Fizica II

Cursul Nr. 2

INTRODUCERE IN MECANICA CUANTICA
Functia de unda si ecuatia lui Schrodinger

1). Emil Luca, Gheorghe Zet, Corneliu Ciubotariu, Anastasia Paduraru, Fizica Generala, Editura Didactica si Pedagogica, Bucuresti-1981 (cap. 6)
2). Cursul de Fizica BERKELEY, volumul IV, Fizica cuantica, Editura Didactica si Pedagogica, Bucuresti 1983. (cap.1,4 si 5).
3. I. Cosma, Fizica, Institutul Politehnic Cluj-Napoca, 1984. (Partea a-II-a, cap. XIV)

2.1 Semnificatia fizica a functiei de unda

Concluzia finala a cursului anterior a fosta ca o particula are o natura dubla corpuscul - unda. In anumite situatii experimentale este important caracterul corpuscular, iar in altele cel ondulatoriu. Daca particula se cpomporta ca o unda, atunci comportamentul ei se descrie printr-o functie de unda $\Psi(\mathbf{r},t)$. Dupa cum se stie, in cazul undelor elastice, functia de unda reprezinta amplitudinea deplasarii fiecarui punct al mediului elastic fata de pozitia de echilibru. În cazul undelor electromagnetice functia de unda reprezinta intensitatea campului electric $\mathbf{E}$ sau a campului magnetic $\mathbf{B}$ al undei . În mod normal se pune intrebarea: *Care este semnificatia fizica a functiei de unda de Broglie ?* Interpretarea unanim acceptata in prezent, este interpretatrea statistica a lui Max Born. Conform aceste interpretarii , patratul modulului functiei de unda de Broglie, *reprezinta probabilitatea,* P, *ca particula sa se gaseasca in punctul* $\mathbf{r}$ *din spatiu la momentul* t,

$$P(\mathbf{r},t)=|\Psi(\mathbf{r},t)|^2=\Psi(\mathbf{r},t)\cdot\Psi(\mathbf{r},t)^*, \tag{2.1}$$

unde $\Psi(\mathbf{r},t)^*$ este complex conjugata functiei de unda.

Este important de remarcat ca interpretarea statistica a lui Max Born nu leaga functia de unda de forma si dimensiunile particulei. Astfel, modificarea in timp si in spatiu a functiei de unda nu inseamna decat ca se modifica probabilitatea de a gasi particula in diferite regiuni din spatiu.

Deoarece probabilitatea de a gasi particula in intreg spatiu este egala cu 1, functia de unda trebuie sa indeplineasca conditia,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{r},t)\cdot\Psi(\mathbf{r},t)^{*}\,dv = 1. \qquad (2.2)$$

Conditia (2.2) poarta de numirea de *conditia de normare a functiei de unda*.

2.2 Pachet de unde

Urmatorul pas în intelegerea dualitatii corpuscul-unda a particulelor consta în determinarea tipului functiei de unda care descrie proprietatile ondulatorii ale particulei. Pentru inceput vom demonstra urmatoarea afirmatie importanta: *o unda monocromatica nu poate descrie miscarea unei particule*. Pentru a demonstra aceasta afiramatie sa consideram o unda monocromatica de frecventa unghiulara ω si de vector de unda κ care se deplaseaza de-a lungul axei Ox, de forma

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}. \qquad (2.3)$$

Tinand cont de relatiile lui de Broglie (1.9) si (1.10) si de faptul ca $\omega = 2\pi\nu$, functia de unda (2.3) devine

$$\Psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Wt)}. \qquad (2.4)$$

Viteza de propagare a undei de Broglie este viteza cu care se propaga frontul de unda, adica suprafetele de faza constanta date de ecuatia

$$px - Wt = const. \qquad (2.5)$$

Derivand relatia (2.5) în raport cu timpul si tinand cont ca impulsul si energia particulei sunt constante, rezulta pentru viteza de faza relatia:

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{W}{p} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}. \tag{2.6}$$

Deoarece conform teoriei relativitatii $v \le c$, din (2.6) rezulta ca viteza de faza a undei este mai mare decat viteza luminii. Acest rezultat demonstreaza ca *o unda monocromatica nu poate transporta o particula sau energie deoarece viteza de transport ar fi mai mare decat viteza luminii.*

Pentru a depasi aceasta dificultate se considera ca unei particule i se asociaza nu o unda monocromatica ci un *pachet de unde,* format prin suprapunerea unui numar infinit de unde monocromatice cu vectorii de unda cuprinsi în intervalul $(k_o \pm \Delta k/2)$. Prin urmare ecuatia pachetului de unde este data de relatia:

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_o + \Delta k/2} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk. \tag{2.7}$$

Viteza de deplasare a pachetului de unde este *viteza de grup,* a carei valoare este data de formula lui Kirchhoff:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}. \tag{2.8}$$

În cazul undelor de Broglie ($W = \hbar\omega$ si $p = \hbar k$) relatia (2.8) devine

$$v_g = \frac{dW}{dp} = \frac{p}{m} = v. \tag{2.9}$$

Din (2.9) rezulta ca *viteza,* v_g, *de propagare a pachetului de unde este egala cu viteza de propagare a particulei insasi.*

2.3. Relatiile de nedeterminare ale lui Heisenberg

În cazul în care undele componenete ale pachetului au aceiasi amplitudine $A(k) = A$ si pentru $t = 0$, expresia (2.7) devine:

$$\Psi(x) = \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_o + \Delta k/2} e^{ikx} dk . \quad (2.10)$$

Integrala (2.10) este usor de rezolvat, rezultand

$$\Psi(x) = Ake^{ikx} \frac{\sin \frac{1}{2} \Delta kx}{\frac{1}{2} \Delta kx} \quad (2.11)$$

Ecuatia (2.11) este reprezentata in figura 2.1 .

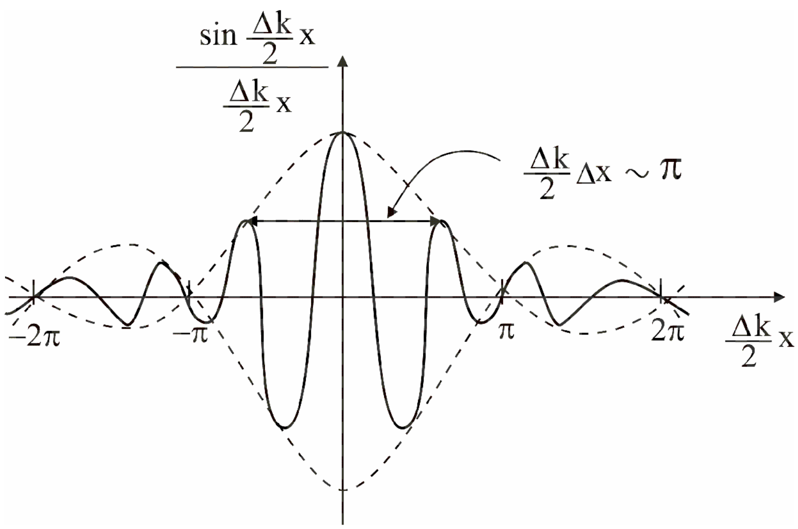

Fig. 2.1. Amplitudinea grupului de unde pentru cazul in care undele din componenta grupului au aceiasi amplitudine.

Este usor de observat ca *anvelopa* curbei (linia punctata)

$$\frac{\sin\frac{1}{2}\Delta kx}{\frac{1}{2}\Delta kx} \tag{2.12}$$

scade rapida pe un interval Δx. Din figura 2.1 reiese ca amplitudinea pachetului de unde este localizata în principal in intervalul Δx al carui ordin de marime este dat de relatia:

$$\frac{\Delta k}{2}\Delta x \approx \pi . \tag{2.13}$$

Tinand cont de relatia de Broglie $p = \hbar k$, relatia (2.13) devine

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h . \tag{2.14}$$

Deoarece amplitudinea pachetului de unda este diferita si in afara regiunii centrale, se poate scrie ca

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h . \tag{2.15}$$

Aceasta relatie poarta denumirea de *relatia de nedeterminare (incertitudine) a lui Heisenberg.* Interpretarea fizica a relatiei de nedeterminare este urmatoarea: erorile Δx si Δp cu care pot fi masurate simultan cordonata si impulsul unei particule sunt legate intre ele prin relatia (2.12). Conform acestei relatii, *precizia cu care pot fi determinate simultan coordonata si impulsul este limitata.* Astfel, daca se determina cu precizie ridicata pozitia, ceea ce inseamna o valoare mica a erorii Δx, atunci eroarea in determinarea impulsului este mare $\Delta p \geq h/\Delta x$. Coordonata si impulsul se numesc *marimi conjugate.* Un alt set de marimi conjugate sunt energia E si timpul t. In acest caz relatia de nedeterminare este

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h . \tag{2.16}$$

Astfel, principiul de nedeterminare a lui Heisenberg limiteaza precizia cu care doua marimi conjugate pot fi cunoscute. Cu cat este mai mare precizia cu care o marime poate fi cunoscuta, cu atat este mai mica precizia cu care poate fi cunoscuta conjugata ei. *Doua marimi care nu sunt conjugate, de exemplu coordonta* x *si energia* E*, pot fi masurate simultan cu precizie ridicta.* Explicatia relatiilor de nedeterminare ale lui Heisenberg rezida în natura statistica a mecanicii cuantice. Spre deosebire de mecanica clasica, unde traiectoria particulei este bine definita $(\Delta x = 0)$, în mecanica quantica notiunea de traiectorie isi pierde sensul si este inlocuita de probabilitatea ca particula sa se gaseasca în intervalul Δx.

2.4 Ecuatia lui Shrödinger

In mecanica clasica o unda elastica sau electromagnetica este descrisa de *ecuatia undei*:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}. \tag{2.17}$$

In mod similar si in mecanica exista o ecuatie diferentiala numita *ecuatia lui Shrödinger* pentru functia de unda atasata particulei. Trebuie precizat ca aceasta ecuatia nu poate fi dedusa. Ecuatia lui Shrödinger poate fi numai postulata, iar valabilitatea ei urmeaza a fi dovedita prin corelarea rezultatelor teoretice, obtinute pe baza acestei ecuatii, cu datele experimentale. Astfel, in anul 1926 Shrödinger a postulat ca functia de unda de Broglie este descrisa de urmatoarea ecuatie diferentiala:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + [\mathrm{U}(\mathrm{x}) - \mathrm{E}]\Psi(x) = 0, \tag{2.18}$$

unde U si E sunt energia potentiala si, respectiv, energia totala a particulei.

Observatie: Ecuatia (2.18) este ecuatia lui Shrödinger pentru cazul stationar unidimensional (in cazul stationar functia de unda este independenta de timp) si poarta denumirea de *ecuatia Shrödinger unidimensionala independenta de timp.* In general ecuatia lui Shrödinger se scrie pentru cazul tridimensional dependent de timp. Deoarece cazurile practice studiate in curs nu necesita ecuatia tridimensionala dependenta de timp ne vom limita numai la ecuatia Shrödinger data de relatia (2.18)

Deducerea formala a ecuatiei lui Shrödinger: Din punct de vedere formal ecuatia lui Shrödinger poate fi dedusa din ecuatia undelor (2.17). Pentru aceasta se considera o unda de Broglie de forma

$$\Psi(x,t) = e^{-i\omega t}\psi(r), \tag{2.19}$$

unde $\psi(r)$ este partea spatiala a functiei de unda. Daca se inlocuieste (2.19) în (2.17), se obtine

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{\mathrm{v}^2}\psi(x) = 0. \tag{2.20}$$

Deoarece $\lambda = \mathrm{v}/\nu = 2\pi \mathrm{v}/\omega$, relatia (2.20) devine

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi(x) = 0. \tag{2.21}$$

Tinand cont de relatia lui de Broglie, $\lambda = h/p = 2\pi\hbar/p$, si de legea de conservare a energiei

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

avem

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x)). \tag{2.22}$$

Inlocuind (2.22) în (2.21) rezulta

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

Care este chiar ecuatia lui Shrödinger unidimensionala independenta de timp.

2.5 Conditiile la limita

Pentru a vea sens fizic o solutie ''matematica'' a ecuatiei (2.18) trebuie sa indeplineasca urmatoarele conditii:

1. *Functia de unda* $\Psi(x,t)$ *trebuie sa fie continua si univoca in raport cu spatiu,* x*, si cu timpul,* t.

Conditia de continuitatea a functiei de unda asigura ca probabilitata de a gasi particula intr-o regiune din spatiu variaza continuu. Un salt in probabilitate este echivalent cu aparitia sau disparitia de particule, ceea ce ar contrazice legea de conservare a materiei. Univocitatea functiei de unda asigura ca probabilitatea de a gasi particula in vecinatatea unui punct din spatiu este definita univoc fara abiguitati.

2. *Integrala din modulul functiei de unda la patrat pe tot intervalul de variatie a lui* x *trebuie sa fie finita.*

In absenta acestei conditii functia de unda nu ar putea fi normalizata si , prin urmare, nu ar fi indeplinita conditia de normare (2.2)

3. *Prima derivata a functieiei de unda,* $\partial\Psi/\partial x$*, trebuie sa fie continua peste tot exceptand punctele in care potentialul are o discontinuitate.*

Aceasta conditie la limita este necesara deoarece o discontinuitate finita in prima derivata ar cauza o discontinuitate infinita in $\partial^2\Psi/\partial x^2$ si , ca rezultat, ecuatia lui Shrödinger nu ar avea sens.