

Ecuatia lui Schrödinger

- se bazează pe comportamentul dual undă - corpuseul.  
introdus de de Broglie.

ptr o undă:

$$E = \hbar \omega.$$

ptr o particulă liberă.

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Considerăm mișcare unidimensională pe axa Ox.

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad k\text{-vect. de undă}$$

Introducem  $\Psi(x,t)$  - funcția de undă care ne descrie  
comportamentul particulei.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int A(k) \cdot e^{i(kx - \omega \cdot t)} dk = \int \frac{A(k)}{\hbar} \cdot e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dp$$

$$i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k) \cdot \hbar \omega \cdot e^{i(kx - \omega t)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k) \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot e^{i(kx - \omega t)}$$

dar  $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  - dacă validăm rel.  
de Broglie

↑  
energia  
undei

↑  
energia  
particulei

$$\Downarrow \quad i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi(x,t) = \text{ecuația lui Schrödinger ptr o particulă liberă.}$$

Ecuatia lui Schrödinger se poate obține formal asociind energiei și impulsului operatori matematici.

$$\begin{cases} E \rightarrow i\hbar \partial_t & = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_x & = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \end{cases} \quad p^2 = -\hbar^2 \partial_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Operatorii acționează asupra funcției de undă.  
Particulă liberă (mişcare unidimensională)

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad | \quad \Psi(x,t)$$

$$E \cdot \Psi(x,t) = \frac{p^2}{2m} \Psi(x,t)$$

$E \rightarrow i\hbar \partial_t \downarrow$

$p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_x \downarrow$

$$i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi(x,t)$$

Particulă într-un potențial

operatorul de poziție lasă  $\Psi(x,t)$  nemodificată

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad | \quad \Psi(x,t)$$

$$x \rightarrow x$$

$$E \Psi(x,t) = \frac{p^2}{2m} \Psi(x,t) + V(x) \cdot \Psi(x,t)$$

$\downarrow$

$$i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Psi(x,t) + V(x) \Psi(x,t)$$

↳ ec. Schrödinger ptr o particulă într-un potențial  $V(x)$ .

Operatorii:

$$\begin{cases} E \rightarrow i\hbar \partial_t \\ p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_x \\ x \rightarrow x \end{cases}$$

Operatorul Hamiltonian :

- ptr particulă liberă  $H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2$

- ptr particulă în pot  $H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x)$

$$E = H \left[ \Psi(x,t) \right]$$

$\downarrow$

$$i\hbar \partial_t$$

$$i\hbar \partial_t \Psi(x,t) = H \cdot \Psi(x,t)$$

- ec. lui Schrödinger ptr un sistem cuantic descris de Hamiltonianul H.

↳ ec. Schrödinger cea mai generală.

### Interpretarea fizică a funcției de undă

- fct. de undă are o interpretare statistică.

$P(x,t)$  - probabilitatea de a găsi particula la poziția  $x$  la momentul  $t$

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$

=  $\Psi(x,t) \cdot \Psi^*(x,t)$  - mărimi reale și pozitive

Pr ca  $P(x,t)$  să reprezinte o probabilitate

$$0 \leq P(x,t) \leq 1 \quad \text{și} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x,t) = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

- condiția de normare a funcției de undă.

O funcție de undă fizică trebuie să satisfacă întotdeauna condiția de normare.

### Curentul de probabilitate

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

$$\frac{d}{dt} \int \Psi(x,t) \cdot \Psi^*(x,t) dx = 0$$

$$\frac{d}{dt} \int |\Psi(x,t)|^2 dx = \int \left[ \partial_t \Psi(x,t) \cdot \Psi^*(x,t) + \Psi(x,t) \partial_t \Psi^*(x,t) \right] dx$$

ptr o particulă ce se mișcă în  $V(x)$

-4-

$$\frac{\psi^*}{i\hbar} \left| i\hbar \partial_t \psi(x,t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi(x,t) + V(x) \psi(x,t) \right|^*$$

$$\frac{\psi}{(-i\hbar)} \left| -i\hbar \partial_t \psi^*(x,t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi^*(x,t) + V(x) \psi^*(x,t) \right|$$

$$\psi^*(x,t) \cdot \partial_t \psi(x,t) = - \frac{\hbar}{2mi} \cdot \psi^* \cdot \partial_x^2 \psi + \frac{1}{i\hbar} \cancel{\psi^* V \psi}$$

$$\psi(x,t) \partial_t \psi^*(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \psi \cdot \partial_x^2 \psi^* - \frac{1}{i\hbar} \cancel{\psi V \psi^*}$$

$$\psi^* \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^* = - \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \partial_x^2 \psi - \psi \partial_x^2 \psi^* \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \rho(x,t) dx &= \int - \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \partial_x^2 \psi - \psi \partial_x^2 \psi^* \right) dx \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \cdot \int \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi \cdot \partial_x \psi^* - \psi^* \partial_x \psi \right) dx \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi \partial_x \psi^* - \psi^* \partial_x \psi \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ &= 0. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x,t) = 0 !$$

O funcție de undă care satisface condiția de normare se anulează la  $\infty$ .

$$S(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(x,t) \partial_x \psi(x,t) - \psi(x,t) \cdot \partial_x \psi^*(x,t) \right)$$

- curenț de probabilitate.

$$\frac{d}{dt} P(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} S(x,t) = 0.$$

ec. de continuitate pentru densitatea de probabilitate.

electrostatică -5-

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

densitatea de sarcină

curentul de sarcină

$P(x,t)$  - densitate de probabilitate

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$

Generalizarea la mișcarea tridimensională

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$  - impuls

$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  - vector de undă.

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$$

$$\begin{aligned} \vec{p} = (p_x, p_y, p_z) &= p_x \vec{i} + p_y \vec{j} + p_z \vec{k} \\ &= \frac{\hbar}{i} \partial_x \vec{i} + \frac{\hbar}{i} \partial_y \vec{j} + \frac{\hbar}{i} \partial_z \vec{k} \\ &= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \end{aligned} \quad \vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$$

$$\begin{cases} \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \\ E \rightarrow i\hbar \partial_t \\ \vec{r} \rightarrow \vec{r} \end{cases}$$

- operatorii în cazul mișcării 3D.

$$i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r}, t) = H \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$$i\hbar \partial_t \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t)$$

ec. Schrödinger ptr o particulă într-un potențial  $V(\vec{r})$ .

În 3D:

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

Condiția de normare pînă funcția de undă este:

$$\int d\vec{r} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1.$$

Curentul de probabilitate:

$$S(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t))$$

Ecuatia de continuitate:  $\frac{d}{dt} P(\vec{r}, t) + \nabla S(\vec{r}, t) = 0$

Probleme:

① O antenă cu puterea de 45 kW emite unde radio cu frecvența de 4 MHz.

Câți fotoni sunt emiși pe sec. de antenă?

$$P = 45 \text{ kW} \Rightarrow E = P \cdot t$$

Într-o sec.  $E = 45 \text{ kW} \cdot 1 \text{ s} = 45 \text{ kJ} = 45 \cdot 10^3 \text{ J}.$

$E_0$  - energia unui foton  $E_0 = h\nu$  ;  $\nu = 4 \cdot 10^6 \text{ Hz}.$

$$E = n \cdot E_0 \Rightarrow n = \frac{E}{E_0}$$

$$n = \frac{P \cdot t}{h\nu} = \frac{45 \cdot 10^3 \text{ J}}{6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \cdot 4 \cdot 10^6 \frac{1}{\text{s}}}$$

$$n = \frac{45 \cdot 10^3 \cdot 10^{34} \cdot 10^{-6}}{26,48} = 1,6 \cdot 10^{31}$$

$n \approx 1,6 \cdot 10^{31}$

② O particulă este descrisă de funcția de undă  $\Psi(x) = A \cdot \frac{1}{1+x^2}$  unde A reprezintă const. de normare.

a) Să se determine A, folosind condiția de normare a fct. de undă.

b) Să se det. a amplitudinea pachetului de unde  $\psi(x)$

Condiția de normare a fct de undă este:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

$$\psi(x) = A \cdot \frac{1}{1+x^2}$$

$$|\psi(x)|^2 = A^2 \cdot \frac{1}{(1+x^2)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 \cdot \frac{1}{(1+x^2)^2} dx = 1$$

$$A^2 \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^2} dx}_{I} = 1$$

$$A^2 \cdot I = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{I}}$$

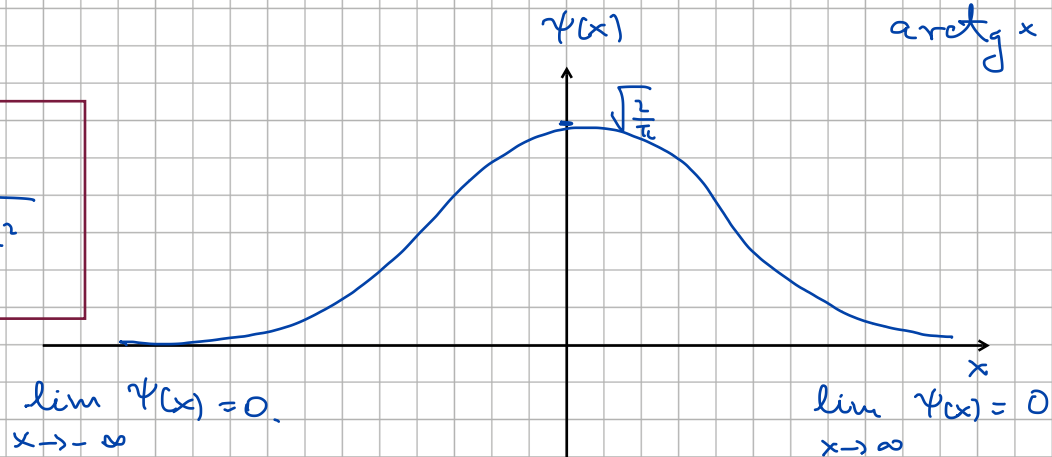
$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^2} dx = \frac{\pi}{2}$$

$$\int \frac{1}{(1+x^2)^2} dx = \frac{1}{2} \left( \frac{x}{1+x^2} + \arctg x \right)$$

$$\int \frac{x'}{(1+x^2)^2} dx = \frac{1}{2} \left( \frac{x}{1+x^2} + \underbrace{\int \frac{1}{1+x^2}}_{\arctg x} \right)$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{1+x^2}$$



$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \checkmark$$

b)  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{1}{1+x^2}$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int \psi(x) \cdot e^{ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+x^2} \cdot e^{ikx} dx$$

$$\phi(k) = \frac{1}{\pi} \cdot e^{-|k|}$$

③ Se consideră funcțiile de undă:

$$\Psi_1(x) = A_1 \cdot e^{-x^2}, \quad \Psi_2(x) = A_2 \cdot e^{-x^2/2}, \quad \Psi_3(x) = A_3 (e^{-x^2} + x \cdot e^{-x^2/2})$$

unde  $A_1, A_2, A_3$  sunt constante de normare.

a) Să se determine  $A_1, A_2, A_3$  a.i. fiecare funcție de undă  $\Psi_1(x), \Psi_2(x)$  și  $\Psi_3(x)$  să fie normate.

b) Să se găsească probabilitatea ca particula 1, descrisă de  $\Psi_1(x)$  să se afle în intervalul  $x \in [-1, 1]$ .

Se cunoaște că: 
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_1(x)|^2 dx = 1 \quad A_1^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2x^2} dx = 1$$
  
$$A_1^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} = 1 \Rightarrow A_1 = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \checkmark$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_2(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow A_2^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 1$$
  
$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \Rightarrow A_2 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \cdot e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \cdot e^{-\frac{3x^2}{2}} dx = 0 \quad \text{④} \quad (\text{fct. impară pe interval simetric în raport cu originea})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_3(x)|^2 dx = 1 \quad A_3^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} (e^{-x^2} + x e^{-x^2/2})^2 dx = 1$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( e^{-x^2} + x e^{-x^2/2} \right)^2 =$$
  
$$I \Rightarrow A_3 = \frac{1}{\sqrt{I}}$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \underbrace{e^{-2x^2}}_{a^2} + \underbrace{2x e^{-3x^2/2}}_{2ab} + x^2 e^{-x^2} \right) = \left( \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right)$$



$$A_3^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \right) = 1$$

$$\Rightarrow A_3^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \frac{\sqrt{2}+1}{2} = 1$$

- 9 -

$$A_3 = \left( \frac{2}{\sqrt{2}+1} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{\pi}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

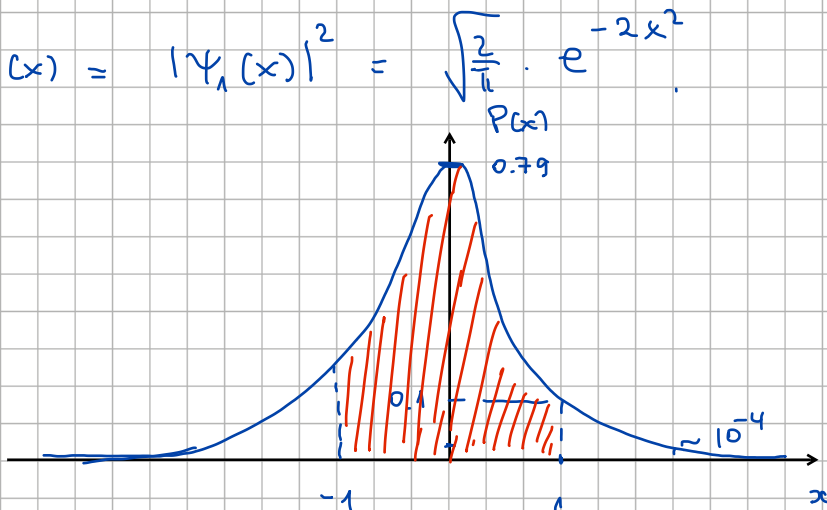
$$b) \quad \psi_1(x) = A_1 \cdot e^{-x^2} \Rightarrow \psi_1(x) = \left( \frac{2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-x^2}$$

$$P_1(x) = |\psi_1(x)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot e^{-2x^2}$$

$$P(0) = 0.79 \dots$$

$$P(1) = 0.10 \dots$$

$$P(2) = 0.0002 \dots \sim 10^{-4}$$



$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = 1$$

condiția de normare  
a fot. de undă.

$$P_{(-1,1)} = \int_{-1}^1 P(x) dx = \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot e^{-2x^2} dx = \text{Erf}(\sqrt{2})$$

$$\text{Erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

$$P[-1,1] = 0.954 \Rightarrow 95.4\%$$

probabilitate de a găsi particule  
în intervalul  $[-1,1]$ .