

2. NATURA ONDULATORIE A MICROPARTICULELOR DESCRISĂ DE FIZICA CUANTICĂ

2.1. Unde atașate microparticulelor.

Microscopul electronic

Aspectul dual al câmpului electromagnetic a fost extins și asupra particulelor elementare: electron, proton, neutron, cărora li se atribuie prin simetrie proprietăți ondulatorii. Această idee îi aparține lui Louis de Broglie, iar undele atașate microparticulelor se numesc unde de Broglie. Conform ipotezei lui de Broglie fiecărei particule de masă m și viteza v care are energia $E=mc^2$ și impulsul $p=mv$ i se asociază o undă caracterizată prin lungimea de undă:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad p = \hbar k \quad (2.1)$$

Ipoteza lui de Broglie a fost verificată experimental prin experiența lui Dawisson și Germer, Fig.2.1. S-a pornit de la ideea că proprietățile ondulatorii ale electronilor se pun în evidență prin fenomene de tip ondulatoriu, de exemplu, prin difracție. Cu ajutorul relației (2.1) se evaluează constanta de difracție necesară. Un electron accelerat la tensiunea U are energia cinetică :

$$E_c = \frac{p^2}{2m} = eU \quad (2.2)$$

și lungimea de undă:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} = \frac{12,25}{\sqrt{U}} \quad [\text{\AA}] \quad (2.3)$$

a cărei valoare este de ordinul 1Å. Din aceste motive s-a utilizat ca rețea de difracție pentru electroni sistemul de noduri ale unei rețele cristaline (de nichel).

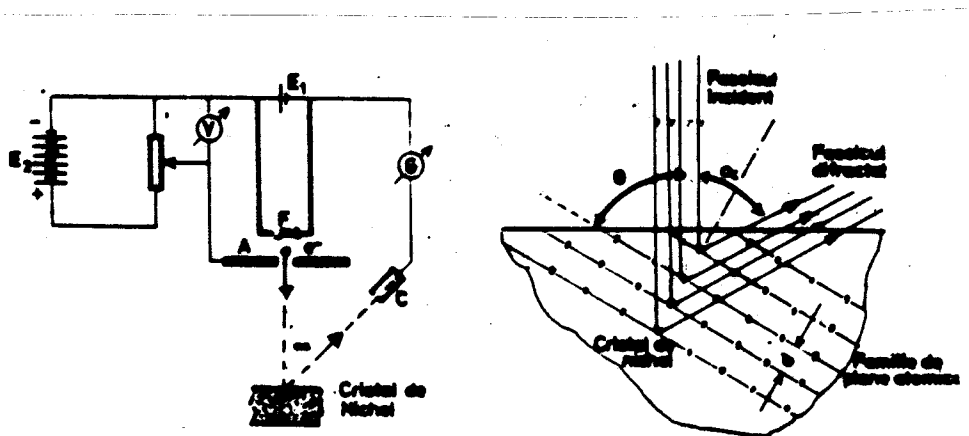


Fig.2.1.

Electronii emiși de un tun electronic sunt difracțați de rețeaua cristalină și detectați de o cameră de ionizare ce se poate roti, Fig.2.1. S-a constatat că pe anumite direcții intensitatea fasciculului de electroni prezintă maxime asemănătoare celor de difracție. Ele se explică prin interferența constructivă a undelor electronice în urma difracției pe rețea în conformitate cu condiția:

$$2d \sin\theta = n\lambda \quad (2.4)$$

unde d este constanta rețelei cristaline de nichel cu valoarea $d=0,91 \text{ \AA}$. Primul maxim s-a observat pentru $U=54 \text{ V}$ în direcția $\theta=65^\circ$. Calculând λ experimental cu (2.4) și teoretic cu (2.3) s-a obținut o foarte bună concordanță, de fapt confirmarea dualității corpuscul-undă la nivel microscopic.

Experimente asemănătoare cu cel de mai sus au fost efectuate cu neutroni, atomi de heliu și molecule de hidrogen. Ele au confirmat că undele de materie există și că lungimea

lor de undă este dată de relația lui de Broglie.

Comportarea ondulatorie a microparticulelor este studiată de o ramură relativ nouă a științei numită optică electronică. Una din realizările sale este microscopul electronic.

Se știe că puterea separatorie a instrumentelor optice este invers proporțională cu lungimea de undă a radiației utilizate, datorită fenomenelor de difracție. Cu microscopul optic nu se pot obține imagini clare ale obiectelor mai mici de $0,15 \mu\text{m}$. Prin înlocuirea fasciculului de lumină în domeniul vizibil sau ultraviolet cu fascicul de electroni puterea separatorie a crescut deoarece lungimea de undă atașată electronilor este mult mai mică, în domeniul razelor X.

O altă modificare esențială este înlocuirea lentilelor optice cu lentile electrice sau magnetice care deviază fasciculul de electroni în scopul formării imaginii. Din cele expuse rezultă că microscopul electronic are o structură mult mai complexă decât cel optic, în plus: electronii se deplasează de la sursă până la ecran prin vid, iar imaginea electronică se transformă în imagine optică cu ajutorul unui ecran fluorescent. Tensiunile curențe de accelerare a electronilor sunt în domeniul 30-50 000 V, dar pentru ca probele biologice să nu se expună un timp prea îndelungat în condiții de vid s-au folosit tensiuni de 2 000 000 V.

S-au construit și microscopae protonice și ionice care au condus la mărimi de 10-15 ori mai mari decât cele realizate cu microscopul electronic, cu care s-au obținut fotografii ale pozițiilor atomilor în rețeaua cristalină.

În concluzie, atât substanța cât și câmpul au un caracter dual. Doar succesiunea istorică a descoperirilor a determinat ca întâi să aflăm caracterul ondulatoriu al câmpului și apoi pe cel corpuscular, în timp ce particulelor li s-a aflat mai întâi caracterul discret și apoi cel

ondulatoriu.

2.2. Principiul de incertitudine

Proprietatea microparticulelor de a se comporta mai degrabă ca o undă (fenomen răspândit în spațiu) decât ca un corpuscul (fenomen localizat) are ca efect apariția unei imprecizii în determinarea mărimilor caracteristice: poziție, impuls, energie, durată. Faptul că microparticulele au atât proprietăți corpusculare cât și ondulatorii arată că ele nu pot fi privite nici ca puncte materiale, nici ca unde, ci ca entități materiale cu proprietăți deosebite de cele ale corpurilor macroscopice și ale undelor electromagnetice. Să considerăm că unui electron cu impuls p i se atașează o undă sinusoidală cu lungimea de undă $\lambda = h/p$. Extinderea în spațiu a acestei unde poate fi diferită, Fig.2.2.

Imprecizia de determinare a poziției electronului este dată de lungimea trenului de undă:

$$\Delta x \sim n\lambda = n \frac{h}{p} \quad (2.5)$$

Imprecizia de determinare a impulsului depinde de imprecizia în determinarea lungimii de undă și este cu atât mai mare cu cât numărul n de sinusoidă este mai mic:

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \sim \frac{1}{n} \quad (2.6)$$

Din Fig.2.2. se observă că: cu cât este mai bine definită poziția cu atât impulsul este mai prost definit și invers. Acestea rezultă și prin înmulțirea relațiilor (2.5) și (2.6):

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim h \quad (2.7)$$

Adevărata relație de incertitudine este o inegalitate, deoarece se pot imagina trenuri de undă ca ultimul din Fig.2.2. pentru care imprecizia de determinare a

impulsului și a poziției să fie oricât de mare. Deci:

$$\Delta x \Delta y \geq h \quad (2.8)$$

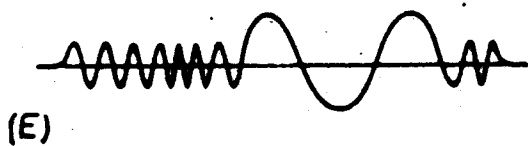
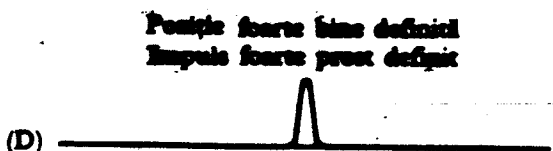
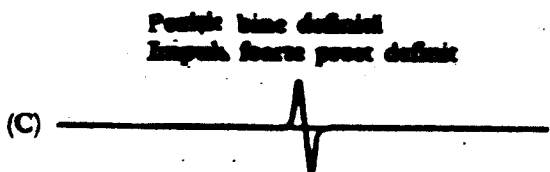
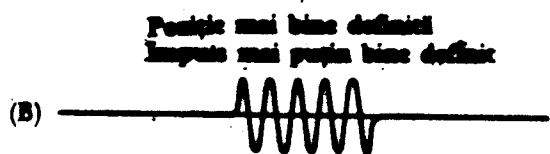
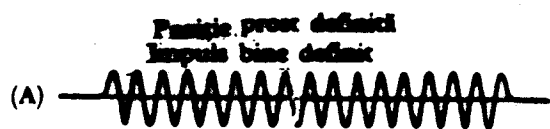


Fig.2.2.

Relația (2.8) cunoscută sub numele de relația de incertitudine (de nedeterminare) a lui Heisenberg arată că impulsul și poziția unei microparticule nu se pot determina simultan cu maximă precizie. În spațiul tridimensional relațiile de incertitudine se scriu:

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq h \\ \Delta y \Delta p_y &\geq h \quad (2.9) \\ \Delta z \Delta p_z &\geq h \end{aligned}$$

Din Fig.2.2. se deduce că imprecizia în determinarea timpului Δt este invers proporțională cu imprecizia în determinarea frecvenței ν :

$$\Delta t \sim \frac{1}{\Delta \nu} \quad (2.10)$$

Înmulțind cu h și înlocuind cu $\Delta E = h\Delta \nu$, rezultă că:

$$\begin{aligned} \Delta E \Delta t &\sim h \\ \Delta E \Delta t &\geq h \quad (2.11) \end{aligned}$$

Adică, energia unei microparticule și durata trecerii sale

printr-un punct dat nu pot fi cunoscute simultan cu maximă precizie.

Principiul de incertitudine arată că în fizica cuantică conceptul de traiectorie nu există, deoarece traiectoria nu poate fi precis determinată. În mecanica clasică starea unei particule este reprezentată în spațiul fazelor printr-un punct de coordonate (x, p) , mișcarea punctului determinând o curbă, Fig.2.3.a.

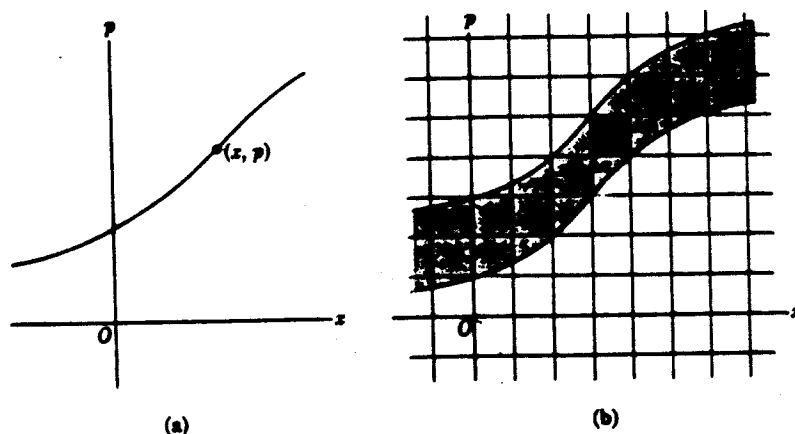


Fig.2.3.

În mecanica cuantică spațiul fazelor este divizat în celule de dimensiuni Δx și Δp astfel încât $\Delta x \cdot \Delta p = h$, iar un punct reprezentativ pentru o microparticulă există oriunde într-o celulă la un moment dat. Prin scurgerea timpului punctul reprezentativ străbate diferite celule, Fig.2.3.b.

În acest context relațiile de imprecizie apar ca o limitare a extinderii conceptelor clasice în domeniul microcosmosului. Trebuie remarcat că imprecizia este atât teoretică cât și practică. Orice încercare de a determina simultan cu maximă precizie poziția și impulsul unei microparticule înseamnă o perturbație introdusă de sistemul de măsurare.

2.3. Proprietățile și semnificația funcției de undă

Cunoaștem că fenomenele ondulatorii sunt descrise printr-o funcție de undă $\Psi(x, t)$ care reprezintă pentru undele elastice o distanță, iar pentru undele electromagnetice valori ale vectorilor E - intensitate a câmpului electric și B - inducție a câmpului magnetic. Să vedem ce reprezintă funcția de undă atașată microparticulelor.

a. presupunem că atașăm o undă monocromatică de forma:

$$\Psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad (2.12)$$

Viteza de propagare a undei este viteza punctelor de fază constantă:

$$v_f = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v} > c \quad (2.13)$$

mai mare decât viteza luminii; deci, o undă monocromatică nu poate reprezenta o particulă.

b. presupunem că atașăm un pachet de unde format prin suprapunerea unui număr infinit de unde plane cu vectorul de undă cuprins în intervalul $(k - \Delta k/2, k + \Delta k/2)$:

$$\Psi(x, t) = \int_{k - \frac{\Delta k}{2}}^{k + \frac{\Delta k}{2}} A(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk \quad (2.14)$$

Amplitudinea pachetului de unde diferă de zero într-un interval foarte îngust ce definește poziția particulei, Fig.2.4. Viteza grupului de unde va fi:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2})}{dp} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v \quad (2.15)$$

Un asemenea grup de unde se deplasează cu viteza microparticulei, deci poate descrie o microparticulă. Lărgimea pachetului în domeniul de amplitudine maximă este:

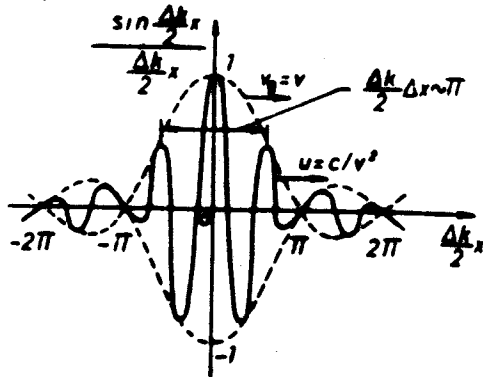


Fig.2.4.

$$\frac{\Delta k}{2} \Delta x = \pi \quad (2.16)$$

$$\rightarrow \Delta p \Delta x = h$$

in concordanță cu principiul de incertitudine.

Funcția de undă Ψ nu reprezintă oscilația unei anumite mărimi fizice legată de particulă. Pătratul său este egal cu probabilitatea de a găsi particula în elementul de volum dV , mai exact, cu

densitatea de probabilitate:

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^* = \frac{dP}{dV} \quad (2.17)$$

Dacă microparticula există în domeniul V , atunci $P=1$ și rezultă condiția de normare a funcției de undă:

$$\int_V \Psi\Psi^* dV = 1 \quad (2.18)$$

Ψ se mai numește undă de probabilitate și se exprimă printr-o funcție reală sau complexă. Pentru ca o funcție să descrie o particulă trebuie să îndeplinească următoarele condiții:

1. - să fie continuă cu derivata continuă. Discontinuitatea ar însemna inexistența particulei în punctul respectiv;

2. - să fie finită pe tot domeniul considerat;

3. - să fie univocă. Pentru un punct din spațiu nu pot exista mai multe probabilități de existență ale unei particule.

Așa cum în mecanica clasică există problema aflării poziției și vitezei unui corp, în mecanica cuantică există problema aflării funcției de undă atașată microparticulelor,

adică problema aflării probabilităților de existență a microparticulei într-un volum dat.

2.4. Descrierea ondulatorie a microparticulelor prin ecuația lui Schrödinger

În mecanica cuantică starea unui sistem este descrisă de funcția de undă obținută ca soluție a unei ecuații propuse de Schrödinger. Această ecuație joacă în fizica cuantică același rol ca legea a doua a dinamicii a lui Newton în fizica clasică.

Ecuația lui Schrödinger se postulează, iar comparația cu rezultatele experimentale este dovada valabilității sale. În continuare vom prezenta un mod formal de deducere a acestei ecuații.

Considerăm că ecuația generală a undelor plane unidirecționale:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0 \quad (2.19)$$

este verificată de undele de Broglie, considerate ca funcții de poziție și de timp:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x) \cdot \Psi(t) = e^{i\omega t} \cdot \Psi(x) \quad (2.20)$$

Efectuăm derivatele parțiale, le înlocuim în (2.19) și obținem:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{v^2} \Psi(x) = 0 \quad (2.21)$$

Dar $\omega/v = k = p/\hbar$. Energia totală și impulsul unei particule de masă m , cu energia cinetică $E_c = p^2/2m$ ce se mișcă într-un câmp de forțe cu energia potențială $U(x)$, sunt:

$$E = E_c + U(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

$$p = \sqrt{2m[E - U(x)]}$$

Prin înlocuirea relației (2.22) în relația $\omega/v=p/\hbar$ și apoi în (2.21) se obține:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \Psi(x) = 0$$

in spațiul cartezian: (2.23)

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x, y, z)] = 0$$

Ecuția (2.24) este ecuația lui Schrödinger atemporală. Este o ecuație diferențială de ordin doi liniară și omogenă ce descrie proprietățile sistemelor cuantice aflate în stări staționare (energia totală este constantă în timp), fără să precizeze evoluția în timp a acestora. Soluția acestei ecuații trebuie să îndeplinească condițiile din paragraful anterior pentru a descrie o particulă.

2.5. Descrierea cuantică a microparticulei aflată într-o groapă de potențial

În acest paragraf și în următoarele vom aplica

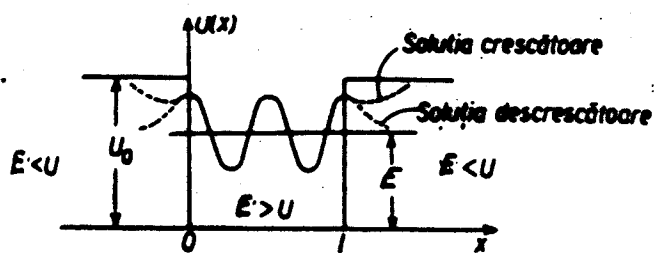


Fig.2.5.

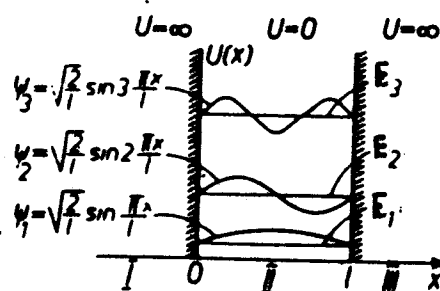


Fig.2.6.

ecuația lui Schrödinger în cazul unor sisteme cuantice simple, concluziile generale acoperind un domeniu mult mai vast.

O groapă de potențial unidimensională, Fig.2.5., este definită în felul următor:

$$U(x) = \begin{cases} U_0; & -\infty < x < 0 \\ 0; & 0 < x < l \\ U_0; & l < x < \infty \end{cases}$$

Un electron într-un atom sau într-un fir metalic se consideră ca o particulă într-o groapă de potențial. Mișcarea sa va fi descrisă de ecuația lui Schrödinger scrisă pentru cele trei domenii:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi_1 &= 0 \\ \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi_2 &= 0 \\ \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi_3 &= 0 \end{aligned} \quad (2.24)$$

Pentru $E < U_0$, cu notațiile:

$$\begin{aligned} k_1^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) < 0 \\ k_2^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} E > 0 \\ k_3^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) < 0 \end{aligned} \quad (2.25)$$

soluțiile ecuațiilor din domeniul (1) și (3) sunt de tip exponențial, deoarece $k_1 = k_3 < 0$; soluția ecuației (2) este de tip oscilatoriu, deoarece $k_2 > 0$.

Vom rezolva complet problema mișcării unei particule într-o groapă de potențial cu pereți infiniți, Fig.2.6. :

$$U(x) = \begin{cases} \infty; & -\infty < x < l \\ 0; & 0 < x < l \\ \infty; & l < x < \infty \end{cases}$$

pentru care ecuația lui Schrödinger și soluția sunt:

$$\frac{\delta^2 \Psi}{\delta x^2} + k^2 \Psi = 0$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (2.26)$$

$$\Psi = A \sin kx + B \cos kx$$

În domeniile (1) și (3) probabilitatea de existență a particulei este nulă ($U_0 = \infty$) și din condiția de continuitate la frontiere se obține :

$$\Psi(0) = \Psi_1(0) = 0 \rightarrow B = 0$$

$$\Psi(l) = \Psi_3(l) = 0 \rightarrow \sin kl = 0 \rightarrow k = n \frac{\pi}{l} \quad (2.27)$$

Valorile lui k sunt multiplii întregi de π/l , $n = 1, 2, 3, \dots$. Aceste restricții se extind și asupra valorilor posibile ale energiei microparticulei:

$$E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} = n^2 E_1 \quad (2.28)$$

Energia are un spectru discret de valori, multiplii întregi ai unei valori fundamentale E_1 .

Funcția de undă devine:

$$\Psi = A \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (2.29)$$

Din condiția de normare se deduce constanta A :

$$\int_0^l \Psi \Psi^* dx = 1$$

$$A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = A^2 \frac{l}{2} = 1 \rightarrow A^2 = \sqrt{\frac{2}{l}} \quad (2.30)$$

deci, funcția de undă este:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (2.31)$$

soluție analoagă undelor staționare pe o coardă fixată la

capete, Fig.2.6.

În concluzie, energia unei microparticule într-o groapă de potențial este cuantificată, iar funcția de undă are valori bine determinate pentru fiecare nivel energetic. Nivelul cu $n=1$ se numește nivel fundamental, iar cele cu $n > 1$ se numesc nivele excitate. Se observă că ecuația lui Schrödinger a permis calculul funcțiilor proprii staționare și al spectrului energetic al microparticulei.

În general, într-un spațiu finit, energia unei particule are un spectru discret de valori; limitarea provine din condițiile pe care trebuie să le îndeplinească funcția de undă.

2.6. Trecerea microparticulelor printr-o barieră de potențial. Efectul tunel

O altă problemă tipică de mecanică cuantică este cea legată de trecerea microparticulelor printr-o barieră de potențial. Fie o barieră de potențial de forma:

$$U(x) = \begin{cases} 0; & -\infty < x < 0 \\ U_0; & 0 < x < l \\ 0; & l < x < \infty \end{cases}$$

Considerăm o microparticulă (un electron) ce se deplasează de la stânga la dreapta având energia E , Fig.2.7. Din punct de vedere :

- clasic, - dacă $E > U_0$ electronul trece din zona (1) în zona (3);
- dacă $E < U_0$ electronul este reflectat de barieră;
- cuantic, - dacă $E < U_0$ există o probabilitate diferită de zero ca electronul să treacă din zona (1) în zona (3);
- dacă $E > U_0$ există o probabilitate diferită de zero ca electronul să fie reflectat.

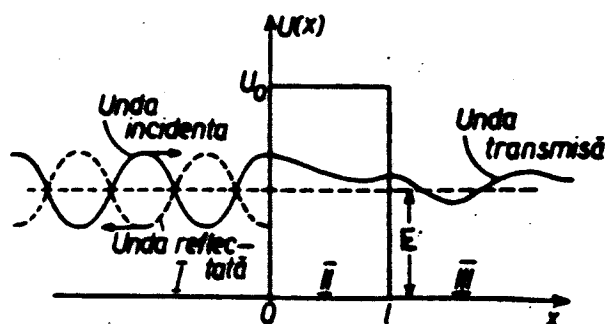


Fig.2.7.

Să studiem cu ajutorul ecuației lui Schrödinger cazul $E < 0$. Scriem pentru cele trei zone trei ecuații:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi_1 = 0 & \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E & \quad \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + k^2 \Psi_2 = 0 \\ \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi_2 = 0 & \quad a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) & \quad \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} - a^2 \Psi_2 = 0 \quad (2.32) \\ \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi_3 = 0 & \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E & \quad \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + k^2 \Psi_3 = 0 \end{aligned}$$

Soluțiile sunt de forma :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, & \text{sol. oscilatorie} \\ \Psi_2 &= A_2 e^{ax} + B_2 e^{-ax}, & \text{sol. exponențială} \quad (2.33) \\ \Psi_3 &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, & \text{sol. oscilatorie} \end{aligned}$$

Ne interesează să calculăm probabilitatea de tunelare dată de pătratul raportului dintre amplitudinea undei transmise A , și a undei incidente A_1 , notat cu a_t :

$$a_3^2 = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 \quad (2.34)$$

Deoarece nu există o nouă barieră de potențial spre $+\infty$, nu există undă reflectată în zona (3), deci $B_3 = 0$. Funcțiile de undă trebuie să satisfacă condițiile de continuitate:

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) &= \Psi_2(0), & \Psi_2(l) &= \Psi_3(l) \\ \Psi_1'(0) &= \Psi_2'(0), & \Psi_2'(l) &= \Psi_3'(l) \end{aligned} \quad (2.35)$$

care conduc la următorul sistem de ecuații:

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 & 1 + b_1 &= a_2 + b_2 \\ ikA_1 - ikB_1 &= aA_2 - aB_2 & i - ib_1 &= na_2 - nb_2 \\ A_2 e^{al} + B_2 e^{-al} &= A_3 e^{ikl} & a_2 e^{al} + b_2 e^{-al} &= a_3 e^{ikl} \\ A_2 e^{al} - aB_2 e^{-al} &= ikA_3 e^{ikl} & na_2 e^{al} - nb_2 e^{-al} &= ia_3 e^{ikl} \end{aligned} \quad (2.36)$$

în care s-a notat :

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1}; \quad b_2 = \frac{B_2}{A_2}; \quad a_2 = \frac{A_2}{A_1}; \quad a_3 = \frac{A_3}{A_1}; \quad n = \frac{a}{k}$$

Se amplifică prima ecuație cu i și se adună cu a doua ecuație; se amplifică ecuația a treia cu $-i$ și se adună cu ecuația a patra; se obține sistemul:

$$\begin{aligned} a_2(n+i) - b_2(n-i) &= 2i \\ a_2 e^{al}(n-i) - b_2 e^{-al}(n+i) &= 0 \end{aligned} \quad (2.37)$$

Din rezolvarea sa rezultă a_2 și b_2 cu care se calculează a_3 :

$$\begin{aligned}
 a_2 &= \frac{-2ie^{-al}(n+i)}{-(n+i)^2e^{-al} + (n-i)^2e^{al}} \\
 b_2 &= \frac{-2ie^{al}(n-i)}{(-n+i)^2e^{-al} + (n-i)^2e^{al}} \\
 a_3 &= \frac{n(a_2e^{al} - b_2e^{-al})}{ie^{ikl}} = \frac{-4nie^{-ikl}}{(n+i)^2e^{-al} - (n-i)^2e^{al}}
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

Factorul e^{-al} de la numitorul fracției a_3 are o valoare foarte mică și se poate neglija.

Coeficientul de transparență al barierei sau probabilitatea de tunelare, adică probabilitatea de trecere a particulei prin bariera dată de relațiile (2.34) și (2.38) este:

$$T = |a_3|^2 = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = a_3 a_3^* = \frac{16n^2}{(n^2+1)^2} e^{-2al} \tag{2.39}$$

Prin înlocuirea lui n în funcție de a și k , expresia lui T devine:

$$T = \frac{16 \frac{U_0 - E}{E}}{\left[\left(\frac{U_0 - E}{E} \right)^2 + 1 \right]^2} e^{-2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} l} \tag{2.40}$$

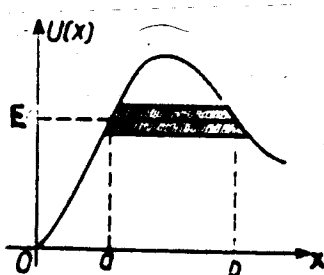


Fig.2.8.

Fracția care înmulțește exponențiala are valoarea apropiată de unitate, deci:

$$T \approx e^{-2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} l} \tag{2.41}$$

Probabilitatea de tunelare este cu atât mai mare cu cât:

- grosimea l a barierei este mai mică,
- energia E a particulei este mai aproape de înălțimea barierei U_0 ,

- masa m a particulei este mai mică.

Dacă bariera are o formă oarecare, Fig.2.8., ea se descompune în bariere de grosimi infinitezimale dx , cu coeficienți de transparență T_i ; coeficientul de transparență în domeniul (a,b) devine:

$$T = \prod T_i = e^{-2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_a^b \sqrt{U(x) - E} dx} \quad (2.42)$$

S-a demonstrat astfel probabilitatea de trecere prin bariera de potențial, când energia microparticulei este mai mică decât înălțimea barierei, fenomen numit și efect tunel. Cu ajutorul efectului tunel se explică emisia la rece a electronilor din metale, dezintegrarea radioactivă alfa, funcționarea diodelor tunel.

2.7. Oscilatorul armonic cuantic

Oscilatorul armonic clasic este un corp de masă m ce se mișcă sub acțiunea unei forțe de tip elastic $F = -kx$. Ecuația dinamică de mișcare și soluția ei sunt cunoscute:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + kx = 0 \quad (2.43)$$

$$x = A \sin \omega t, \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

Energia potențială și energia totală a oscilatorului sunt:

$$E_p = U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (2.43)$$

$$E = \frac{kA^2}{2} = \frac{m\omega^2 A^2}{2}$$

Oscilatorul clasic are un spectru continuu de valori ale energiei.

Oscilatorul armonic cuantic este o microparticulă ce se mișcă într-o groapă de potențial $U(x) = kx^2/2$. Mișcarea de

vibrație a atomilor în molecule are ca model simplificat oscilatorul armonic cuantic. Descrierea acestei mișcări se face cu ajutorul ecuației lui Schrödinger:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0 \quad (2.45)$$

Introducând notațiile următoare găsim:

$$a = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad b = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (a - b^2 x^2) \Psi = 0$$

Efectuând următoarea schimbare de variabilă:

$$bx^2 = z^2, \quad \text{deci} \quad x\sqrt{b} = z \quad (2.47)$$

vom avea:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial z} \sqrt{b} \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} b$$

și ecuația (2.46) devine:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} b + (a - bz^2) \Psi = 0 \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \left(\frac{a}{b} - z^2 \right) \Psi = 0$$

Această ecuație are soluții finite numai dacă :

$$\frac{a}{b} = 2n+1, \quad \text{cu } n=0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.50)$$

În acest caz soluțiile au forma :

$$\Psi_n(z) = e^{-\frac{1}{2}z^2} H_n(z) \quad (2.51)$$

$$H_0(z) = 1 ; \quad H_2(z) = 2(2z^2 - 1)$$

$$H_1(z) = 2z ; \quad H_3(z) = 4z(2z^2 - 2)$$

unde $H_n(z)$ sunt polinoamele Hermite. Din condiția (2.50) rezultă că :

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega = (n + \frac{1}{2}) h \nu \quad (2.52)$$

Deci oscilatorul armonic cuantic are un spectru discret de valori ale energiei. Frecvența ν este frecvența proprie a oscilatorului armonic cuantic determinată de masa particulei m și de constanta elastică k a câmpului de forțe în care are loc oscilația.

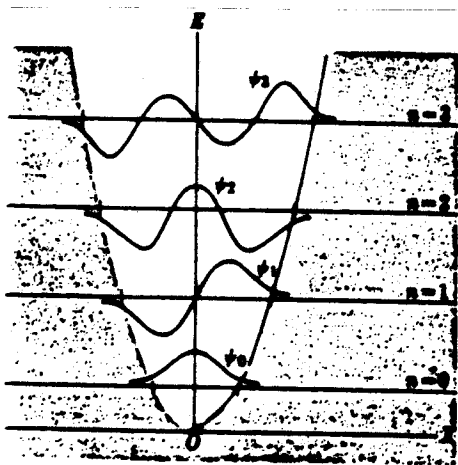


Fig.2.9.

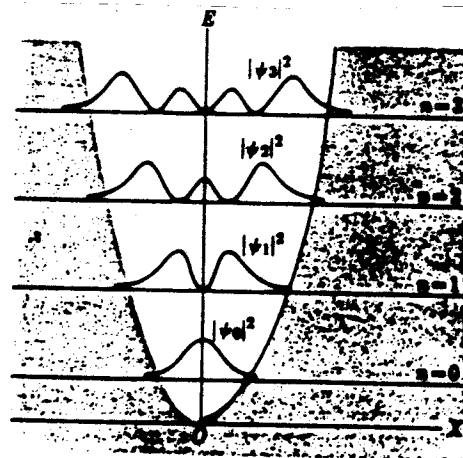


Fig.2.10.

Valoarea minimă a energiei $E_0 = h\nu/2$ este diferită de zero, iar nivelele de energie sunt echidistante, Fig.2.9. Probabilitatea de a găsi particula cu o energie dată este prezentată în Fig.2.10.; pentru $n=0$ este maximă în $x=0$, iar pentru valori mai mari ale lui n , crește spre punctele de întoarcere, ca și în cazul clasic.

Aplicații.

1. Oscilatorul armonic cuantic este un model și pentru interacțiunea între câmpul electromagnetic și dipolul oscilant - oscilatorul electric cuantic - interacție prin care dipolul absoarbe și emite doar cantități finite de energie $h\nu$ în urma tranzițiilor între nivelele energetice pentru care $\Delta n = \pm 1$. A se revedea fenomenul de radiație termică.

2. Vibrațiile atomilor în moleculă sunt în primă aproximație armonice și sunt descrise de oscilatorul armonic cuantic. Spectrele de vibrație ale moleculelor se află în domeniul IR. De exemplu molecula de CO_2 are absorbția de rezonanță la $10,6 \mu\text{m}$. Prezența CO_2 în atmosfera terestră explică efectul natural de seră: atmosfera este transparentă la radiația solară în majoritate în domeniul vizibil și absoarbe radiația IR emisă de Pământ în urma încălzirii, în special prin moleculele de CO_2 . Creșterea concentrației de CO_2 în urma activităților umane, rezultat prin arderea combustibililor solizi, lichizi și gazoși pune în pericol echilibrul natural conducând la încălzirea suplimentară a atmosferei și la posibile catastrofe.

2.8. Descrierea cuantică a mișcării electronului în câmpul de forțe al nucleului.

Atomul de hidrogen

Explicarea mișcării electronilor în jurul nucleului se face cu mare precizie considerând interacțiunea electromagnetică între electroni și nucleul alcătuit din protoni și neutroni cu ajutorul mecanicii cuantice.

Cel mai simplu atom este atomul de hidrogen al cărui nucleu conține un proton în jurul căruia se rotește un electron. Metoda pe care o vom prezenta este valabilă și pentru ionii cu Z protoni și un electron, în următoarele condiții:

- nucleul se află în repaus, masa sa fiind mult mai mare

ca a electronului,

- câmpul electric al nucleului este același cu al unei sarcini electrice punctiforme, dată fiind distanța mare dintre nucleu și electron;

Mișcarea electronului de sarcină $-e$ în jurul nucleului de sarcină e , la distanța r este determinată de interacțiunea coulombiană :

$$\vec{F} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{r} \quad (2.53)$$

Energia potențială a electronului în câmpul nucleului este:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.54)$$

Mișcarea electronului se face în spațiul tridimensional și va fi descrisă de ecuația lui Schrödinger:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0 \quad (2.55)$$

Câmpul electrostatic al nucleului are o simetrie sferică, ceea ce impune pentru simplificare înlocuirea coordonatelor carteziene (x, y, z) cu coordonatele sferice (r, θ, ϕ) . Se poate arăta că funcția de undă ce descrie mișcarea unui electron în câmp de forțe centrale se scrie ca produsul a doi factori, unul dependent de distanța electronului față de nucleu $R(r)$ și altul dependent de orientarea poziției vectorului r , dată de unghiurile θ și ϕ , $Y(\theta, \phi)$:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi) \quad (2.56)$$

Partea radială depinde de forma particulară a energiei potențiale $U(r)$. Partea unghiulară este o consecință a simetriei sferice a forței centrale, deci este independentă de forma particulară a lui $U(r)$. Cu alte cuvinte, funcția unghiulară are aceeași formă în orice câmp de forțe centrale.

Într-un câmp de forțe centrale partea unghiulară funcției de undă este complet determinată de mărimea momentului cinetic și de componenta pe axa z a momentului cinetic al electronului.

Partea radială a funcției de undă depinde de energie și de mărimea momentului cinetic, dar nu și de orientarea momentului cinetic.

Din condiția ca funcția de undă ce descrie electronul să fie finită rezultă că următoarele mărimi sunt cuantificate:

- energia, prin numărul cuantic principal $n=1,2,3,\dots$

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \frac{ch}{n^2} = -\frac{Rch}{n^2} = -\frac{|E_1|}{n^2} \quad (2.57)$$

unde $R=1,097 \cdot 10^7 \text{m}^{-1}$ se numește constanta lui Rydberg.

- momentul cinetic, prin numărul cuantic orbital $l=0,1,2,\dots,n-1$.

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (2.58)$$

- proiecția momentului cinetic pe axa z, prin numărul cuantic magnetic $m=-1, -(l-1), \dots, 0, \dots, (l-1), l$.

$$L_z = m\hbar \quad (2.59)$$

În conformitate cu cele expuse mai sus, funcția de undă radială este dependentă de n și l , iar funcția de undă unghiulară este dependentă de l și m , deci:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.60)$$

În Fig. 2.11. se observă funcțiile de undă unghiulare pentru $l=0$, $l=1$ și $l=2$, respectiv, orbitalii s, p și d.

Funcția de undă radială permite calculul probabilității de a găsi electronul la o distanță dată de nucleu R_{nl}^2 , reprezentată în Fig.2.12., unde pe abscisă se

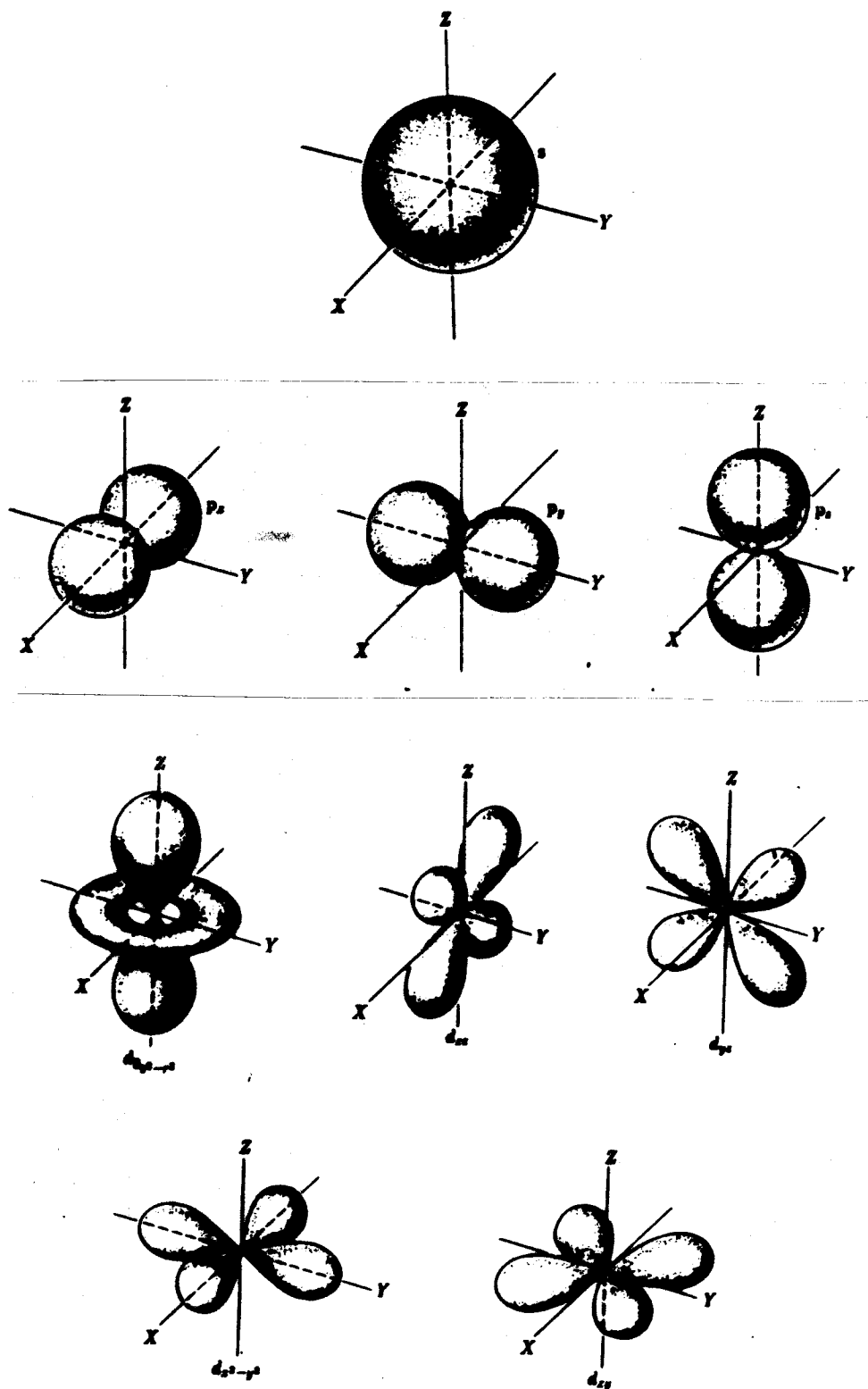


Fig.2.11.

află r [Å], iar pe ordonată $[r^2 R_{nl}^2(r) m^{-1}] \cdot 10^{-15}$. Maximul curbelor din Fig.2.12. arată poziția cea mai probabilă la care se poate afla electronul față de nucleu.

În Fig.2.13. este prezentată structura nivelelor de energie pentru atomul de hidrogen conform relației (2.57).

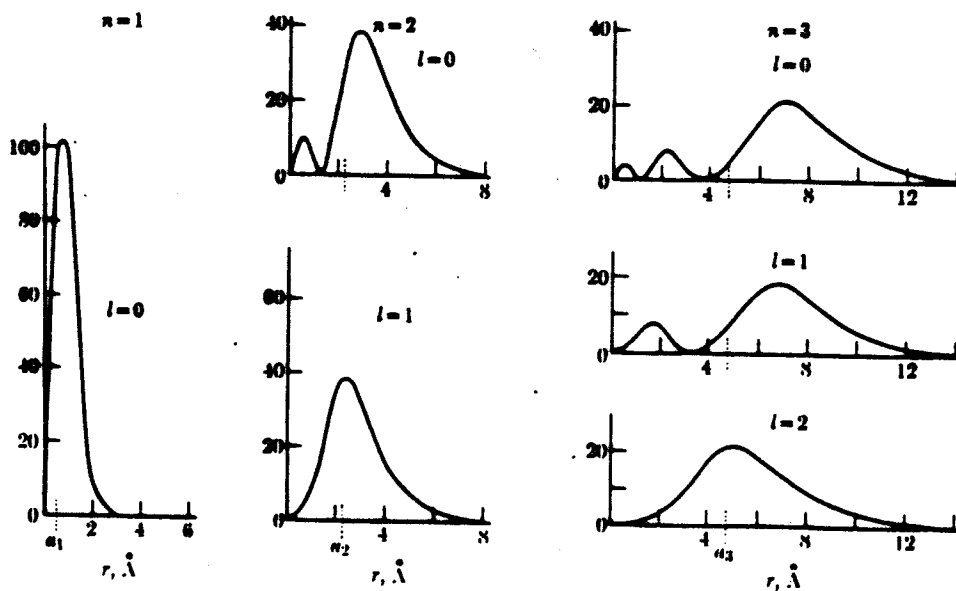


Fig.2.12.

Se observă că energia are valoare negativă pentru stările legate când electronul se mișcă în jurul nucleului, valoare nulă, când distanța electron - nucleu este practic infinită și valori pozitive pentru electronul liber, aflat în afara câmpului nucleului.

Prin excitarea atomilor de hidrogen, electronii trec pe nivele energetice superioare, Fig.2.13. La revenirea electronilor de pe nivelul n_2 pe nivelul n_1 , se emite un foton a cărui energie este:

$$h\nu = E_{n_1} - E_{n_2} = -\frac{Rch}{n_1^2} + \frac{Rch}{n_2^2} = Rch \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (2.61)$$

Tranzițiile pentru care n_2 este fix formează o serie spectrală. Astfel se formează seriile:

- | | | |
|------------|------------------------|-------------|
| - Lyman | $n_2=1, n_1=2,3,\dots$ | domeniul UV |
| - Balmer | $n_2=2, n_1=3,4,\dots$ | domeniul V |
| - Paschen | $n_2=3, n_1=4,5,\dots$ | domeniul IR |
| - Brackett | $n_2=4, n_1=5,6,\dots$ | domeniul IR |
| - Pfund | $n_2=5, n_1=6,7,\dots$ | domeniul IR |

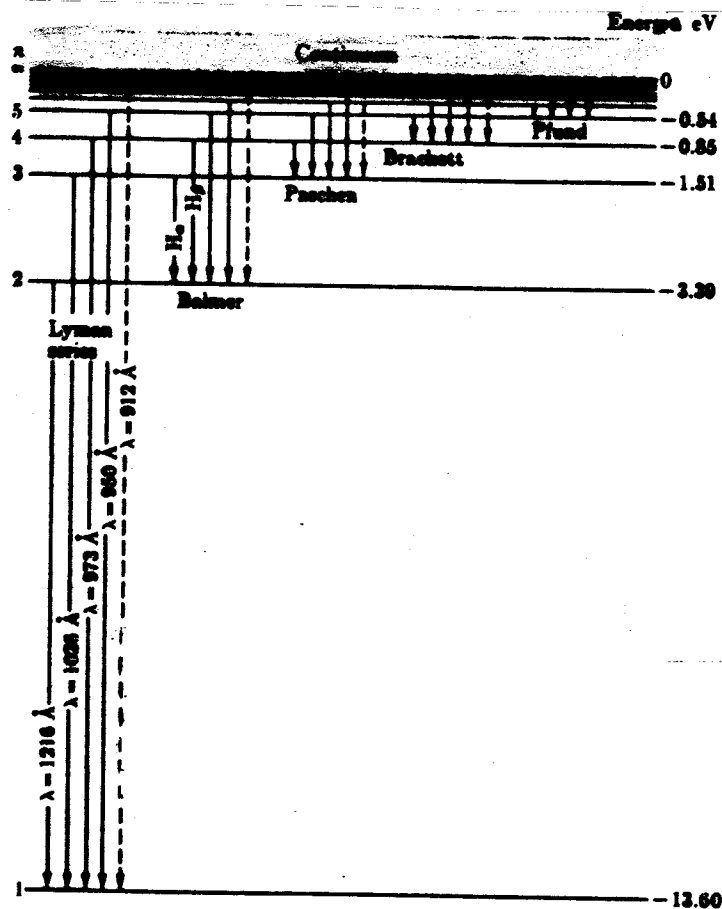


Fig.2.13.

Totalitatea acestor serii spectrale formează spectrul atomului de hidrogen. Fiecare specie atomică posedă un spectru propriu după care se recunoaște. Acesta este

fundamentul fizic al analizei spectrale calitative și cantitative.

În concluzie, mișcarea electronului într-un atom este descrisă prin funcția de undă $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$ dependentă de trei numere cuantice care cuantifică energia, momentul cinetic și proiecția momentului cinetic pe axa z. Noțiunea de orbită a electronului trebuie înlocuită prin aceea de probabilitate de a găsi electronul într-un volum dat în jurul nucleului. Dacă am fotografia electronul la diferite momente, am observa că el trece de cele mai multe ori prin zonele de probabilitate maximă, prezentate și în Fig.2.11. și Fig.2.12. Deoarece $e|\Psi|^2$ reprezintă densitatea medie de sarcină într-un punct dat, se afirmă că electronul există în jurul atomului sub forma unui "nor" de sarcină electrică.

2.9. Interacțiunea dintre câmpul magnetic și electronii atomilor. Efectul Zeemann

Cuantificarea spațială se manifestă în mod evident când mișcarea electronilor în jurul nucleului este perturbată de către un câmp magnetic exterior.

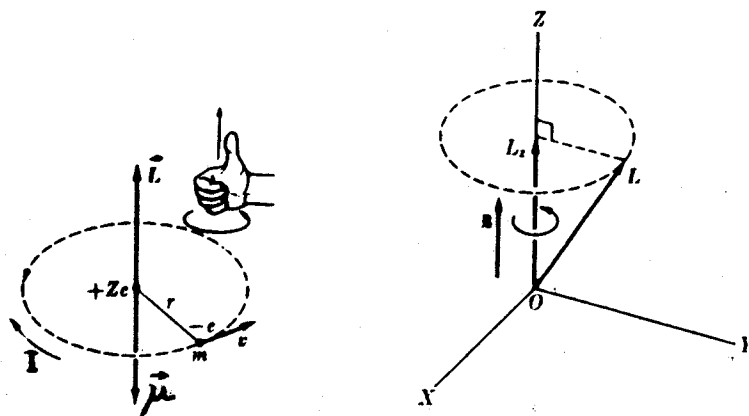


Fig.2.14.

Un electron ce se rotește în jurul unui nucleu cu

viteza v este echivalent cu un curent electric de intensitate $I=ev/2\pi r$. El se comportă ca un dipol magnetic cu momentul de dipol μ :

$$\begin{aligned}\mu &= IS = \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{e}{2m_0} L \\ \vec{\mu} &= -\frac{e}{2m_0} \vec{L}\end{aligned}\quad (2.62)$$

având sensul contrar momentului cinetic L . În câmp magnetic el se orientează asemenea unui mic ac magnetic, Fig.2.14.

Un rezultat important al descrierii cuantice a atomului de hidrogen este cuantificarea momentului cinetic și a proiecției sale pe axa z , numită cuantificare spațială. De exemplu, pentru $l=2$, $L=\hbar 6^{1/2}$ și $L_z=m\hbar$ cu $m=-2,-1,0,1,2$ ($2l+1=5$ valori). În Fig.2.14. se observă precesia momentului cinetic sub acțiunea câmpului magnetic.

Din relațiile (2.62) și (2.58) rezultă că momentul magnetic orbital al unui electron într-un atom este cuantificat prin numărul cuantic orbital l :

$$\mu = \frac{e}{2m_0} \hbar \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad (2.63)$$

unde $\mu_B = e/2m_0\hbar = 9,273 \cdot 10^{-24}$ A.m² se numește magneton Bohr-Procopiu. În mod corespunzător și proiecția pe axa z a momentului de dipol magnetic este cuantificată prin numărul cuantic magnetic m :

$$\mu_z = \frac{e}{2m_0} L_z = \frac{e}{2m_0} \hbar m = \mu_B m \quad (2.64)$$

Dacă un atom este plasat într-un câmp magnetic exterior apare o interacțiune între câmp și dipolii magnetici elementari care primesc o energie suplimentară de interacțiune:

$$E_{mag} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_B B \cos \angle(\vec{\mu}, \vec{B}) = -\mu_z B = -m \mu_B B \quad (2.65)$$

Energia totală a unui electron dintr-un atom plasat

în câmp magnetic este $E_n + E_{ms}$, unde E_n este energia electronului în câmpul nucleului (2.57). Relația (2.65) arată că fiecare nivel energetic caracterizat prin numerele cuantice n și l este despicat în $2l+1$ nivele în prezența câmpului magnetic, Fig.2.15. Starea cu $l=0$, numită s , nu este despicată, starea cu $l=1$ numită p , este despicată în trei nivele cu $m=-1,0,1$. Astfel tranziția $p \rightarrow s$ devine o tranziție triplă care conține tranziția identică cu cea în absența câmpului $m=0 \rightarrow m=0$ și două tranziții simetrice $m=\pm 1 \rightarrow m=0$ cu variația de frecvență $\Delta\nu$:

$$\Delta\nu = \pm \frac{\mu_B B}{h} \quad (2.66)$$

proporțională cu mărimea câmpului magnetic B , Fig.2.15a.

În cazul tranziției $l=2 \rightarrow l=1$, există nouă posibilități în concordanță cu regula de selecție $\Delta m=0, \pm 1$. Deoarece tranzițiile cu același Δm corespund aceleiași modificări de energie, spectrul tranziției $d \rightarrow p$ are tot trei linii distanțate cu același $\Delta\nu$ dat de (2.66).

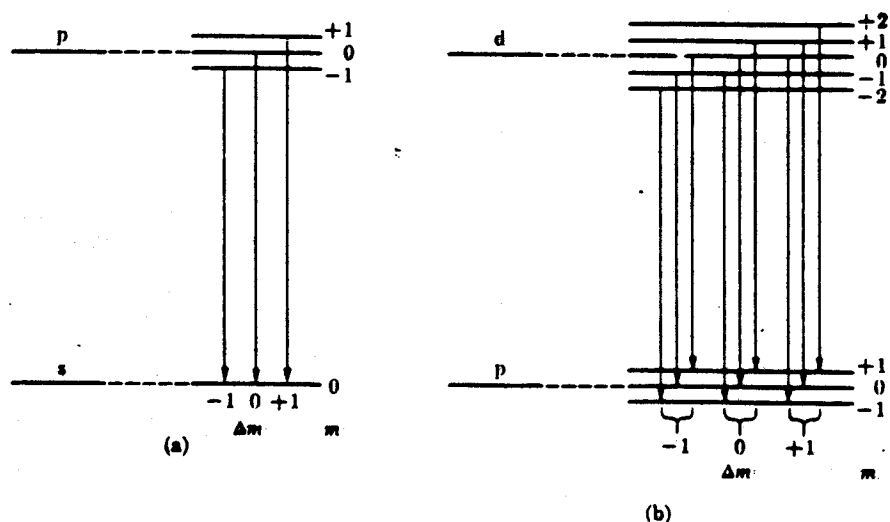


Fig.2.15.

Acesta este efectul Zeemann: fiecare linie a unui

atom cu un electron se descompune în câmp magnetic într-un triplet, distanța dintre linii fiind proporțională cu mărimea câmpului.

Dacă nu ar exista cuantificarea spațială, momentul cinetic ar avea orice orientare, iar efectul câmpului magnetic exterior ar fi o lărgire a nivelelor energetice, deci un spectru de benzi de lărgime $2\mu_B B/h$. Efectul Zeemann este o dovadă a cuantificării spațiale și implicit a cuantificării momentului cinetic.

2.10. Spinul electronului. Atomi cu mai mulți electroni

Paragrafele anterioare au arătat că într-un atom un electron posedă un moment cinetic și un moment magnetic datorate mișcării orbitale, ambele cuantificate. Acestea sunt rezultate ale mecanicii cuantice nerelativiste, mai exact, ale teoriei lui Schrödinger aplicată atomilor de tip hidrogenoid.

Mecanica cuantică relativistă, prin teoria lui Dirac, stabilește că electronul posedă pe lângă sarcină și masă un moment cinetic de propriu numit spin. Spinul electronului este legat în mod fictiv de o mișcare de rotație a electronului în jurul axei proprii. Momentul cinetic de spin are valoarea:

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)} \quad (2.67)$$

unde $s=1/2$ se numește număr cuantic de spin. Momentul cinetic de spin are, deci, o unică valoare $S = \hbar(3/4)^{1/2}$. Proiecția sa pe o axă este cuantificată prin numărul cuantic magnetic de spin m_s , care ia două valori $m_s = \pm 1/2$. Deci:

$$S_z = \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad (2.68)$$

Momentului cinetic de spin îi corespunde un moment magnetic de spin μ_s , cuantificat:

$$\mu_s = \frac{e}{m_0} S = \frac{e\hbar}{m_0} \sqrt{S(S+1)} = 2\mu_B \sqrt{S(S+1)} \quad (2.69)$$

a cărui proiecție pe axa z este de asemenea cuantificată:

$$\mu_{s_z} = \frac{e}{m_0} S_z = \frac{e\hbar m_s}{m_0} = 2\mu_B m_s = \pm \mu_B \quad (2.70)$$

Deci, momentul magnetic de spin are o valoare unică, iar proiecția sa pe o axă are două valori $\pm \mu_B$; există doar două orientări spațiale ale momentului magnetic de spin.

Spinul electronului a fost pus în evidență prin experiența lui Stern și Gerlach. Ei au urmărit comportarea unui fascicul de atomi univalenți (ex: H, Li, Ag.) într-un câmp magnetic neuniform, Fig.2.16. Atomii proveniți dintr-un cuptor în urma încălzirii, având un singur electron pe ultimul nivel energetic, se comportă ca dipoli magnetici. Câmpul magnetic a cărui intensitate crește pe direcția S-N deviază dipolii. Dacă dipolii ar avea orice orientare, pe ecran s-ar obține o pată. Deoarece unicul electron se află în starea fundamentală cu $l=0$, momentul magnetic orbital este nul și atomii nu ar fi deviați. Pe ecran se observă două pete datorate momentului magnetic de spin, corespunzătoare celor două orientări spațiale pentru $m_s = \pm 1/2$. Cele două proiecții sunt în mod obișnuit numite cu spinul în sus \uparrow și cu spinul în jos \downarrow deși, așa cum se vede din Fig.2.17. spinul nu este paralel sau antiparalel cu axa Oz.

Funcția de undă ce descrie un electron într-un atom se completează cu o funcție de spin χ_{m_s} asociată componentei S_z a spinului. Funcția de undă completă a unui electron ce se mișcă în câmpul central de forțe al nucleului se caracterizează prin patru numere cuantice: n, l, m, m_s :

$$\Psi_{nlmm_s} = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \phi) \cdot \chi_{m_s} \quad (2.71)$$

În cazul atomilor cu mai mulți electroni, starea fiecărui electron este descrisă de o asemenea funcție de undă

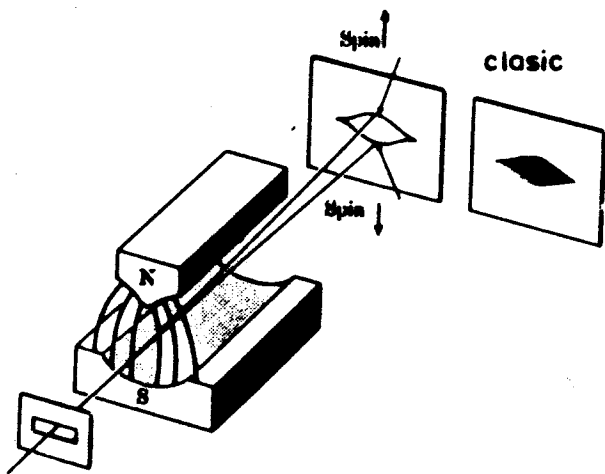


Fig.2.16.

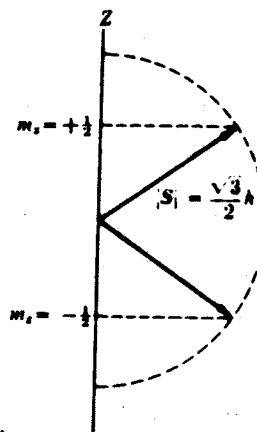


Fig.2.17.

ce se supune principiului lui Pauli: într-un atom nu există doi electroni care să aibă aceleași patru numere cuantice. Repartiția electronilor în atom se face în conformitate cu principiul de excluziune și cu condiția că un sistem de particule este stabil când energia sa este minimă:

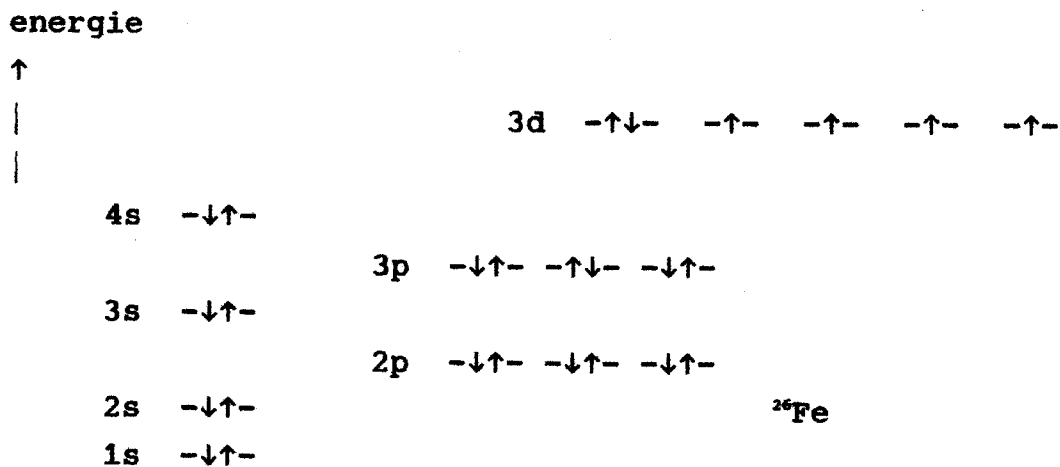


Fig.2.18.

- o pătură electronică cuprinde toți electronii care au același n, notată K, L, M, N, ..
pentru n=1, 2, 3, 4, ..

- o subpătură cuprinde toți electronii care au același l dintr-o pătură, notată s, p, d, f, \dots

pentru $l=0, 1, 2, 3, \dots$

- un orbital cuprinde electronii care au același m dintr-o subpătură, $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$

- fiecărui orbital îi corespund două stări cu $m_s = \pm 1/2$.

La determinarea structurii păturilor electronice se folosesc două observații, numite regulile lui Hund:

- electronii evită ocuparea aceluiași orbital, dacă există orbitali neocupați în aceeași subpătură;

- doi electroni situați pe orbitali diferiți din aceeași subpătură au spinii paraleli în starea fundamentală;

Regulile lui Hund explică magnetismul puternic al unor elemente de tranziție cu subpătura $3d$ incompletă, ex: $^{26}\text{Fe}, ^{27}\text{Co}, ^{28}\text{Ni}$, Fig 2.18.

Electronii neînperechiați, deci momentele magnetice de spin necompensate, au ca efect comportamentul de dipol magnetic al atomului.

2.11. Emisia stimulată. Laseri

Una dintre cele mai interesante aplicații ale structurii cuantificate a nivelelor energetice ale atomilor și moleculelor relevată de fizica cuantică este emisia stimulată care generează radiația laser. În electronica clasică amplificarea și generarea undelor electromagnetice se realizează pe seama energiei cinetice a electronilor (ex: circuite oscilante, clistroane, dispozitive semiconductoare, etc.). În cadrul electronicii cuantice, aceste procese se realizează pe seama energiei interne a atomilor, moleculelor, ionilor.

a. Amplificarea radiației prin emisia stimulată

Să considerăm un sistem format din particule (atomi