece prin una din cele două fante. Experiența arată însă că are loc o interacție a electronului cu ambele fante.

Explicația fenomenului de mai sus este simplă dacă se apelează la undele de Broglie asociate electronilor, de forma:

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

Este de remarcat faptul că funcția de undă Ψ nu are o semnificație fizică directă, în sensul că nu poate fi măsurată printr-un experiment. Experimental se poate obține probabilitatea de prezență a microparticulei la un moment dat, care are valoarea cuprinsă între limitele 0 (particula lipsește) și 1 (particula este prezentă cu certitudine). Spre deosebire de undele din fizica clasică (acustică, optică), care sunt legate de un transport de energie, undele de Broglie, asociate microparticulelor, sunt unde de probabilitate, neavând nici o legătură cu transportul de energie. Astfel funcția de undă $\Psi(\vec{r}, t)$ are o semnificație statistică, mărimea $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ determinând probabilitatea de localizare a particulei la momentul t în punctul cu vectorul de poziție $\vec{r}(x, y, z)$:

$$dP(\vec{r}, t) = P(\vec{r}, t) dV = |\Psi|^2 dV \quad (4.6)$$

unde

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi|^2 \quad (4.7)$$

Reprezintă densitatea de probabilitate asociată microparticulei.

Probabilitatea de a găsi particula la momentul t în volumul V se obține prin integrarea relației (1.100)

$$P(\vec{r}, t) = \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV \quad (4.8)$$

Funcția de undă $\Psi(\vec{r}, t)$ satisface condiția de normare, adică probabilitatea de a găsi particula undeva în spațiul finit este egală cu 1 (certitudine), deci:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (4.9)$$

Experiența arată că în anumite cazuri microparticulele se manifestă ca puncte materiale ascultând de legile mecanicii clasice și deci având o traiectorie (mișcarea electronilor în tubul catodic, urmele în camera Wilson), iar în altele manifestă proprietăți ondulatorii (tregeri prin fante). În ceea ce privește noțiunea de traiectorie se poate spune că acest concept poate fi aplicat microparticulelor dar numai cu un anumit grad de precizie. Problemele sunt aceleași ca în optică. Dacă dimensiunile barierelor sau orificiilor sunt mari în comparație cu lungimea de undă propagarea luminii are loc în lungul unor raze definite (traiectorii).

Remarcăm din nou că microparticulele nu sunt nici unde pure, nici puncte materiale și că în aceste condiții nici unul din cele două concepte nu realizează o descriere completă a comportării microparticulelor. Acestea se supun unor legi de tip nou ce vor fi analizate în cadrul mecanicii cuantice.

4.4 Relatiile de nedeterminare ale lui Heisenberg (principiul de incertitudine).

Este cunoscut ca în mecanica clasică starea unei particule (particula clasică) este dată de valorile coordonatei, impulsului, energiei, etc.). Aceste mărimi reprezintă variabile dinamice. Informațiile despre o microparticula se obțin ca urmare a interacțiunii acestor variabile cu instrumentele de măsură, care sunt corpuri macroscopice. Rezultatele unor astfel de măsurători sunt exprimate în termeni asociați corpurilor macroscopice, deci sunt funcții de variabilele dinamice.

În cazul microparticulelor acest lucru nu mai este valabil, dat fiind comportamentul ondulatoriu al particulelor. Starea unei microparticule este descrisă cu ajutorul unei funcții de undă (de Broglie) și determinarea acesteia este legată de o anumită probabilitate.

Este cunoscut din mecanica analitică că variabile precum coordonata și impulsul asociat acesteia sau energia și timpul sunt variabile canonic conjugate. În mecanica clasică acestea pot fi determinate simultan cu o precizie oricât de bună. În consecință localizarea particulei în spațiu și timp este realizată cu aceeași precizie.

Principiul de incertitudine a fost stabilit prin luarea în considerare a următorului experiment. Ne propunem să determinăm valoarea coordonatei x a unei microparticule (electron) care se deplasează în direcția y , prin plasarea unei fante de lățime Δx perpendiculară pe direcția de mișcare a particulei (Fig. 1.22).

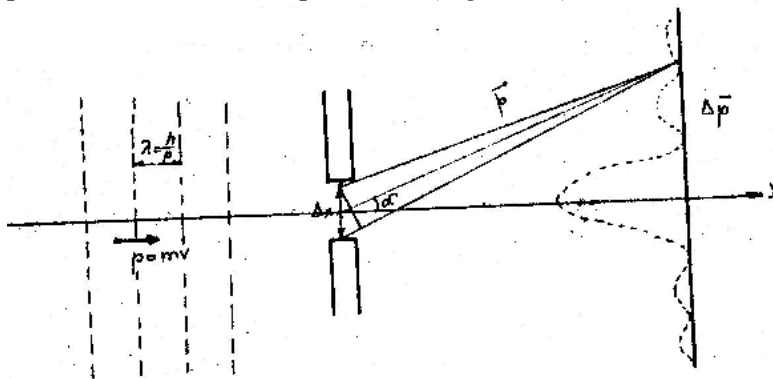


Fig. 1.22

Consideram ca înainte de a traversa fanta impulsul microparticulei este orientat după o direcție perpendiculară pe axa x, fiind evident că componenta p_x a impulsului este nulă, iar coordonata x este complet nedeterminată. Electronul care trece prin fanta are coordonata determinată cu precizia Δx (latimea fantei). Ca urmare a interacției cu fanta electronii suferă o difracție, caracterizată prin deplasarea acestora în lungul direcției x, ceea ce înseamnă că aceștia au un impuls cu o componentă după această direcție, așa cum se arată în figura. Vom presupune că la ieșirea din fanta electronii au capatat un impuls Δp_x . Din teoria difracției rezultă că între unghiul corespunzător primului minim de difracție obținut pe ecranul E este dat de relația:

$$\Delta x \sin \alpha = \lambda \quad (1.103)$$

unde λ este lungimea de undă asociată electronilor, iar $\Delta x \sin \alpha$ reprezintă diferența de drum dintre direcțiile electronilor ce pleacă din marginile fantei. Din figura se vede că impulsul după direcția x este dat de relația:

$$\Delta p_x = p \sin \alpha \quad (1.104)$$

Considerând lungimea de undă asociată este dată de relația

$$\lambda = h/p$$

Din relațiile (1.103) și (1.104) rezultă:

$$\Delta x \Delta p_x = h \quad (1.105)$$

Așa cum se vede în figura, difracția se întinde pe o regiune superioară primului minim, astfel că relația ce leagă cele două imprecizii se va scrie în mod corect sub forma:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h \quad (1.106)$$

Relații asemănătoare se pot scrie pentru cele două variabile:

$$\Delta y \Delta p_y \geq h \quad (1.107)$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq h \quad (1.108)$$

Relațiile reprezintă relațiile lui Heisenberg.

Principiul de incertitudine este unul dintre principiile fundamentale ale mecanicii cuantice. Acesta conduce la obținerea unor rezultate importante în fizică. Ca un exemplu, pe baza principiului de incertitudine se poate explica de ce electronii unui atom nu cad pe nucleu și pe baza lui se pot calcula dimensiunea și energia minimă a unui atom simplu. Presupunând că electronul cade pe nucleu (punctiform), coordonatele și impulsul său vor fi nule, acest lucru fiind incompatibil cu principiul de incertitudine.

Probleme

8. Un atom emite un foton cu o lungime de undă = 5500 Å. Timpul mediu de viață al nivelului excitat este $\Delta t \approx 10^{-8}$ s. Să se calculeze:

a) Imprecizia în localizarea fotonului pe direcția sa de mișcare.

b) Imprecizia în determinarea lungimii de undă indicate.

Rezolvare:

a) Dacă impulsul este $p = \frac{E}{c}$ și $E = mc^2$ atunci $\Delta p = \frac{\Delta E}{c}$. Relația de incertitudine

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1)$$

ne permite să calculăm pe Δp :

$$\Delta p = \frac{\hbar}{2c\Delta t} \approx \frac{\hbar}{2\Delta x}, \text{ adică } \Delta x = c \cdot \Delta t \approx 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-8} \approx 3 \text{ m.} \quad (2)$$

b) Din relația $E = \frac{hc}{\lambda}$, se obține:

$$\lambda = \frac{hc}{E}. \quad (3)$$

Deci:

$$\begin{aligned} \Delta \lambda &= \frac{hc\Delta E}{E^2} \approx \frac{hc}{E^2} \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{hc}{\left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2} \frac{h}{4\pi \cdot \Delta t} = \frac{\lambda^2}{4\pi \cdot c \cdot \Delta t} \approx \\ &\approx \frac{(5500 \cdot 10^{-10})^2}{4 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-8}} \approx 0,8 \cdot 10^{-14} \text{ m.} \end{aligned} \quad (4)$$

9. Folosind relația de incertitudine a lui Heisenberg să se evalueze energia stării fundamentale a atomului de hidrogen și a unui atom cu doi electroni, nucleul său având sarcina Ze .

Rezolvare:

Notăm cu r_0 raza atomului de hidrogen în starea fundamentală, considerând astfel că vectorul propriu este concentrat în interiorul unei sfere de rază r_0 . Probabilitatea de a găsi electronul la distanța r de nucleu este nenulă doar pentru $r < r_0$ și este neglijabilă pentru $r > r_0$. Această localizare a electronului implică o incertitudine a impulsului de ordinul $\frac{\hbar}{r_0}$.

Astefl, energia stării fundamentale va avea valoarea:

$$E(r_0) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -13,5 \text{ eV}, \quad (1)$$

deoarece $r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$ este prima rază Bohr.

În cazul atomului cu doi electroni localizați la distanțele r_1 și respectiv r_2 de nucleu, incertitudinile impulsurilor celor doi electroni sunt $\frac{\hbar}{r_1}$ și respectiv $\frac{\hbar}{r_2}$. Energia totală a atomului este:

$$E(r_1, r_2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) - Ze \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_1 + r_2},$$

unde s-a ținut cont de interacția electrostatică dintre nucleu și cei doi electroni și între cei doi electroni.

Energia stării fundamentale se obține calculând minimumul energiei în expresia căreia considerăm $r_1=r_2=r$.

Minimumul energiei se obține din condiția $\frac{dE}{dr} = 0$, care are rădăcina:

$$r = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} \left(Z - \frac{1}{4} \right)^{-1},$$

$$E_{\min} = - \left(Z - \frac{1}{4} \right)^2 \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 2 \left(Z - \frac{1}{4} \right)^2 E_1,$$

unde $E_1 = -13,5$ eV este energia stării fundamentale a atomului de hidrogen.

Astfel, rezultă:

	H ⁻	He	Li ⁺	Observații
Z	1	2	3	
E_{\min} [eV]	-15,3	-83	-205	Determinări teoretice
	-14,2	-78,4	-196,6	Determinări experimentale

în bun acord cu valorile măsurate.

II. Mecanica cuantica

2.1 Introducere.

Diferența fundamentală între mecanica clasică (newtoniană) și mecanica cuantică este legată de modul în care este descrisă comportarea unei particule. Astfel în mecanica clasică comportarea viitoare a unei particule este complet determinată prin cunoașterea poziției și impulsului inițiale, împreună cu forțele care acționează asupra acesteia. Marimile acestora pot fi bine determinate și în consecință și comportarea particulei va fi bine cunoscută.

Fundamentarea mecanicii cuantice se situează între 1923 și 1927, perioada în care au fost propuse aproape simultan două formulări echivalente: mecanica cuantică ondulatorie și mecanica cuantică matricială. Punctul de plecare al mecanicii cuantice este reprezentat de analiza teoriei asupra cuantelor de energie.

Teoria mecanicii cuantice ondulatorii a fost elaborata de Schrodinger si are la baza lucrarile lui Louis de Broglie asupra undelor de materie. Aprofundand si generalizand notiunea de unda de materie, Schrodinger a descoperit ecuatia de propagarea a functiei de unda, care descrie un sistem cuantic. Aceasta ecuatie constituie elementul esential al mecanicii cuantice ondulatorii. In cadrul teoriei lui Schrodinger unui sistem cantic ise ataseaza o functie de unda, care descrie situatia acestuia din punct de vedere probabilistic. Variabilele dinamice ale sistemului (marimile observabile) sunt descrise de operatori.

Mecanica cuantica matriciala are la baza lucrarile lui Heisenberg, Born si Jordan. In cadrul acestui formalism se pleaca de la marimi fizice observabile (variabile dinamice), carora li se asociaza matrici. Aceste matrici se supun algebrei necomutative. Ecuatiile de miscare ale variabilelor dinamice asociate unui sistem sunt ecuatii intre matrici. Ecuatiile sunt formal identice cu ecuatiile asociate sistemului clasic corespunzator.

Schrodinger a aratat ca mecanica cele doua formalisme sunt echivalente.

2.2 Functia de unda

Comportarea particulei cuantice este descrisa cu ajutorul functiei de unda. Functia de unda nu are o semnificatie fizica directa (interpretare fizica). Interpretarea fizica este data de patratul modulului functiei $\psi\psi^*$, care reprezinta probabilitatea de a gasi particula intr-un punct la un anumit moment de timp. Problema centrala a mecanicii cuantice este de a determina functia de unda a unei particule aflata sub actiunea unor forte externe.

2.3. Principiile mecanicii cuantice

2.3.1 Principiul suprapunerii starilor

Enuntul principiului este: " Un sistem cuantic care se poate gasi in starile reprezentate prin functiile de unda $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ se poate gasi si intr-o stare descrisa de functia de unda:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n = \sum c_i\psi_i \quad (2.1)$$

unde c_i sunt amplitudinele undelor de Broglie corespunzatoare acestor stari. Conform acestui principiu rezulta ca ecuatiile pe care le satisfac functiile de unda trebuie sa fie liniare.

2.3.2 Principiul de incertitudine

Principiul de incertitudine ne arata deosebirea neta dintre mecanica clasica si mecanica cuantica. In mecanica clasica se pot determina simultan si cu o precizie oricat de buna valorile pozitiei si impulsului asociat acesteia in cazul oricarei particule. In mecanica clasica cele doua valori nu pot fi determinate simultan cu o precizie oricat de buna datorita caracterului dual (unda- corpuscul) al microparticulelor. Daca se noteaza cu $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ impreciziile asupra coordonatelor si respectiv cu $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ impreciziile asupra impulsurilor, in baza principiului de incertitudine se scrie:

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq h \\ \Delta y \Delta p_y &\geq h \\ \Delta z \Delta p_z &\geq h \end{aligned} \quad (2.2)$$

Relatii ce arata ca nu se pot efectua masuratori asupra coordonatelor si impulsurilor asociata acestora cu precizie oricat de buna. Se observa ca in cazul cand imprecizia asupra coordonatei este nula, imprecizia asupra impulsului este infinita si invers.

In cadrul formalismului lui Hamilton variabilele $(x, p_x), (y, p_y), (z, p_z)$, dar si (E, t) unde E este energia si t este timpul sunt variabile canonic conjugate. In baza principiului de incertitudine rezulta ca variabilele canonic conjugate nu pot fi determinate simultan cu o precizie oricat de buna.

Principiul de corespondenta

Principiul de corespondenta afirma ca: “legile mecanicii cuantice trec in legi ale clasice atunci cand efectele proportionale cu h pot fi neglijate.”. Un alt enunt al principiului de corespondenta este: “relatiile dintre variabilele dinamice existente in fizica clasica trec in relatii intre operatoorii asociati acestora in fizica cuantica”.

Principiul cauzalitatii

Principiul cauzalitatii afirma ca : “daca se cunoaste functia de unda atasata unei particule cuantice $\psi (r,t)$ la momentul $t=0$, si se cunosc interactiunile pe care le sufera particula, atunci se poate calcula forma functiei de unda $\psi (r,t)$ la orice moment de timp $(t>0)$ ” . Aceasta inseamna ca daca se cunoaste probabilitatea de localizarea a unei particule cuantice la un anumit moment de timp precum si interactiunile la care aceasta este supusa se cunoaste si probabilitatea de localizarea a acesteia la un moment de timp ulterior.

2.4 Observabile si operatori.

Pentru a cunoaste o anumita variabila dinamica (coordonata, componenta impulsului pe o axa, energie, etc) este necesara efectuarea unei observatii (masuratori). Astfel variabila masurata reprezinta o observabila. Din punct de vedere matematic unei observabile i se ataseaza un operator. Prin operator se intelege o operatie matematica ce are proprietatea de a transforma o functie de un numar de variabile independente $f_1 (x_1, x_2, \dots x_n)$ intr-o alta functie de acelasi numar de variabile independente $f_2 (x_1, x_2, \dots x_n)$. Vom nota variabila dinamica cu A , iar operatorul asociat acesteia cu \hat{A} . Cel mai simplu operator este $\hat{A} = x$, astfel incat ca urmare a aplicarii operatorului \hat{A} unei functii $f(x)$ se obtine:

$$\hat{A}f(x) = x f(x) \tag{2.3}$$

Exemple de operatori: $x, d/dx, \Delta$, etc.

In continuare vom lucra cu o categorie aparte de operatori numiti operatori liniari. Un operator liniar satisface urmatoarele proprietati:

$$\hat{A}(f_1 + f_2) = \hat{A} f_1 + \hat{A} f_2 \tag{2.4}$$

$$\hat{A}(c f) = c \hat{A} f \tag{2.5}$$

unde c este o constanta iar functiile carora se aplica operatorul sunt functii de anumite variabile independente. Liniaritatea operatorilor este necesara in vederea satisfacerii principiului suprapunerii starilor. Astfel vom avea:

$$\hat{A}(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1 \hat{A} f_1 + c_2 \hat{A} f_2 \quad (2.6)$$

Proprietatile operatorilor

a) Suma a doi operatori

$$(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)f = \hat{A}_1 f + \hat{A}_2 f \quad (2.6)$$

b) Produsul a doi operatori

$$(\hat{A}_1 \hat{A}_2)f = \hat{A}_1 (\hat{A}_2 f) \quad (2.7)$$

c) inmultirea unui operator cu o constanta

$$c \hat{A}_1 f = c (\hat{A}_1 f) \quad (2.8)$$

d) comutativitatea a doi operatori

Prin comutator a doi operatori se intelege expresia:

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \hat{A}_1 \hat{A}_2 - \hat{A}_2 \hat{A}_1 \quad (2.9)$$

Daca $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = 0$ se spune ca cei doi operatori sunt comutativi.

Daca $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] \neq 0$ este diferit de zero cei doi operatori sunt necomutativi.

Operatori unitari sunt operatorii care aplicati oricarei functii o lasa nemodificata.

$$\hat{A} f = f, \quad (2.10)$$

Operatorul invers este definit de relatiile:

$$\hat{A}_1^{-1} \hat{A}_1 f = f \quad (2.11)$$

sau

$$\hat{A}_1^{-1} \hat{A}_1 f = f \quad (2.12)$$

Operatori hermitici (autoadjuncti)

Operatori hermitici (autoadjuncti) sunt acei operatori liniari care satisfac conditia:

$$\int_{(\Delta)} \psi_1^* \cdot \hat{F} \psi_2 dV = \int_{(\Delta)} (\hat{F} \psi_1)^* \psi_2 \cdot dV \quad (2.13)$$

unde ψ_1 și ψ_2 sunt funcții de aceleași variabile independente; \hat{F} este operatorul hermitic, iar integrarea se face prin întregul domeniu de variație al variabilelor independente. \hat{F}^* este operatorul complex conjugat cu \hat{F} .

Orice putere întreaga a unui operator hermitic este un operator hermitic. Adică, dacă \hat{F} este un operator hermitic, atunci:

$$\hat{F}^n = \hat{F} \cdot \hat{F} \cdot \hat{F} \dots \hat{F} \quad (2.14)$$

este un operator hermitic.

Dacă doi operatori sunt hermitici, produsul lor nu este în general hermitic. Dacă operatorii hermitici \hat{A} și \hat{B} sunt comutativi, atunci și produsul lor $\hat{A}\hat{B}$ este un operator hermitic.

2.5 Valori proprii și funcții proprii ale operatorilor liniari hermitici.

În mecanica cuantică, prin aplicarea operatorului liniar \hat{F} asupra funcției ψ , se obține aceeași funcție înmulțită cu o anumită constantă λ :

$$\hat{F}\psi = \lambda \cdot \psi \quad (2.15)$$

Relația (2.15) reprezintă o ecuație cu valori proprii. Dacă relația (2.15) are loc și dacă ψ este o funcție continuă, marginată și univocă, atunci ψ se numește funcție proprie a operatorului \hat{F} , iar λ se numește valoare proprie a operatorului \hat{F} corespunzătoare funcției proprii ψ .

Ansamblul condițiilor de continuitate, marginirea și univocitatea pe întregul domeniu de variație al variabilelor independente, se numesc condiții standard.

Mulțimea valorilor proprii λ ale unui operator, formează spectrul operatorilor, care poate fi discret sau continuu. Când unei valori proprii îi corespunde o singură funcție proprie λ_i , sistemul este nedegenerat. Când unei valori proprii λ_i îi corespund k funcții proprii $\psi_{i_1}, \psi_{i_2}, \dots, \psi_{i_k}$ sistemul este degenerat, iar k se numește grad de degenerare.

Proprietățile funcțiilor proprii și ale valorilor proprii sunt:

1. valorile proprii corespunzătoare operatorilor hermitici sunt reale
2. funcțiile proprii ale unui operator liniar hermitic sunt ortogonale și normate (ortonormate);

$$\int \psi_m^* \cdot \psi_n \cdot dV = \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & \text{pentru } m \neq n \\ 1 & \text{pentru } m = n \end{cases} \quad (2.16)$$

1. Pentru a demonstra ca operatorii hermitici posedă valori proprii reale, pornim de la relațiile:

$$\begin{cases} \hat{F}\psi = \lambda\psi \\ \int_{\Delta} \psi^* (\hat{F}\psi) dV = \int_{\Delta} \psi (\hat{F}\psi)^* dV \end{cases} \quad (2.17)$$

unde prima relație reprezintă ecuația cu valori proprii a operatorului \hat{F} , iar cea de-a doua este condiția de hermiticitate.

Din combinarea lor rezultă :

$$\lambda \int_{(\Delta)} \psi^* \psi dV = \lambda^* \int \psi \psi^* dV \quad (2.18)$$

unde s-a folosit și relația:

$$\hat{F}^* \psi^* = \lambda^* \psi^*$$

Ținând seama de condiția de normare pentru funcția de undă, relația (2.18) conduce la

$$\lambda = \lambda^*$$

Marimea λ și valoarea ei complex conjugată λ^* sunt egale numai dacă aceasta este o mărime reală.

2)

Pentru a demonstra ortogonalitatea funcțiilor proprii ale unui operator hermitic vom considera două valori proprii distincte λ_m și λ_n ale operatorului \hat{F} , iar ψ_m, ψ_n funcțiile proprii corespunzătoare

$$\begin{aligned} \hat{F}\psi_m &= \lambda_m \cdot \psi_m \\ \hat{F}\psi_n &= \lambda_n \cdot \psi_n \end{aligned} \quad (2.19)$$

Scriind condiția de hermiticitate:

$$\int_{(\Delta)} \psi_m^* \cdot \hat{F}\psi_n dV = \int_{\Delta} \psi_n (\hat{F}\psi_m)^* dV \quad (2.20)$$

Inlocuind relațiile (2.19) în relația (2.20) se obține :

$$\begin{aligned} \lambda_n \int \psi_m \psi_n dV &= \lambda_m \int \psi_n \psi_m^* dV \quad \text{sau} \\ (\lambda_n - \lambda_m) \int \psi_m^* \psi_n dV &= 0 \end{aligned} \quad (2.21)$$

Deoarece valorile proprii au fost presupuse distincte, diferența $(\lambda_m - \lambda_n)$ este diferită de zero, avem:

$$\int_{\nabla} \psi_m^* \psi_n dV = 0 \quad (2.22)$$

care reprezinta conditia de ortogonalitate pentru functiile de unda ψ_m si ψ_n .

Deoarece functiile proprii satisfac o ecuatie liniara omogena, ele sunt determinate pana la o constanta arbitrara. Determinarea constantelor se face din conditia de normare:

$$\int \psi_n^* \psi_n dV = 1 \quad (2.23)$$

Relatia 2.22 reprezinta conditia de ortonormare a functiilor de unde.

In cazul degenerarii, functiile proprii degenerate nu mai sunt ortogonale, deoarece valorile nu sunt distincte. In acest caz se pot construi combinatii liniare independente cu

aceste functii, care la randul lor sunt noi functii proprii ale operatorului \hat{F} . Coeficientii care apar in aceste combinatii, pot fi astfel alesi incat noile functii proprii sa fie ortogonale.

2.6 ECUATIA LUI SCHRÖDINGER

Pentru a descrie miscarea unei particule in spatiu si in timp este necesar sa gasim o ecuatie diferentiala ale carei solutii sa reprezinte miscarea particulei. Aceasta ecuatie nu poate fi dedusa, ci trebuie postulata si confruntata cu rezultatele experimentale.

Ecuatia lui Schrodinger sau ecuatia de unda este ecuatia fundamentala a mecanicii cuantice in acelasi sens in care legea a doua a dinamicii este ecuatia fundamentala a mecanicii newtoniene. Ecuatia lui Schrödinger are mai multe forme depinzand de conditiile externe in care se afla microparticula : daca este particula libera, daca se misca nintr-un camp extern de forte, daca se misca nerelativist sau relativist etc.

2.6.1 Ecuatia lui Schrödinger pentru particula libera

Desi ecuatia lui Schrodinger este o ecuatie fundamentala si forma cea mai generala a acesteia este postulata, o forma a acesteia se poate deduce in cazul particulei libere. Functia de unda asociata unei particule libere, de energie E si impuls \vec{p} , este o unda plana de forma:

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad (2.24)$$

Se constata usor ca:

$$\vec{p} \cdot \vec{r} = xp_x + y \cdot p_y + zp_z$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = A \left(\frac{i}{\hbar} p_x \right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} = \frac{i}{\hbar} \cdot p_x \cdot \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar} p_x \right)^2 \cdot \psi = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \cdot \psi$$

Analog

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{p_y^2}{\hbar^2} \cdot \psi \quad , \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{p_z^2}{\hbar^2} \cdot \psi$$

iar

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{\hbar^2} \cdot \psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \cdot \psi \quad (2.25)$$

Pe de alta parte

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi \quad (2.26)$$

Tinand cont ca pentru particula libera, putem considera energia egala cu energia totala, rezulta:

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

sau

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \cdot \psi \quad (2.27)$$

Din ecuatiile (2.25) si (2,27) se obtine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.28)$$

Relatia (2.28) constituie ecuatia Schrödinger temporală pentru o particula libera. Ea este o ecuatie diferentiaa liniara, cu derivate parțiale și nu conține anumite variabile dinamice ale particulei (impulsul, energia), fiind dependentă numai de masa particulei și de o constantă universală \hbar . Ecuația este satisfăcută nu numai de o funcție de undă de forma (2.24), care reprezintă funcția de undă pentru o particulă cu un impuls dat, ci ea satisface orice suprapunere liniară de astfel de funcții de undă. Ecuația este liniară pentru funcția $\psi(\vec{r}, t)$ astfel ca dacă $\psi_1(\vec{r}, t)$ și $\psi_2(\vec{r}, t)$ sunt soluții atunci orice combinație a lui ψ_1 și ψ_2 va fi de asemenea, o soluție. Aceasta cerință este asigurată de valabilitatea principiului suprapunerii stărilor.

Ecuația Schrödinger este o ecuație de gradul I în raport cu timpul și conține factorul i , aceasta însemnând că funcția de undă trebuie să fie complexă.

Faptul că ecuația lui Schrödinger conține numai derivata de ordinul I în raport cu timpul a funcției de undă ψ este strict legată de principiul cauzalității în mecanica cuantică. Aceasta înseamnă că dacă se cunoaște funcția de undă la momentul inițial $\psi(\vec{r}, 0)$, aceasta este suficientă pentru determinarea în mod univoc la orice moment de timp a funcției $\psi(\vec{r}, t)$.

Precizăm că în cele de mai sus, nu am considerat a fi o demonstrație a ecuației lui Schrödinger. Asemenea ecuațiilor lui Newton și Maxwell, ecuația Schrödinger reprezintă o generalizare a datelor cunoscute, fiind considerată ca o mare prevedere științifică. Valabilitatea ecuației lui Schrödinger este confirmată de o serie de date experimentale din fizica atomică, nucleară și fizica solidului.

2.6.2. Ecuatia lui Schrödinger pentru particula aflata in campul de forte.

Pentru o particula materiala aflata intr-un camp de forte extern, energia ei totala se compune atat din energia cinetica cat si din energia potentiala

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (2.29)$$

unde $U(\vec{r})$ reprezinta energia potentiala a particulei. Se constata ca ecuatia lui Schrödinger temporală

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \cdot \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

reprezinta traducerea cuantica a ecuatiei clasice

$$\frac{p^2}{2m} = E$$

daca impulsul si energia sunt reprezentate prin operatorii

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla; \frac{\hat{p}^2}{2m} = E; \hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta; \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (2.30)$$

Metoda de construire a ecuatiei lui Schrödinger aplicabila sistemelor in cazul general, se bazeaza pe urmatorul postulat: "Fiecarei variabile dinamice din mecanica clasica (coordonatele particulelor, componentele impulsului, energia, momentul cinetic etc.) ii corespunde in mecanica cuantica un operator liniar bine determinat, care actioneaza asupra functiei de unda $\psi(\vec{r}, t)$ si se admite ca intre acesti operatori liniari au loc aceleasi identitati ca si intre marimile corespunzatoare din mecanica clasica".

Sa consideram un sistem dinamic clasic, ale carui ecuatii de miscare se deduc din functia Hamilton $H(q, p, t)$ functie de coordonatele si de impulsurile generalizate q_i, p_i si timpul t . Energia totala a sistemului este functia lui Hamilton:

$$E = H(q_i, p_i, t) \quad (2.31)$$

Acestui sistem clasic ii corespunde in mecanica cuantica o stare dinamica reprezentata prin functia de unda $\psi(q_1, \dots, q_N, t)$ definite in spatiul de configuratie si a carui ecuatie se obtine efectuand in ecuatiei (8) substitutiile

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \quad (2.32)$$

si scriind ca cele doua marimi considerate ca operatori dau rezultate identice cand se actioneaza asupra lui ψ .

Ecuatia obtinuta este ecuatia Schrödinger a sistemului cuantic corespunzator

$$(i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \psi(q_1, \dots, q_N; t) = \hat{H}(q_1, \dots, q_N, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_N}; t) \cdot \psi(q_1, \dots, q_N; t) \quad (2.33)$$

Regula (2.32) se poate aplica numai daca coordonatele sunt coordonate carteziene. Dupa stabilirea operatorilor in coordonate carteziene, se poate trece apoi la orice alete coordonate (sferice, cilindrice etc.).

Principalii operatori ai mecanicii cuantice sunt prezentate in tabelul I.

Tabelul I.

Marimea	Definitia clasica	Operator cuantic
Pozitia	\vec{r}	\vec{r}
Impulsul	\vec{p}	$-i\hbar\nabla$
Componentele impulsului	p_x, p_y, p_z	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$
Momentul kinetic	$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$-i\hbar \cdot \vec{r} \times \nabla$
Energia cinetica	$\frac{\vec{p}^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$

Tinand cont de ecuatia (2.33) si de forma operatorului energia totala a unei particule in camp extern de forte, caracterizat prin energia potentiala $U(\vec{r})$ se obtine

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta + U(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

sau

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.34)$$

Relatia (2.34) reprezinta una din ecuatiile fundamentale ale mecanicii cuantice, ea reprezentand ecuatia Schrödinger pentru o particula aflata in campul de forte caracterizat prin potentialul $U(\vec{r})$. Ea joaca in mecanica cuantica acelasi rol ca si ecuatiile lui Newton in mecanica clasica si descrie ecuatia de miscare a unei particule cuantice.

2.6.3 Ecuatia lui Schrödinger atemporală (independentă de timp)

Ecuatia lui Schrödinger conduce la concluzii deosebit de interesante, daca se introduce precizarea ca in in orice camp de forte conservativ(in care energia particulei ramane nemodificata) , functia de unda $\psi(\vec{r}, t)$ are forma unui produs dintre un factor exponential care contine doar timpul si un factor spatial care depinde doar de coordonatele spatiale:

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \psi(\vec{r}) \quad (2.35)$$

Inlocuind aceasta solutie in relatia (2.28) rezulta, ecuatia Schrödinger atemporală pentru o particula libera

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad (2.36)$$

Prin inlocuirea relatiei (2.35) in ecuatia (2.34) se obtine

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad (2.37)$$

care reprezinta ecuatia lui Schrödinger pentru o particula ce se misca intr-un camp de potential conservativ $U(\vec{r})$. Aceasta ecuatie determina dependenta functiei de unda numai de coordonate, in timp ce dependenta de timp este data de ecuatia (2.35).

Relatia (2.37) este uneori numita si ecuatia Schrödinger pentru starile stationare, deoarece:

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r}, 0)|^2$$

Problema fundamentala a mecanicii cuantice este aflarea functiilor de unda proprii $\psi(\vec{r}, t)$ si a valorilor proprii ale energiei, prin rezolvarea ecuatiei Schrödinger aplicata sistemului cuantic respectiv.

Pentru a obtine legea de miscare a unei particule cuantice, pe langa functia de unda $\psi(\vec{r}, t)$ mai trebuie cunoscute conditiile initiale si conditiile la limita ale functiei de unda. Deoarece ecuatia lui Schrödinger este o ecuatie cu derivata de ordinul I in raport cu timpul, este necesar sa cunoastem valoarea la momentul initial de unda $\psi(\vec{r}, 0)$. Adica, daca se cunoaste valoarea initiala a functiei de unda, atunci pentru orice $t > 0$ se poate gasi functia de unda a sistemului $\psi(\vec{r}, t)$.

Functia de unda $\psi(\vec{r}, t)$ trebuie sa satisfaca urmatoarele conditii standard:

1) $\psi(\vec{r}, t)$ trebuie sa fie finita in tot spatiul si cel putin de patrat integrabila, adica

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \text{finit}$$

in caz contrar nu se mai poate scrie conditia de normare

2) functia de unda $\psi(\vec{r}, t)$ trebuie sa fie continua si cu derivate parțiale de ordinul I continui.

3) functia de unda $\psi(\vec{r}, t)$ trebuie sa fie univoca. Din teoria ecuatiilor cu derivate parțiale, se stie ca asemenea ecuatii (tip ecuatia Schrödinger) nu pot avea solutii care sa satisfaca conditiile standard, decat numai daca energia E ia anumite valori distincte, numite valori proprii. Functiile de unda $\psi(\vec{r}, t)$ care corespund valorilor respective se numesc functii proprii.

a) Daca $E < U$, ecuatia (2.37) are solutii decat pentru anumite valori particulare ale lui E , valori ce formeaza un spectru discret. In acest caz integrala $\int |\psi(\vec{r})|^2 dV$ este

convergenta. Conform interpretarii statistice a functiei de unda, probabilitatea de a gasi particula la infinit este nula, particula ramanand practic localizata intr-un domeniu finit. Se spune ca particula se afla intr-o stare legata.

b) Daca $E > U$, ecuatia (2.37) poate fi rezolvata pentru orice valoare a lui E . Energiile pozitive formeaza un spectru continuu. Functiile de unda proprii corespunzatoare nu se anuleaza la infinit. Particula nu ramane localizata intr-un domeniu finit. In acest caz particula se afla intr-o stare nelegata.

Determinarea energiilor cuantificate revine la a calcula valorile proprii ale ecuatiei lui Schrödinger. Pentru anumite cazuri particulare ale hamiltonianei ecuatia lui Schrödinger

poate fi rezolvata in mod riguros. In cazuri complexe, se recurge la metode aproximative de rezolvare.

2.6.4 Ecuatia lui Schrödinger pentru particula aflata in campul electromagnetic

Metoda generala de construire a ecuatiei Schrödinger poate fi folosita si pentru cazuri mai generale cum este cel al unei particule de sarcina e aflata intr-un camp electromagnetic caracterizat prin potentialul vector $\vec{A}(\vec{r}, t)$ si potentialul scalar $\phi(\vec{r}, t)$.

Legatura dintre potentiale este data de conditia Lorentz:

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} - \nabla \phi(\vec{r}, t) \quad (2.38)$$

Energia totala a unei particule incarcate, aflata in camp electromagnetic, este

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + e \cdot \phi(\vec{r}, t) \quad (2.39)$$

Unde \vec{p} este impulsul generalizat al particulei.

Scriem relatia (16) sub forma operatoriala asa incat:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + e\phi(\vec{r}, t) \quad (2.40)$$

iar ecuatia lui Schrödinger atemporala

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

devine:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi \right] \cdot \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \cdot \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.41)$$

In primul membru al relatiei (2.41) avem:

$$\begin{aligned} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi &= \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{e}{c} \vec{A} \psi \right) = \\ &= -\hbar^2 \Delta \psi + \frac{e}{c} i\hbar \vec{A} \cdot \nabla \psi + i\hbar \frac{e}{c} \nabla \vec{A} \psi + \frac{e^2}{c^2} (\vec{A}) \psi = \\ &= -\hbar^2 \Delta \psi + 2i\hbar \frac{e}{c} (\vec{A} \cdot \nabla \psi) + i\hbar \frac{e}{c} \psi \vec{A} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \psi \end{aligned}$$

Deoarece:

$$\nabla(\vec{A} \psi) = \vec{A} \nabla \psi + \psi \nabla \vec{A}$$

In acest caz, ecuatia Schrödinger (2.41) devine

$$\frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \Delta \psi + 2i \frac{\hbar e}{c} (\bar{A} \cdot \nabla \psi) + \left(i\hbar \frac{e}{c} \nabla \bar{A} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \bar{A}^2 \right) \psi \right] + e\phi\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.42)$$

2.6.5 Ecuatiile lui Schrödinger pentru sisteme de particule

Expresia clasica pentru hamiltoniana unui sistem de particule, are forma:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U_1(\bar{r}_i) + U_{\text{int}} \quad (2.43)$$

unde \bar{p}_i, m_i si $U_1(\bar{r}_i)$ sunt impulsul, masa si energia potentiala a particulei i in campul de forte extern; iar U_{int} este energia potentiala de interactiune dintre particule una cu alta. Operatorul hamiltonian se obtine sub forma

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N U_1(\bar{r}_i) + U_{\text{int}} \quad (2.44)$$

unde ∇_i reprezinta operatorul de diferentiere in raport cu coordonatele particulei i , sumarea fiind facuta peste toate particulele sistemului.

Funcția de unda care descrie sistemul de particule, depinde de coordonatele tuturor particulelor si de timp, adica $\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N; t)$.

Ecuatia Schrödinger temporara, are forma

$$\left(-\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_{i=1}^N U_1(\bar{r}_i) + U_{\text{int}} \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.45)$$

iar ecuatia Schrödinger pentru stari stationare, este

$$\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta_i + \sum_{i=1}^N U_1(\bar{r}_i) \psi + U_{\text{int}}(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) \psi = E \psi \quad (2.46)$$

In cazul particular in care energia potentiala de interactiune este nula ($U_{\text{int}} = 0$), ecuatia devine:

$$\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \right) \Delta_i + U_1(\bar{r}_i) \psi = E \psi \quad (2.47)$$

unde termenii din paranteza depind numai de coordonatele particulei corespunzatoare.

Se cauta o functie ψ de forma unui produs de functii care depinde de coordonatele fiecarei particule

$$\psi = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)\dots\psi_N(\vec{r}_N)$$

Inlocuind in relatia (2.47) se obtine:

$$\sum_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i)\dots\psi_{i-1}(\vec{r}_{i-1})\psi_{i+1}(\vec{r}_{i+1})\dots\psi_N(\vec{r}_N) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + U_i(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) = E \psi$$

Impartind prin ψ se obtine:

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{\psi_i(\vec{r}_i)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + U_i(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) = E \quad (2.48)$$

In partea dreapta a acestei ecuatii E este o constanta. In partea stanga este facuta suma de termeni, in care fiecare este o functie de variabilele sale independente. Pentru ca ecuatia sa fie valabila pentru toate variabilele independente trebuiesc realizate urmatoarele conditii:

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i \psi_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i) \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i) \\ \sum_{i=1}^N E_i = E \end{cases} \quad (2.49)$$

unde E_i sunt constante, care reprezinta energiile individuale ale fiecarei particule. Energia totala a intregului sistem este suma energiilor particulelor individuale ale acestuia.

3. Postulatele mecanicii cuantice

Desi exista un consens general asupra existentei postulatelor mecanicii cuantice, exista o mare diversitate asupra modului de prezentare a acestora. Sistemele la care ne vom referi in continuare sunt considerate izolate, adica complet libere de influenta altor particule, corpuri sau campuri externe.

3.1 Postulatul I

“Orice stare n, a unui sistem dinamic alcatuit din N particule este descrisa – atat cat se poate de complet – de o functie $\psi_n(q_1, q_2, \dots, q_{3N}, t)$ de coordonate si timp numita functie de unda. Functia ψ_n este in general complexa, marimea $\psi_n^* \psi_n dv$ reprezinta probabilitatea ca particula sistemului sa se gaseasca in elementul de volum $dv = \prod_1^{3N} dq$ la un moment dat $t \gg \tau$.

Pentru a descrie sistemele cuantice reale, functiile ψ_n trebuie sa satisfaca conditiile standard: sa fie continua, uniforma si marginita. Toate aceste conditii sunt impuse de necesitatea ca densitatea de probabilitate reprezentata produsul

$$\psi_n^* \psi_n = |\psi_n|^2$$

sa fie perfect definita. Discontinuitatile si lipsa uniformitatii functiilor ψ_n duc la ambiguitati in ce priveste valoarea probabilitatilor descrise de $|\psi_n|^2$ in anumite puncte sau domenii, iar nemarginirea duce la valori infinite ale probabilitatii, cu care nu se poate lucra.

Probabilitatea de a gasi particula reala undeva in spatiu este egala cu certitudine incat

$$\int \psi_n^* \psi_n dv = 1$$

reprezinta conditia de normare.

Functiile de unda trebuie sa fie si normate, incat

$$\int \psi_n^* \psi_n dv = \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & \text{pentru } m \neq n \\ 1 & \text{pentru } m = n \end{cases} \quad \text{normata, \quad daca \quad este \quad patrat}$$

integrabila, atunci

$$\int \psi_n'^* \psi_n' dv = A^2$$

atunci functia de unda normata este

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{A}} \psi_n'$$

Odata normata functia de unda ramane tot timpul normata.

3.2 Postulatul II

”Oricarei variabile dinamice din mecanica clasica (coordonata, impuls, energie, moment cinetic etc.) ii corespunde in mecanica cuantica un operator liniar hermitic bine determinat, care actioneaza asupra functiei de unda $\psi(q,t)$ si se admite ca intre acesti operatori au loc aceleasi identitati ca si intre marimile corespunzatoare din mecanica clasica”.

Pentru fiecare variabila F a unui sistem cuantic stationar exista un operator liniar hermitic \hat{F} , care admite un set complet de functii de unda proprii ψ , astfel incat

$$\hat{F}\psi = F\psi$$

In general expresia unui operator \hat{F} asociat unei observabile F se obtin astfel:

- se scrie expresia clasica a observabilei in functie de coordonate (q), impulsuri (p) si timp (t);
- coordonatele si timpul raman neafectate, iar impulsurile se inlocuiesc cu expresiile

$$p_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j} \quad (3.1)$$

Forma operatorilor nu este in mod unic determinata, ci depinde de ”reprezentarea” folosita. De obicei se foloseste reprezentarea Schrödinger in care orice coordonata de pozitie q_i sau timpul t este reprezentata prin operatorul \hat{q}_i respectiv t. Impulsul p_j asociat coordonatei q_j este reprezentat prin operatorul (3.1). In alte reprezentari (a impulsului, a energiei) operatorii au forma diferita.

Postulatul III

“Evoluția funcției de undă în spațiu și timp este descrisă de ecuația Schrödinger. Dacă funcția de undă $\psi(\vec{r}, t)$ este cunoscută la un moment dat, atunci evoluția ei în timp este descrisă de ecuația Schrödinger

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

unde \hat{H} este operatorul asociat funcției lui Hamilton”.

3.3 Postulatul IV

Postulatul afirmă că “valoarea medie a valorii variabilei dinamice $F(q)$ a unei particule cuantice a cărei stare este descrisă de funcția de undă ψ se exprimă prin relația :

$$\langle F \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{F} \psi dV}{\int \psi^* \psi dV} \quad (3.2)$$

integralele fiind extinse pe tot domeniul de variație al variabilei funcției de undă $\psi(q)$. Dacă funcția de undă ψ este normată

$$\int \psi^* \psi dV = 1$$

atunci formula valorii medii se reduce la

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi dV \quad (3.3)$$

3.4 Postulatul V

”O măsurătoare repetată a unei observabile A va da întotdeauna aceeași valoare numai dacă funcția de undă ψ_n care descrie starea corespunzătoare n a sistemului este o funcție proprie a operatorului \hat{A} asociat observabilei

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \quad (3.4)$$

Se spune că în aceste cazuri avem de-a face cu stări pure. Acest postulat face legătura cu experiențele precizând condițiile în care se obțin valori precise ale variabilelor dinamice. Într-o stare pură orice măsurătoare a observabilei va da precis valoarea exactă acesteia: a_n .

3.5 Postulatul VI

”Daca o functie de unda ψ care descrie sistemul nu este o functie proprie a operatorului \hat{A} , atunci in urma masuratorii aceasta va trece intr-o stare proprie, iar rezultatul masuratorii va fi valoarea proprie asociata starii respective »

:

$$\hat{A}\psi = a_n\psi_n \quad (3.5)$$

4. Fluxul densitatii de probabilitate. Ecuatia continuitatii in mecanica cuantica.

Functia de unda $\psi(\vec{r}, t)$ care descrie miscarea unei particule, se modifica in spatiu si in timp. Aceasta schimbare nu este arbitrara, densitatea de probabilitate verificand in mecanica cuantica o lege de conservare.

Deoarece $\psi\psi^*dV$ reprezinta probabilitatea de a gasi particular in volum dV , atunci $N\tau\psi^*dV$ reprezinta numarul mediu de particule din volumul dV aflate in jurul unui punct din spatiu.

Sa calculam care este probabilitatea ca o particular sa treaca printr-o suprafata data in unitatea de timp. Pentru aceasta pornim de la probabilitatea ca particular sa se afle in volumul dV .

$$|\psi|^2 dV = \psi\psi^* dV$$

Se deriveaza aceasta relatie in raport cu timpul

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 dV = \frac{\partial}{\partial t} \psi\psi^* dV = \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dV \quad (3.6)$$

Din ecuatia Schrödinger obisnuita si din cea conjugata, prin multiplicarea cu ψ^* si respective cu ψ , iar apoi prin adunarea lor, rezulta

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi + \frac{1}{i\hbar} U \psi$$

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi^* - \frac{1}{i\hbar} U \psi^*$$

incat

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) \quad (3.7)$$

sau

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{\hbar}{2mi} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) \quad (3.8)$$

Introducand \vec{J} vectorul densitate de flux de probabilitate

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) \quad (3.9)$$

relatia (3.8) devine

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \Delta \vec{J} = 0 \quad (3.10)$$

ce reprezinta ecuatia de continuitate a probabilitatii in mecanica cuantica. Deoarece $\psi \psi^* = P$ se interpreteaza ca densitatea de probabilitate de prezenta a particulei intr-o zona data, \vec{J} reprezinta « fluxul densitatii de probabilitate » ca o particula sa traverseze unitatea de suprafata in unitatea de timp in sensul normalei pozitive la suprafata minus probabilitatea ca particula sa traverseze unitatea de suprafata de timp in sens invers.

Din relatia (108) se constata ca daca ψ este o functie de unda reala, desitatea fluxului de probabilitate este zero.

In concluzie, $\psi \psi^*$ se poate considera ca un "fluid" fictiv care ocupa intregul spatiu si satisface legea de conservare a continuitatii. Daca la un moment dat densitatea de probabilitate $\psi \psi^*$ creste intr-o anumita zona din spatiu, putandu-se considera ca aceasta probabilitate "se scurge asemenea unui fluid".