**Cursul 11**

**Noțiuni de mecanică cuantică: structura realității fizice în viziunea mecanicii cuantice: funcția de undă; ecuația Schrödinger**

**Structura realității fizice în viziunea mecanicii cuantice**

În capitolele anterioare am prezentat teoriile despre realitatea fizică așa cum apare ea la nivelul de existență al speciei umane. Aceste teorii împart realitatea fizică în trei părți: fenomenele mecanice; fenomenele electromagnetice și fenomenele termodinamice. Aceste trei capitole ale fizicii s-au dezvoltat până la sfârșitul secolului al XIX-lea formând ceea ce se numește astăzi „fizică clasică”, „fizică macroscopică” sau „fizică fenomenologică”. În cadrul acestei fizici au apărut unele contradicții. Una din aceste contradicții am studiat-o și noi și anume contradicția dintre modul în care se modifică legile mișcării la trecerea de la un sistem de referință la altul (transformările Galilei) și modul în care se modifică legile electrodinamicii la trecerea de la un sistem de referință la altul (nerespectarea de către ecuațiile lui Maxwell a transformărilor Galilei). Această contradicție a fost rezolvată de către Einstein în 1905 prin formularea teoriei relativității restrânse. În principiu această teorie modifică mecanica clasică prin înlocuirea transformărilor Galilei cu transformările Lorentz. De multe ori se afirmă că teoria lui Einstein este tot o fizică macroscopică astfel încât unii autori consideră această teorie ca reprezentând închiderea firească a fizicii fenomenologice. O altă contradicție este cea dintre mecanică și termodinamică. Deși termodinamica, apărând mult mai târziu decât mecanica, a împrumutat multe concepte de la aceasta, totuși nu poate fi considerată, ca electrodinamica, complementară cu mecanica. Pe lângă faptul că folosește concepte care nu se regăsesc în mecanică (cum este conceptul de temperatură sau conceptul de entropie) are și principii care sunt în contradicție cu principiile mecanicii. Cea mai frapantă contradicție dintre mecanica clasică și termodinamica fenomenologică este ireversibilitatea fenomenelor termodinamice în raport cu reversibilitatea mișcării mecanice. Această contradicție din interiorul fizicii clasice nu putea fi tolerată, astfel încât s-au căutat soluții la această problemă. Soluția găsită a constat în acceptarea supremației mișcării mecanice asupra celei termice. Acest lucru putea fi realizat presupunând că continuitatea mediilor materiale este doar o aparență. La nivel microscopic, sistemele termodinamice fiind alcătuite din puncte materiale (atomi, cum au fost denumiți). Atomii, se presupunea, se mișcă conform legilor mecanicii clasice. Deoarece numărul atomilor ce intră într-un sistem termodinamic este foarte mare, proprietățile lor globale pot fi date de valorile medii ale mărimilor mecanice (de exemplu: numărul mediu de atomi din unitatea de volum, energia medie a unui atom, etc). Valorile medii ale mărimilor mecanice microscopice sunt mărimile termodinamice (de exemplu, temperatura termodinamică reprezintă valoarea medie a energiei cinetice a unui atom). Odată găsită această legătură între mecanică și termodinamică, fizica clasică părea să se îndrepte rapid spre o teorie definitivă asupra lumii. Interpretarea statistică a fenomenelor termodinamice a produs o serie de rezultate în concordanță cu experiența dar a scos la iveală și un număr de fenomene ce nu puteau să fie justificate în limitele teoriei cinetic-moleculare clasice. Dintre aceste fenomene amintim câteva: distribuția pe frecvențe a radiației electromagnetice emise de către corpurile încălzite, efectul fotoelectric, structura radiației emisă de diferiți atomi (spectrele de linii ale atomilor) etc.

Analizând toate aceste fenomene, fizicienii de la începutul secolului al XX-lea au ajuns la concluzia că obiectele microscopice (atomi, electroni, molecule) nu se mișcă conform legilor mecanicii clasice. În felul acesta au fost nevoiți să dezvolte o fizică specială, diferită de fizica macroscopică, ce se aplică constituenților microscopici ai materiei. ***Fizica ce descrie proprietățile și evoluția constituenților microscopici ai materiei se numește fizică cuantică***. Fizica cuantică se împarte în două capitole mari: mecanica cuantică și fizica cuantică relativistă.

***Mecanica cuantică este fizica cuantică ce neglijează aspectele relativiste ale proceselor fizice.***

Principiile mecanicii cuantice s-au finalizat în anul 1927 odată cu interpretarea statistică a funcției de undă. Fizica cuantică relativistă este un domeniu al fizicii moderne care nu s-a finalizat. Deși s-au făcut progrese semnificative în ultimii peste 100 de ani, nu s-a reușit sinteza dintre viziunea cuantică asupra lumii și viziunea relativistă aspra acesteia. În cele ce urmează, vom studia doar bazele mecanicii cuantice. Acest model asupra realității fizice se aplică doar în cazul proceselor ce implică energii mici pe particulă.

Pentru a înțelege structura realității fizice în viziunea mecanicii cuantice trebuie să pornim de la modelul clasic mecano-electromagnetic asupra lumii. În acest model lumea este alcătuită din spațiu, timp, puncte materiale și câmp electromagnetic. Neglijând efectele relativiste, spațiul și timpul au proprietăți independente de punctele materiale și câmpurile electromagnetice. Proprietățile acestor elemente de realitate fizică au fost formalizate în mecanica clasică și au fost formulate și de noi în Cursul 2. Punctele materiale constituie partea mecanică a lumii. Fiecare punct material este lipsit de volum și este caracterizat printr-o mărime scalară invariantă numită masă. La orice moment de timp, punctul material este caracterizat de un ansamblu de proprietăți extrinseci lui format din poziția sa și impulsul pe care îl are . Acest ansamblu se numește starea mecanică a acestuia. Pentru a putea interacționa cu câmpurile electromagnetice, punctului material i s-a asociat și o altă mărime fizică numită sarcină electrică (q). Fizica clasică nu a considerat că punctele materiale ar avea și alte proprietăți. Modificarea în timp a stării punctului material se face în mod determinist pornind de principiile mecanicii clasice (formulate în modul în care le-a enunțat Newton sau așa cum le-a reformulat mecanica analitică), de la cunoașterea „legii forței” ce acționează asupra acestora (sau echivalent, a lagrangeanului sau hamiltonianului) precum și a „condițiilor inițiale” . Câmpul electromagnetic reprezintă elementul de realitate fizică electromagnetică a lumii. El este continuu și este caracterizat în orice punct din spațiu de intensitatea câmpului electric și a câmpului magnetic ( (sau echivalent, de potențialele electric și magnetic -). Legile acestui element de realitate fizică sunt sintetizate de ecuațiile lui Maxwell. Între sistemul mecanic și sistemul electromagnetic există interacțiuni: câmpul electromagnetic exercită forțe asupra punctelor materiale modificându-le starea mecanică iar sistemul mecanic, prin sarcina electrică, generează câmpuri electromagnetice. Reuniunea dintre sistemul mecanic și sistemul electromagnetic a primit denumirea de materie. Neglijând efectele relativiste, putem spune că mișcarea materie nu influențează proprietățile spațiului și ale timpului. Deși mecanica clasică poate fi aplicată teoretic și altor tipuri de câmpuri, fizica clasică nu a cunoscut alte tipuri de câmpuri astfel încât (neglijând câmpul gravitațional ce are efecte doar la aglomerări mari de puncte materiale) putem afirma că fizica fenomenologică nu a studiat decât mișcarea punctelor materiale în câmpurile electromagnetice.

Mecanica cuantică pornește de la structura clasică a realității fizice făcând unele corecții asupra acesteia. Să vedem cum apare realitatea fizică în această știință. Elementele de realitate fizică sunt: spațiul, timpul, particulele și câmpul electromagnetic. Spațiul și timpul au aceleași proprietăți ca și în cazul mecanicii clasice. Aceste proprietăți nu pot fi modificate prin interacțiunea cu materia. Deci spațiul și timpul au un caracter absolut. Particula este echivalentul cuantic al punctului material. Proprietățile intrinseci ale acestora sunt cele ale punctului material (nu au volum și au o masă și o sarcină invariante la schimbarea sistemului de referință) dar au în plus, eventual, și alte proprietăți intrinseci cum sunt, de exemplu: momentul cinetic intrinsec (spinul , cum este denumit), momentul magnetic intrinsec (propriu) - etc. Aceste proprietăți sunt ca și masa și sarcina invariante. Deși asociază particulelor și alte proprietăți intrinseci pe lângă cele clasice, particulele mecanicii cuantice pot fi echivalate cu punctele materiale ale fizicii clasice (nu există motive interne ale fizicii clasice să nu admită din principiu că punctele materiale pot să aibă și alte proprietăți decât masa și sarcina electrică). Câmpul electromagnetic este descris în cadrul mecanicii cuantice ca și în cazul electrodinamicii clasice prin cele două potențiale . Mai mult, legile acestui element de realitate fizică sunt descrise tot de ecuațiile lui Maxwell. Deși, formal, mecanica cuantică admite posibilitatea aplicării ei și la altfel de câmpuri, totuși se constată că celelalte câmpuri fizice cunoscute astăzi implică energii mari și deci utilizarea corecțiilor relativiste. Aceasta înseamnă depășirea cadrului mecanicii cuantice. Constatăm astfel că, în limitele de aplicare a mecanicii cuantice, elementele de realitate fizică ce sunt luate în considerare sunt aceleași cu cele acceptate de fizica clasică: spațiul, timpul, punctele materiale și câmpurile electromagnetice. Mai mult, legile spațiului, ale timpului și ale câmpului electromagnetic sunt perfect identice în cele două teorii. Ceea ce aduce cu adevărat nou mecanica cuantică este noțiunea de stare a particulelor și de aici și modificarea legilor de mișcare.

**Funcția de stare (de undă)**

Așa cum cunoaștem, extrinsec (în raport cu un sistem de referință) starea mecanică a punctului material este descrisă de ansamblul vector de poziție – impuls. Acest ansamblu evoluează determinist în timp în sensul în care cunoscând valoarea lui la un anumit moment de timp și forțele ce acționează asupra punctului material putem prezice cu exactitate valoarea stării mecanice la orice lat moment de timp, folosind legea a doua a mecanicii.

În urma experiențelor fizice, s-a ajuns la concluzia că particulele microscopice nu pot fi caracterizate de starea mecanică clasică. În locul acesteia, mecanica cuantică introduce un alt concept de stare. Acest concept de stare cuantică este formulat sub forma unui postulat ce poate fi enunțat astfel:

**Primul postulat al mecanicii cuantice: *Starea oricărei particule este caracterizată de o funcție cu valori complexe de variabile reale numită funcție de stare sau funcție de undă .***

Se admite că această funcție are o serie de proprietăți valabile pentru toate stările posibile ale tuturor particulelor astfel încât ele pot fi considerate ca incluse în enunțul primului postulat al mecanicii cuantice.

***Proprietăți generale ale funcțiilor de stare***

Fie

o funcție de stare a unei particule (pentru simplificare, presupunem că particula nu are spin). Această funcție are următoarele proprietăți:

1. Este o funcție continuă și derivabilă în orice punct din spațiu și la orice moment de timp;
2. Fiind date două funcții de stare ale unei particule se definește produsul scala al acestora prin relația:

Se poate verifica că această definiție respectă toate cerințele impuse de definiția produsului scalar învățate la cursul de algebră liniară;

1. Pornind de la definiția produsului scalar a două funcții de stare, se definește norma unei funcții de undă prin relația:
2. Se postulează că norma oricărei funcții de stare este unu

Se spune că funcțiile de stare sunt normate la unitate.

În cazul unui sistem cuantic format din mai multe particule, starea cuantică a sistemului este descrisă de o funcție de stare unică: fie N numărul de particule din sistem, fiecare particulă are 3 coordonate, dacă între particule nu există legături, numărul de grade de libertate va fi 3N. Deci, ținând cont și de timp, funcția de undă va fi:

Și pentru această funcție de stare sunt valabile, cu generalizările evidente, proprietățile de mai sus. Este interesant dă observat următoarea consecință deosebit de importantă din punct de vedere fizic: *starea unui sistem cuantic format din N particule independente nu poate fi considerată ca o suprapunere a N stări cuantice specifice fiecărei particule în parte.*

Pe baza proprietăților rezultate din primul postulat al mecanicii cuantice, asupra ansamblului de funcții de stare ce pot caracteriza un sistem de particule se pot face o serie de observații de natură matematică (formală). Astfel: fie un sistem de cuantic format din N particule. Presupunem că este mulțimea tuturor stărilor posibile ale acestui sistem. Această mulțime se poate organiza ca un spațiu vectorial infinit dimensional. La cursul de algebră liniară ați învățat noțiunea de spațiu vectorial finit dimensional. Pentru aceste mulțimi, elementele constituente se numesc vectori. În interiorul acestor mulțimi de vectori se pot realiza combinații liniare de vectori, adică expresii de felul:

unde ai sunt scalari iar vi sunt vectori. Dacă ansamblu de scalari trebuie să fie toți zero astfel încât combinația liniară să fie egal cu vectorul nul, se spune că vectori vi sunt liniar independenți. Valoarea maximă a lui n se numește dimensiunea spațiului vectorial. Mulțimea funcțiilor de stare ale unui sistem cuantic poate fi și ea organizată ca un spațiu vectorial. Spre deosebire de spațiile vectoriale învățate la cursul de algebră liniară, spațiul vectorial al stărilor cuantice ale unui sistem se organizează ca un spațiu vectorial a cărei dimensiune este infinită. În general, pe spațiile vectoriale se pot defini produse scalare și de aici norme ale vectorilor. Astfel de mulțimi se numesc spații vectoriale normate. Cum pe mulțimea funcțiilor de stare se definește produsul scalar și norma, mulțimea stărilor cuantice ale unui sistem de particule se organizează ca un spațiu vectorial normat infinitezimal. Deoarece funcțiile de stare sunt elemente ale unui spațiu vectorial, ele se mai numesc și vectori de stare. Din motive fizice, toți vectorii de stare se normează la unitate.

Pentru un spațiu vectorial n dimensional un ansamblu format din n vectori liniar independenți constituie o bază a acelui spațiu. Orice vector din acel spațiu poate fi scris ca o combinație liniară a vectorilor bazei:

Dacă pe spațiul vectorial se definește un produs scalar, atunci:

Prin generalizare, și pentru spațiul vectorial infinit dimensional al stărilor cuantice, dacă reprezintă o bază, atunci orice vector de stare se poate scrie astfel:

Evident:

Spațiile vectoriale infinit dimensionale pe care s-a definit o normă se numesc spații Hilbert. Rezultă că mulțimea sistem cuantice ale unui sistem de particule se organizează ca un spațiu Hilbert.

Până acum am studiat numai unele proprietăți matematice ale vectorilor de stare. Fizica este totuși o știință bazată pe experiment. Din acest motiv, funcția de stare trebuie corelată cu o anumite mărimi observabile la nivelul nostru. În fizica clasică, fenomenele care au proprietate ca la orice moment de timp să fie caracterizate printr-o mărime a cărei valoare să fie definită în orice punct din spațiu sunt undele. Cum funcțiile de stare sunt definite la orice moment de timp în orice punct din spațiu, ele seamănă formal cu undele din fizica clasică. Din acest motiv vectorilor de stare li se mai spune și funcții de undă. După cum știm, o undă este caracterizată prin pulsația ω și prin vectorul de undă . Trebuie să admitem că și funcțiilor de undă din mecanica cuantică sunt caracterizate de aceste mărimi. Dar aceste mărimi, ca și funcția de stare în ansamblu, nu sunt direct observabile. Problema care se pune este stabilirea unor relații între aceste mărimi și niște mărimi direct măsurabile. Să presupunem că avem, din motive didactice, un sistem cuantic format dintr-o singură particulă. Să presupunem că printr-un procedeu experimental oarecare, putem asocia acestui sistem mărimile macroscopice direct măsurabile energie cinetică E și impuls . Experiența arată că în acest caz între mărimile ce caracterizează funcția de undă și mărimile macroscopice direct măsurabile există relațiile:

Aceste două relații, stabilite pe baza experienței constituie sinteza bazei experimentale a mecanicii cuantice. Contanta

se numește constanta lu Planck redusă. Constanta h are valoarea experimentală:

După cum am învățat, o undă armonică plană poate fi scrisă sub formă complexă astfel:

Din motive de eleganță a calculului, se consideră funcțiile de stare cuantică ca fiind complex conjugatul acestei ecuații. Folosind relațiile de legătură între mărimile de undă și energie și impuls, funcția de undă cuantică armonică plană va fi:

Această formulă poate fi generalizată pentru un sistem cuantic format din N particule.

După cum am arătat, funcțiile de undă trebuie să fie normate la unitate. Undele armonice plane nu sunt normabile la unitate (integrala de definiție a normei este infinită în acest caz). Din acest motiv, undele armonice plane nu pot să fie funcții de stare ale unui sistem cuantic real. Dar, tot din teoria undelor, se știe că o undă reală poate fi considerată ca o suprapunere de unde armonice plane (serie Fourier). De exemplu, considerând energia constantă, putem să scriem un vector de stare ca o suprapunere de unde armonice plane cu impulsuri diferite. Rezultă astfel:

Această ecuație se numește pachet de unde. Se poate demonstra că un pachet de unde poate fi normat la unitate.

**Ecuația lui Schrödinger**

În mecanica clasică, așa cum am spus, starea sistemului este de scrisă de ansamblul poziție impuls. Această stare se modifică în timp în mod determinist. Legea care descrie evoluția în timp a stării mecanice este o ecuație diferențială liniară. Ea poate fi dată sub mai multe forme (de exemplu: sub forma legii a doua a lui Newton, ecuațiile Lagrange sau ecuațiile Hamilton). Mecanica cuantică înlocuiește starea mecanică clasică cu o nouă noțiune -funcția de stare. Având o altă noțiune de stare, legea de evoluție a acesteia în timp nu mai poate ca cea utilizată în mecanica clasică. În locul ecuațiilor enumerate mai sus, mecanica cuantică introduce o nouă lege de evoluție a stării.

**Postulatul al doilea al mecanicii cuantice:** ***Legea de evoluție în timp a vectorului de stare este dată de ecuația lui Schrödinger temporală care, în cazul unui sistem format dintr-o singură particulă, are forma:***

unde V(x,y,z) reprezintă potențialul în care se află particula. În cazul unui sistem de mai multe particule, așa cum am mai arătat funcția de undă depinde te toate coordonatele particulelor și, prin consecință, și potențialul înc care evoluează sistemul. Laplacianul se extinde și el la toate cele 3N coordonate.

Referitor la ecuația Schrödinger sunt de făcut mai multe observații. Dintre acestea două sunt foarte importante:

1. Deoarece ecuația de evoluție a funcției de undă este o ecuație diferențială liniară, soluția acestei ecuații este unică pentru o stare inițială dată. Aceasta înseamnă că evoluția în timp a funcției de stare a unui sistem cuantic este deterministă;
2. Se poate demonstra că dacă vectorul de stare de la momentul inițial este normat la unitate, din ecuația lui Schrödinger rezultă că la orice moment de timp ulterior vectorul de stare rămâne normat la unitate.

Dacă sistemul cuantic evoluează astfel încât mărimea observabilă numită energie nu se modifică în timp, putem rescrie vectorul de undă astfel:

Înlocuind această funcție în ecuația Schrödinger temporală obținem o nouă ecuație:

Această ecuație se numește ecuația lui Schrödinger atemporală. Ea descrie așa numitele stări cuantice staționare.

**Aplicație: particula în groapa de potențial dreptunghiulară cu pereți infiniți**

Pentru a exemplifica modul în care se folosesc conceptele teoretice introduse anterior în rezolvarea diferitelor probleme concrete, vom studia un caz particular de problemă de fizică cuantică.

Fie o particulă de masă m ce există într-o zonă finită din spațiu astfel încât ea nu poate părăsi acea regiune. Pentru a simplifica problema, considerăm cazul unidimensional. Pentru ca particula să nu poată părăsi acest domeniu spațial, la marginile domeniului acționează un câmp descris de o funcție de potențial a cărei valoare este foarte mare. Simplificând, putem considera că potențialul are valoarea infinită la marginile domeniului. Reprezentarea geometrică a problemei noastre este ca în figura alăturată.

V

0 l x

Funcția de potențial este:

Pentru acest sistem se aplică ecuația lui Schrödinger netemporală unidimensională:

Deoarece particula nu poate ieși din groapa de potențial, rezultă că valoarea funcției de undă în afara domeniului trebuie să fie nulă. Rezultă astfel condițiile la limită:

În interiorul domeniului spațial potențialul este nul astfel încât ecuația lui Schrödinger devine:

Fiind o ecuație diferențială liniară de ordinul doi, căutăm soluții de forma:

Vom face notația:

Ecuația caracteristică va fi:

de unde:

Ținând cont de cele învățate la studiul mișcării oscilatorii armonice, rezultă că soluția generală poate fi scrisă sub forma:

Constantele A și B se determină din condițiile la limită:

Deci:

Cum:

pentru că B nu poate să fie și el nul, deoarece ar rezulta că funcția de undă este peste tot nulă, rezultă:

și deci:

De unde rezultă valorile posibile ale energiei:

Constatăm că particula aflată în groapa de potențial nu poate să aibă orice valoare a energiei ci numai valori discrete ale acesteia. Numărul n ce cuantifică energia particulei poartă numele de număr cuantic principal.

Funcțiile de undă pe care le poate avea particula sunt:

Așa cum am afirmat în teorie, funcțiile de undă trebuie să aibă norma egală cu unitatea. Din această condiție rezultă:

Cum:

rezultă: