Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

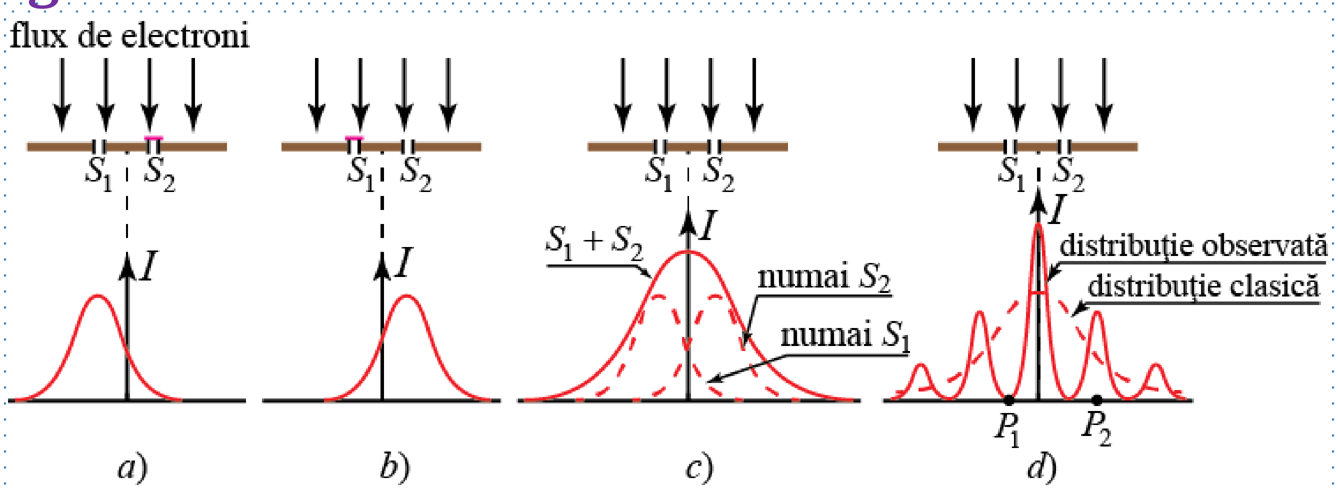
Ipoteza și formula lui Louis de Broglie

În 1924, Louis de Broglie a înaintat ipoteza despre dualitatea undă-particulă. Relațiile cantitative care leagă proprietățile de particulă și de undă ale particulelor sunt aceleași ca și pentru fotoni

$$\varepsilon = h\nu \qquad p = \frac{h}{\lambda}$$

Astfel, oricărei particule care posedă impuls îi este asociată o undă (**undă de Broglie**), a cărei lungime de undă este determinată de **formula de Broglie**

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$$



Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Fiecărei particule de substanță i se pune în corespundere o funcție de coordonate și timp **$\Psi(x, y, z, t)$** , numită **amplitudine a probabilității** sau **funcție de undă**.

Probabilitatea înregistrării particulei într-un moment arbitrar de timp *t* într-un punct arbitrar al spațiului (x, y, z) este proporțională cu pătratul modulului acestei funcții $|\Psi(x, y, z, t)|^2$, cu alte cuvinte cu intensitatea undei asociate.

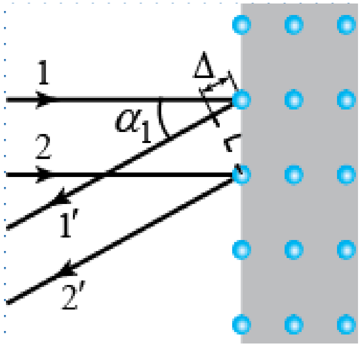
$$d\mathscr{P} = \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 dV \quad \Longrightarrow \quad \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 = \frac{d\mathscr{P}}{dV}$$

În acest fel, $|\Psi(x, y, z, t)|^2$ are sensul de **densitate a probabilității** de a înregistra particula într-un anumit loc în spațiu

Experiența lui Davisson și Jermer

$$d\sin\alpha_1 = \lambda \quad \Longrightarrow \quad \frac{h}{p} = d\sin\alpha_1$$

$$h = pd\sin\alpha_1$$



Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Exprimăm impulsul și energia microparticulei prin numărul de undă al undei asociate:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k; \qquad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi}2\pi\nu = \hbar\omega \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05\cdot 10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}$$

Vitezele de fază și de grup ale undei asociate $\upsilon_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{\upsilon}{2}$

unde υ este viteza microparticulelor

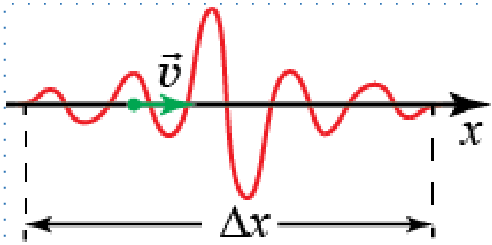
Energia microparticulelor $\hbar\omega = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \rightarrow \hbar\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m} \rightarrow$

$$\rightarrow \quad u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{2p}{2m} = \frac{p}{m} = \frac{m\upsilon}{m} = \upsilon \quad \rightarrow \quad u \neq \upsilon_f$$

Unda asociată particulei libere nu reprezintă o undă monocromatică, ci un pachet de unde. Viteza acestui pachet coincide cu viteza particulei υ.

Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Relațiile de incertitudine ale lui Heisenberg



Considerăm o particulă împreună cu unda de Broglie asociată ei, care se mișcă de-a lungul axei Ox cu viteza de grup

$$u=\frac{d\omega}{dk}=\frac{d(2\pi\nu)}{d(2\pi/\lambda)}=-\lambda^2\frac{d\nu}{d\lambda}$$

dar $\lambda=\frac{h}{p}$ $\Rightarrow$ $d\lambda=-\frac{hdp}{p^2}$. Deci $u=-\lambda^2\frac{d\nu}{d\lambda}=\lambda^2\frac{d\nu\, p^2}{hdp}=\frac{h^2}{p^2}\frac{d\nu\, p^2}{hdp}=\frac{hd\nu}{dp}$

$$u=\frac{\Delta x}{\Delta t}=h\frac{\Delta\nu}{\Delta p_x} \Rightarrow \Delta p_x\cdot\Delta x=h\Delta\nu\cdot\Delta t \Rightarrow \Delta t\geq\frac{1}{\Delta\nu} \Rightarrow \Delta t\cdot\Delta\nu\geq 1$$

Substituind, obținem

$$\Delta p_x\cdot\Delta x\geq h$$

Analogic

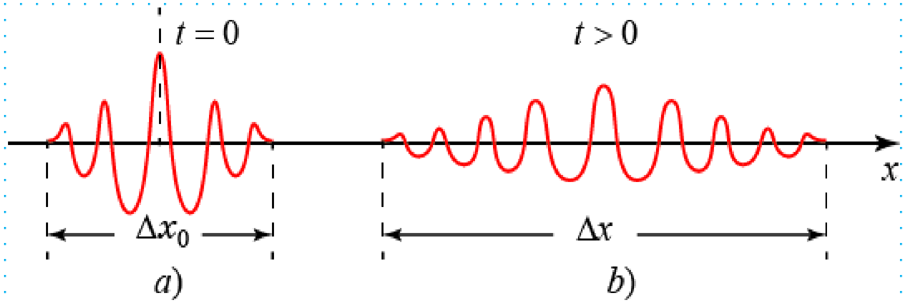
$$\Delta p_y\cdot\Delta y\geq h,$$

$$\Delta p_z\cdot\Delta z\geq h.$$

Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Să estimăm lățimea pachetului de undă asociat cu o particulă liberă care se deplasează cu o viteză de grup $u = \upsilon$. Fie la momentul inițial $t = 0$ pachetul de unde are lărgimea Δx_0. După timpul t, lărgimea pachetului va crește cu mărimea

$$\Delta x = \Delta u \cdot t$$



Evaluăm mărimea Δu.

Observăm, că $\Delta u = \dfrac{du}{dp}\Delta p$. Întrucât $u = \upsilon$ și $\upsilon = p/m$

$$\Delta u = \frac{d\upsilon}{dp}\Delta p \approx \frac{1}{m}\Delta p = \frac{1}{m}\cdot\frac{h}{\Delta x_0} \quad \Longrightarrow \quad \Delta x = \frac{h}{m\Delta x_0}\cdot t$$

Considerăm un electron liber localizat la momentul inițial de timp într-un domeniu de dimensiuni atomare $\Delta x_0 = 10^{-10}\,\text{m}$. După un timp $t = 1\,\text{s}$, lărgimea pachetului:

$$\Delta x = \frac{h}{m\Delta x_0}\cdot t = \frac{6,62\cdot 10^{-34}}{9,11\cdot 10^{-31}\cdot 10^{-10}} = 7,27\cdot 10^{6}\,\text{м} = 7270\,\text{км}$$

Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Ecuația fundamentală a mecanicii cuantice nerelativiste

În a.1926, fizicianul austriac Erwin Schrödinger a stabilit ecuația fundamentală a mecanicii cuantice pentru microparticule care se mișcă cu viteza $\upsilon << c$: (ecuația nestaționară sau temporală)

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+U\left(x,y,z,t\right)\Psi}$$

unde $U\left(x,y,z,t\right)$ energia potențială a microparticulei în câmpul de forțe în care se mișcă

Condițiile impuse funcției de undă:

1) Funcția de undă trebuie să fie finită, continuă și univocă;

2) derivatele parțiale $\frac{\partial\Psi}{\partial x}$ $\frac{\partial\Psi}{\partial y}$ $\frac{\partial\Psi}{\partial z}$ $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ trebuie să fie continue;

3) funcția $|\Psi|^2$ trebuie să corespundă interpretării statistice, adică funcția de undă trebuie să satisfacă condiția de normare a probabilităților

$$\boxed{\int\limits_{(V)}\left|\Psi\right|^2 dV=1}$$

Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Ecuația staționară Schrödinger

Dacă $U = U(x,y,z)$ atunci soluția ecuației Schrödinger poate fi reprezentată ca $\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\cdot\varphi(t)$

$$i\hbar\psi\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi\nabla^2\psi + U\psi\varphi \Bigg|\times\frac{1}{\psi\varphi} \longrightarrow i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\psi}{\psi} + U(x,y,z) \longrightarrow$$

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial t} &= E \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\psi}{\psi} + U(x,y,z) &= E \end{aligned}\right\}$$

$$\longrightarrow \frac{d\varphi}{\varphi} = \frac{E}{i\hbar}dt \longrightarrow \varphi = \varphi_0 e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\longrightarrow \boxed{\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(x,y,z)\right]\psi = 0}$$

unde E este o constantă care are dimensiunea unei energii. Se poate demonstra că E reprezintă energia totală a particulei.

Soluțiile ecuației Schrödinger staționare se numesc **funcții proprii**, iar valorile constantei E care satisfac această ecuație se numesc **valori proprii.**

Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Mişcarea particulei libere

$$\left.\begin{aligned} U(x) &= 0 \\ E = E_c &= \frac{m\upsilon^2}{2} \end{aligned}\right\} \Longrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_c\psi = 0$$

$$k^2 = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 m^2\upsilon^2}{h^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{2m}{\hbar^2}E_c = \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)$$

Astfel, ecuația Schrödinger pentru o microparticula liberă are forma

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

Soluția corectă, care satisface această ecuație împreună cu condiția $|\psi|^2$ = const., este

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

sau

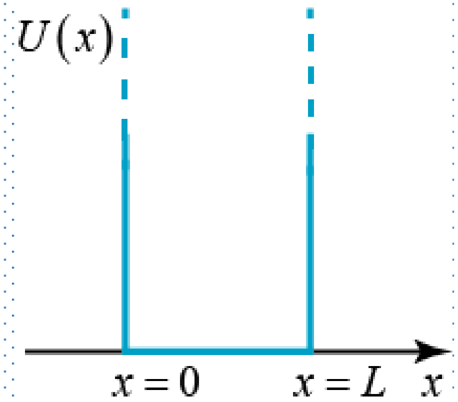
$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

unde $\omega = E/\hbar$

Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Particula în ”groapa” de potențial

$$U(x)=\begin{cases}0, \text{ dacă } 0\le x\le L,\\ \infty, \text{ dacă } x<0;\ x>L.\end{cases}$$



$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi=0 \;\Rightarrow\; \frac{d^2\psi}{dx^2}+\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}E}_{k^2}\psi=0 \;\Rightarrow\; \frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0$$

$$\left.\begin{array}{l}\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx\\ \psi(0)=\psi(L)=0\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{cases}B=0\\ A\sin kL=0\end{cases} \Rightarrow k_n=\frac{n\pi}{L}$$

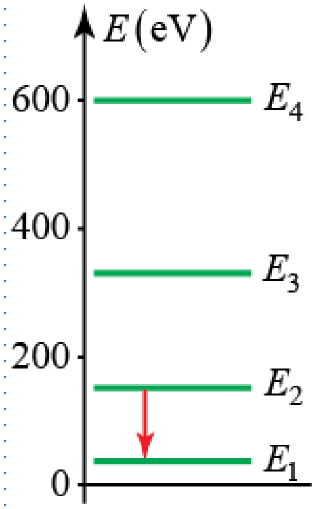
$$k_n=\frac{n\pi}{L} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda_n}=\frac{n\pi}{L} \Rightarrow L=\boxed{n\frac{\lambda_n}{2}};\quad p_n=\hbar k_n=\boxed{n\frac{\pi\hbar}{L}};\quad E_n=\frac{p_n^2}{2m}=\boxed{n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}}$$

Mărimile fizice care posedă numai anumite valori discrete se numesc **mărimi fizice cuantificate**.

Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Valorile cuantificate ale energiei microparticulelor se numesc **niveluri de energie**, iar numărul întreg *n* este numit **număr cuantic**.

$$E_{\min} = E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{\pi^2\left(1,05\cdot 10^{-34}\right)^2}{2\left(9,11\cdot 10^{-31}\right)10^{-20}} = 5,97\cdot 10^{-18}\ \mathrm{J} = 37,3\ \mathrm{eV}$$



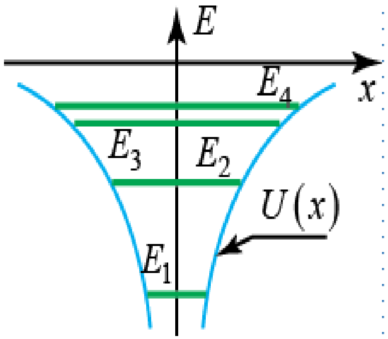
Starea electronului în care $n = 1$ se numește **stare fundamentală.**

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Din condiția de normare a probabilităților

$$\int_0^L \left|\psi_n(x)\right|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx = 1$$

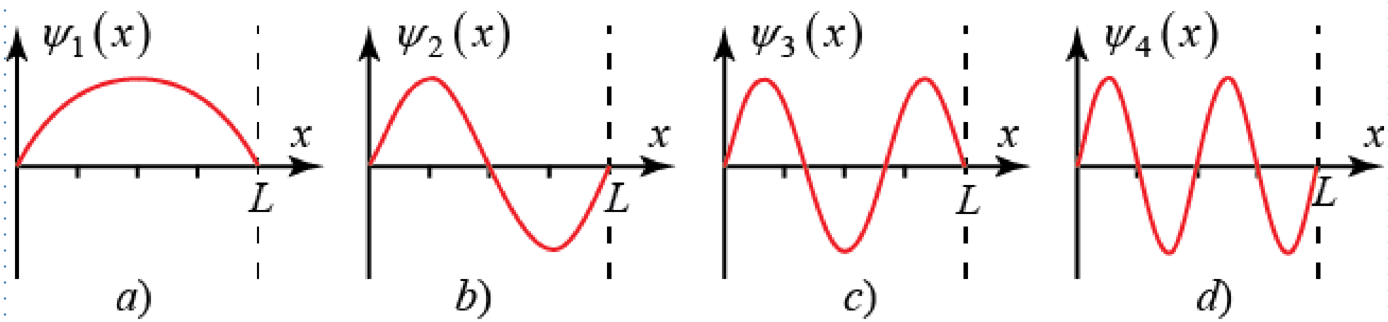
$$\frac{A^2}{2}L = 1 \Rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$



Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

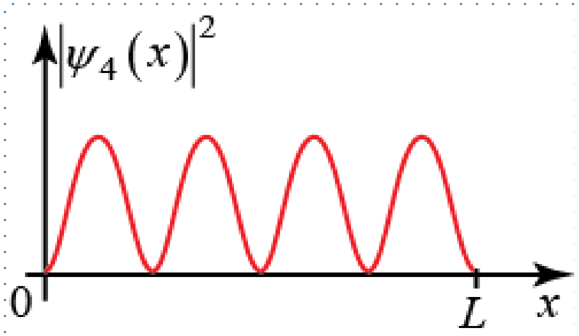
Astfel, funcțiile de undă (funcțiile proprii) ale electronului în groapa unidimensională rectangulară de potențial au aspectul:

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\quad n=1,\,2,\,3,\cdots$$



Densitatea de probabilitate a aflării microparticulei în starea cu numărul cuantic n este

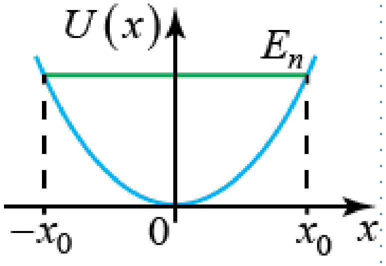
$$|\psi_n(x)|^2=\frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right),\quad n=1,\,2,\,3,\cdots$$



Tema 21. Elemente de mecanică cuantică

Oscilatorul liniar armonic

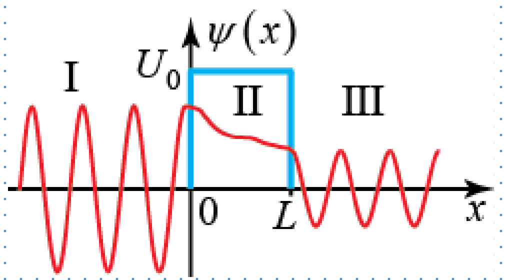
$$U(x)=\frac{kx^2}{2}=\frac{m\omega_0^2x^2}{2} \qquad \frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{m\omega_0^2x^2}{2}\right]\psi=0$$



$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad n=0,1,2,3,\cdots$$

$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ – energia de zero a oscilatorului

Efectul tunel



Transparența barierei de potențial

$$T=\frac{\psi_{III}^*\psi_{III}}{\psi_I^*\psi_I}=\left|\frac{\psi_{III}}{\psi_I}\right|^2$$

Transparența barierei rectangulare de potențial

$$T=T_0e^{-\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}$$

Transparența barierei de potențial de formă arbitrară

$$T=T_0\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}dx\right]$$