

EUGEN-MIHĂIȚĂ CIOROIANU

EUGEN-MIHĂIȚĂ CIOROIANU

MECANICĂ CUANTICĂ



EDITURA UNIVERSITARIA
Craiova, 2015

Referenți științifici:

Prof.univ.dr. Constantin BIZDADEA

Prof.univ.dr. Solange-Odile SALIU

Copyright 2015 Editura Universitaria

Toate drepturile sunt rezervate Editurii Universitaria

Descrierea CIP a Bibliotecii Naționale a României

CIOROIANU, EUGEN MIHĂIȚĂ

Mecanică cuantică / Eugen-Mihăiță Cioroianu. - Craiova :
Universitaria, 2015

Bibliogr.

ISBN 978-606-14-0948-8

530.145(075.8)

Capitolul 1

Introducere

Prezenta lucrare se bazează pe cursul de *Mecanica cuantica* predat de autor studentilor fizicieni de la Universitatea din Craiova.

Din punct de vedere istoric, cunoasterea Naturii prin tripletul metodologic observatie — ratiune — experiment poate fi impartita in: *Era Clasica*, *Era pre-Cuantica* si *Era Cuantica*. Prima dintre acestea are ca izvor lucrarile unor savanti precum G. Galilei, I. Newton si G. W. Leibniz, rezultate obtinute in secolele XVII-XVIII. Acestea au avut ca scop formularea si rezolvarea problematicii miscarii corpurilor macroscopice. Ulterior, progresele tehnologice au impus extinderea preocuparilor stiintifice din Era Clasica si la campul electromagnetic. Apogeul perioadei clasice a fost atins la sfarsitul secolului XIX atunci cand s-au stabilit legile care dicteaza realitatea obiectiva [aspectele masurabile in acea perioada], adica legile clasice care guverneaza materia si radiatia. In acest context particulele [constituentii materiei] evolueaza dupa traiectorii *bine definite*, solutii ale unor ecuatii diferentiale ordinare [ecuatiiile Newton/Hamilton/Lagrange]. Tot in aceasta etapa s-a rezolvat vechea antinomie privind natura luminii [corpulara/ondulatorie], consfintind pentru aceasta o natura de unda electromagnetica [governata matematic prin ecuatiile Maxwell].

Studiile experimentale privind radiatia emisa de corpuri aflate la temperaturi date, realizate in cea de-a doua parte a secolului XIX, au permis formularea asa-numitelor legi ale radiatiei corpului negru. Tentativa de explicare a acestora in contextul fizicii statistice clasice a condus la concluzia absurda conform careia un corp la o temperatura data *nu poate fi niciodata in echilibru termodinamic cu radiatia emisa de acesta*. Pentru a depasi situatia semnalata, la inceputul secolului XX, savantul german M. Planck [1] a considerat ca *schimburile de energie* dintre radiatie si corp se realizeaza in termeni de unitati de energie [de valoare bine definita] apelate drept *cuante de energie*. Ipoteza cuantelor de energie suplimentata cu argumente de fizica statistica clasica a permis explicarea legilor radiatiei corpului negru si a marcat practic inceputurile Erei pre-Cuantice. Cinci ani mai tarziu, ipoteza cuantelor de energie a fost fructificata de A. Einstein [2] in explicarea legilor efectului fotoelectric. In acest context, savantul a radicalizat ipoteza mentionata considerand ca radiatia electromagnetica *este constituita din cuante de energie*. Prin aceasta, A. Einstein a reinviat vechea antinomie privind natura luminii dar a si anticipat cadrul conceptual al solutiei acesteia — mecanica cuantica relativista [3]. De asemenea, A. Einstein [4] si ulterior P. Debye [5] au fructificat ipoteza cuantelor de energie in explicarea dependentei de temperatura a caldurilor specifice ale solidelor [legea empirica Dulong-Petit privind dependenta amintita nu putea fi explicata in contextul fizicii clasice]. Stadiul avansat al tehnologiei de la inceputul secolului XX a permis investigarea structurii atomice. La acel moment, J. J. Thompson [6] propusese ca model atomic asa-numitul *cozonac cu stafide* [conform caruia atomul consta intr-o sfera omogena pozitiva din punct de vedere electric si electronii sunt plasati in aceasta

precum stafidele într-un cozonac astfel încât ansamblul este neutru din punct de vedere electric]. Datele experimentale obținute [atomul este mai mult “gol” și frecvențele emise de acesta au un spectru discret] infirmău modelul Thompson și deci trebuiau explicate în cadrul unor noi modele atomice. Un astfel de model atomic, realizat după modelul sistemului solar [cu nucleul situat în centru iar electronii orbitează în câmpul electrostatic produs de acesta precum planetele orbitează în câmpul gravitostatic al Soarelui], a fost conceput de E. Rutherford [7]. Acesta a apelat *exclusiv* la cadrul conceptual al Erei Clasice [electrodinamica clasică] și din acest motiv modelul propus nu a reușit să explice nici stabilitatea edificiului atomic [electronii mișcându-se accelerat pe orbite pierd energie prin emisie de radiație electromagnetică și în final “cad” pe nucleu] și nici liniile spectrale, de frecvențe bine definite emise de atomi [radiația electromagnetică emisă de atom are, în modelul precizat, un spectru continuu]. Pentru ieșirea din acest impas, N. Bohr [8] a făcut din nou apel la ipoteza cuantică a lui Planck și a propus un nou model atomic. Acesta preia caracteristicile geometrice ale modelului Rutherford [electronii orbitează în câmpul electrostatic produs de nucleu pe *traiectorii circulare*] și *postulează* în plus ca energiile electronilor sunt *cuantificate* în sensul că au valori bine definite [denumite de Bohr *stări staționare* ale atomilor hidrogenoizi] direct corelate cu *orbitele electronilor*. Conform modelului Bohr schimbul de energie dintre atom și mediu se realizează prin schimbarea orbitelor electronilor și se manifestă prin absorbție/cedare de energie electromagnetică. Ipoteza cuantică apelată în cadrul modelului Bohr asigură stabilitatea atomului și, mai mult, oferă predicții experimentale [în sectorul seriilor spectrale ale atomilor hidrogenoizi].

În perioada următoare, emulția creată în rândul experimenterilor care investigau structura intimă a materiei a condus la o multitudine de rezultate experimentale care nu mai puteau fi explicate nici măcar cu seturi de *reguli de cuantificare* introduse ad-hoc. Anul 1924 poate fi considerat ca fiind momentul crucial în declanșarea Erei Cuantice. Atunci, L. de Broglie a propus [9] pentru electron un comportament dihotomic similar luminii. Acesta asociază unui electron o undă plană și monocromatică cu vectorul de undă proporțional cu impulsul electronului. Inițial, ipoteza de Broglie a fost speculată de autor în vederea “justificării” regulii Born de cuantificare în termenii condiției de undă staționară a unei asociații electronului dintr-un atom hidrogenoid. În perioada următoare, comportamentul ondulatoriu presupus de L. de Broglie a fost pus în evidență de C. Davisson și L. Germer prin experimente de difracție a electronilor pe rețele cristaline. Din acest moment a fost clar că la nivel atomic *nu mai sunt valabile legile fizicii clasice* și Era Cuantică a început. În acel stadiu, gândirea speculativă caracteristică Erei pre-Cuantice i-a lăsat locul rațiunii matematice și, într-un interval de numai cinci ani, a fost formulată logic-coerent și complet acea parte a Fizicii care descrie corect comportamentul microsistemelor nerelativiste — **Mecanica Cuantică**. Astfel, un prim pas a fost făcut de savantul E. Schrödinger [10] care, pornind de la ecuația Hamilton-Jacobi corespunzătoare mișcării electronului în câmpul Coulombian al nucleului, a postulat o ecuație cu derivate parțiale de ordinul doi și a reobținut regulile de cuantificare Bohr din cerința că soluțiile ecuației menționate să fie funcții de modul pătrat integrabile. Ulterior, fizicienii M. Born și P. Jordan [11], [12] au fost autorii interpretării corecte a funcției necunoscute care apare în ecuația diferențială postulată de Schrödinger. Funcția precizată, în terminologia modernă, are denumirea de *funcție de undă în reprezentarea de poziție* și aceasta are semnificația de amplitudine de probabilitate de localizare a electronului. În acest stadiu a fost clar că starea fizică a electronului atomului hidrogenoid este complet descrisă de funcția de undă în reprezentarea de poziție. Ulterior, problema evoluției în timp a stării electronului atomului hidrogenoid a fost formulată în termenii dependenței de timp a funcției de undă. Un pas definitoriu în fundamentarea noii fizici a fost făcut de savantul german W. Heisenberg [13]. Acesta asanează multitudinea de funcții și relații funcționale caracteristice particulei amintite și pune accent *numai* pe marimile măsurabile —

observabilele fizice. Tot Heisenberg este acela care reformuleaza problema evolutiei in timp a electronului atomului hidrogenoid in termenii dependentei de timp a marimilor fizice masurabile caracteristice. In acest stadiu, savantul distruge complet mitul clasic al traiectoriei demonstrand ca pozitia si impulsul unei particule *nu pot fi simultan masurate*, exemplificand astfel existenta observabilelor fizice incompatibile.

Prezentul manual are ca scop initierea tuturor iubitorilor de Natura care vor sa descopere cadrul stiintific actual al legilor nerelativiste care o guverneaza la nivel microscopic [distante comparabile cu dimensiunea atomica $10^{-10}m$]. Dat fiind publicul larg caruia i se adreseaza, Capitolul 2 are statutul de prolegomene matematice pentru formularea standard a Mecanicii Cuantice. Aici sunt introduse si exemplificate conceptele de: spatiu vectorial complex, spatiu Banach, spatiu Hilbert, operator liniar, adjunctul unui operator liniar si operator autoadjunct. In finalul capitolului sunt prezentate si argumentate regulile formalismului bra-ket al lui Dirac [14]. Acestea sunt necesare ulterior in derivarea facila si prezentarea compacta a rezultatelor mecanicii cuantice.

Capitolul 3 este dedicat “cinematicii” cuantice. Aici sunt formulate si particularizate la diverse sisteme cuantice postulatele mecanicii cuantice cu privire la descrierea starilor [cazul starilor pure] si observabilelor fizice precum si acelea referitoare la masurarea observabilelor fizice [pe stari pure]. In acest sens, se apeleaza un experiment tipic cuantic [experimental Stern-Gerlach] ale carui rezultate se arata ca nu pot fi justificate in cadrul teoriei clasice a interactiei electromagnetice. Analiza comportamentului atomilor de argint [sistemele fizice pentru care sunt masurate momentele magnetice dipolare in cadrul experimentului Stern-Gerlach] la trecerea prin diverse configuratii de camp magnetostatic sugereaza formularea postulatelor anuntate. Astfel, daca descrierile starilor si observabilelor fizice sunt implementate direct [prin stari cuantice — vectori normati la unitate dintr-un spatiu Hilbert si respectiv observabile cuantice — operatori autoadjuncti si dens definiti pe spatiul Hilbert mentionat], problematica masurarii observabilelor fizice este fundamentala in predictiile oferite de mecanica cuantica. In acest sector, dupa postularea valorilor asteptate la masurarea observabilelor fizice precum si a comportamentului sistemelor cuantice la masurarea observabilelor fizice, este analizata in detaliu problema masurarii simultane a doua observabile. In acest context, este dedusa si analizata exhaustiv o inegalitate de tip relatie de nedeterminare care controleaza masurarea simultana a doua observabile. Investigatia invocata stabileste, in multimea observabilelor cuantice corespunzatoare unui sistem dat, relatii binare de compatibilitate/incompatibilitate/complementaritate si, mai mult, permite introducerea conceptului de sistem complet de observabile cuantice compatibile. Tot in acest capitol sunt analizate in detaliu sistemele fizice care admit atat descriere clasica cat si cuantica [asa-numitele sisteme cuantice cu analog clasic]. Aici, dupa constructia reprezentarilor standard [pozitie si impuls], sunt analizate exhaustiv relatiile de nedeterminare pozitie-impuls. In finalul capitolului sunt implementate regulile de cuantificare canonica [15], [16] prin care se construiesc descrierea cuantica a unui sistem fizic nerelativist care admite si descriere clasica.

In Capitolul 4 este abordata problema evolutiei in timp a sistemelor cuantice. In prima parte a capitolului, problema anuntata este formulata in termenii dependentei starii cuantice de parametrul de evolutie [asa-numita descriere Schrödinger]. In acest context, se introduce generatorul evolutiilor infinitezimale in timp [ca observabila cuantica asociata observabilei fizice energie], se postuleaza legea locala de evolutie in timp a starii cuantice [ecuatia Schrödinger], se formuleaza problema centrala a mecanicii cuantice si se rezolva formal problema Cauchy corespunzatoare operatorului de evolutie. In continuare, se conecteaza informatiile continute in Postulatele III, IV si V prin analiza, in contextul evolutiei in timp, a rezultatelor masurarilor observabilelor fizice [probabilitati si medii]. Apoi, este introdus conceptul cuantic de constanta de miscare si se demonstreaza ca mediile acestora [pe solutiile ecuatiei Schrödinger] sunt independente de timp.

Mai mult, se arata ca rezultatelor masurarilor constantelor de miscare nu depind de timp. O situatie fizica des intalnita este reprezentata de sistemele cuantice conservative [observabila fizica energie si implicit cea cuantica Hamiltonian nu depind de timp]. In acest context, se arata ca problema evolutiei in timp este reductibila la problema spectrala a observabilei cuantice Hamiltonian. In acest stadiu se introduce conceptul de stare stationara ca starea cuantica provenind, via evolutia in timp, dintr-un vector propriu corespunzator unei valori proprii din spectrul discret al observabilei cuantice Hamiltonian. Acestea, desi au un statut *complet diferit* de cel al starilor stationare Bohr, se bucura de *acelasi* comportament in timp ca si cele din urma. Mai precis, se arata ca masurarea observabilelor cuantice si mediile acestora pe stari stationare nu depinde de timp. In continuare, discutia generala privind evolutia in timp a sistemelor cuantice este particularizata la cazul particulei fara spin si structura interna care evolueaza in spatiul afin Euclidian tridimensional ambient. Aici, pe baza implementarii in capitolul anterior a reprezentarilor de pozitie si impuls, se construiesc ecuatia de unda Schrödinger. In acest context, se investigheaza caracteristicile generale ale problemei spectrale corespunzatoare operatorului Hamiltonian [care este un operator diferential dens definit pe spatiul functiilor de modul patrat integrabile Lebesgue] si se stabileste interpretarea corecta a functiei de unda in reprezentarea de pozitie. In finalul analizei ecuatiei de unda Schrödinger, se studiaza comportamentul asimptotic al acesteia in limitele clasica [$\hbar \rightarrow 0$] si semi-clasica [$\hbar^2 \rightarrow 0$]. Demersul mentionat “conectea” ipoteza de Broglie cu limita clasica in sensul ca, limita clasica a solutiei ecuatiei de unda Schrödinger pentru o particula libera are expresia unei plane si monocromatice de Broglie. In cea de-a doua parte a Capitolului 4, se formuleaza si se rezolva problema existentei alternativelor la descrierea Schrödinger a evolutiei in timp a sistemelor cuantice. Aici, din cerinta ca o descriere arbitrara a evolutiei sa aiba *acelasi* continut fizic ca si descrierea Schrödinger, se deduce faptul ca ingredientele formularii standard [stari si observabile cuantice] in cele doua descrieri sunt conectate printr-un operator unitar. Prin alegerea adecvata a operatorului ante-mentionat se obtin descrierile Heisenberg si de interactie ale evolutiei unui sistem cuantic generic.

In Capitolul 5 sunt analizate descrierile cuantice ale unor sisteme fizice conservative, care admit si descriere clasica, sisteme de interes in toata fizica moderna. Primul dintre acestea este oscilatorul liniar armonic. Aici, pe baza procedurii Fock, se construiesc spatiul Hilbert al starilor cuantice si se rezolva problema evolutiei in timp [prin rezolvarea problemei spectrale a observabilei cuantice Hamiltonian]. De asemenea, se identifica un sistem complet de stari cuantice cu proprietati remarcabile — starile coerente. Cel de-al doilea sistem analizat este oscilatorul bidimensional anizotrop. Initial, pentru acesta se adopta o perspectiva holista si, pe baza procedurii utilizate la cazul uni-dimensional, se rezolva problema evolutiei in timp. Tot in acest context sunt construite starile coerente pentru oscilatorul bidimensional si se demonstreaza completitudinea sistemului acestora. Apoi, se adopta pentru sistemul precizat o perspectiva compozita, oscilatorul bidimensional fiind privit ca un sistem de doi oscilatori liniar armonici independenti. Ultima abordare permite generalizarea la cazul oscilatorului n -dimensional [$n \geq 3$] anizotrop. In finalul capitolului se analizeaza problema cuantica a celor doua corpuri. Aici se adopta o abordare holista si, folosind o schimbare adecvata a observabilelor cuantice fundamentale [inspirata de reparametrizarea spatiului fazelor care asigura separarea miscarilor in problema clasica a celor doua corpuri], se reduce problema spectrala a observabilei Hamiltonian [care in reprezentarea de pozitie corespunde rezolvarii unei ecuatii cu derivate partiale de ordinul doi pentru care functia necunoscuta depinde de *sase* parametri] la problema spectrala a observabilei Hamiltonian pentru o particula care evolueaza in spatiul afin Euclidian tridimensional ambient intr-un camp de energie potentiala [care in reprezentarea de pozitie corespunde rezolvarii unei ecuatii cu derivate partiale de ordinul doi pentru care functia necunoscuta depinde de *trei* parametri].

In Capitolul 6 este abordata problematica momentului cinetic. Data fiind legatura intima

dintre momentul cinetic si rotatii, initial sunt analizate aspectele geometrice ale rotatiilor. Apoi, rotatiile unui sistem cuantic sunt implementate via o reprezentare unitara a grupului rotatiilor $SO(3)$. In acest context, se stabilesc relatiile de comutare existente intre generatorii reprezentarii mentionate si pe baza acestora se interpreteaza generatorii amintiti in termenii observabilelor cuantice asociate observabilelor fizice moment cinetic total corespunzatoare sistemului cuantic generic considerat. Cu aceste interpretari, se rezolva problemele spectrale ale observabilelor cuantice moment cinetic; demers care furnizeaza [via Postulatul III] valorile care se pot obtine in experientele de masurare a observabilelor fizice moment cinetic. In continuare, rezultatele generale privind teoria cuantica a momentului cinetic se utilizeaza in vederea unei analize exhaustive a momentului cinetic orbital corespunzator particulei fara spin si structura interna care evolueaza in spatiul afin Euclidian tridimensional ambient. In aceasta situatie, se arata initial ca ponderile momentului cinetic orbital sunt numere naturale [apelate in literatura de specialitate ca numere cuantice orbitale] si implicit valorile proprii ale observabilelor cuantice moment cinetic orbital sunt numere intregi [asa-numitele numere cuantice magnetice]. Apoi, se considera reprezentarea de pozitie a sistemului cuantic precizat si se exprima baza standard a algebrei momentului cinetic orbital in termenii armonicelor sferice. In finalul capitolului se formuleaza si se rezolva problema cuantica a compunerii momentelor cinetice. In acest sens, se demonstreaza teorema Clebsch-Gordan cu privire la descompunerea produsului tensorial de reprezentari ireductibile ale algebrei $su(2)$ in suma directa de reprezentari ireductibile ale aceleiasi algebre Lie.

Capitolul 7 este dedicat problematicii simetriilor. Initial, se introduce conceptul de simetrie a unui sistem cuantic [legea de transformare a spatiului Hilbert al starilor cuantice care conserva "spatiul" solutiilor ecuatiei Schrödinger si nu afecteaza continutul fizic al teoriei]. Se studiaza implicatiile imediate ale acestuia. Apoi, in functie de natura grupului de simetrie [discret/Lie] se clasifica simetriile unui sistem cuantic in discrete si respectiv continue. In continuare, se studiaza simetriile discrete standard corespunzatoare particulei fara spin si structura interna care evolueaza in spatiul afin Euclidian tridimensional ambient [inversia spatiala — realizata via un operator unitar si involutiv si inversia temporală — implementata via un operator antiunitar si involutiv]. Ca exemplu de simetrie continua se studiaza simetria la rotatii a particulei fara spin si structura interna care evolueaza in spatiul afin Euclidian tridimensional ambient intr-un camp central. In acest context general [camp central arbitrar], se studiaza comportamentul asimptotic al functiilor proprii corespunzatoare observabilei cuantice Hamiltonian si se stabilesc aspectele importante ale solutiilor problemei spectrale corespunzatoare observabilei cuantice Hamiltonian. In final, se rezolva complet problema spectrala a observabilei ante-mentionate in conditiile in care potentialul in care evolueaza particula este de tip Coulombian-atractiv. Ultimele rezultate sunt indispensabile atat in fizica atomica deoarece furnizeaza starile legate ale atomilor hidrogenoizi [sectorul spectrului discret al observabilei cuantice Hamiltonian], cat si in teoria imprastierii electronilor pe nuclee atomice [sectorul spectrului continuu al observabilei cuantice Hamiltonian].

Autorul multumeste pe aceasta cale colegului si mentorului sau dr. Constantin BIZDADEA care prin indicatii metodologice si stiintifice riguroase a contribuit fundamental la expresia actuala a prezentului manual. De asemenea, autorul este recunoscator colegei dr. Solange-Odile SALIU pentru sprijinul acordat in exprimarea didactico-stiintifica foarte clara a diverselor aspecte abordate in carte. Nu in ultimul rand, autorul isi exprima gratitudinea fata de colegul dr. Iulian NEGRU care a avut rabdarea sa verifice cu minutiozitate prezentul manual.

