

## C1.1 De ce Teoria Cuantică a Materiei?

Gilbert Newton Lewis (1933): „Nu poate fi nici un dubiu în faptul că *mecanica cuantică* poartă întreaga soluție a problemelor chimiei”! Structura materiei prin urmare, cu starea solida inclusă, precum și transformările ei își găsesc explicația logico-matematică și fizică în formalismul mecanicii cuantice. Secțiunile de față sunt dedicate introducerii elementare, dar fundamentale, a bazelor reprezentării cuantice a materiei.

Se pornește de la reprezentarea unui sistem fizic (atom, moleculă, substanță, corp macroscopic) în evoluție (temporală), ca un *sistem dinamic*.

Se pune apoi problema *măsurării* proprietăților acestui sistem.

*Mecanica clasică* prescrie o deplină cunoaștere a proprietăților sistemului dacă acestea pot fi măsurate *în toate instanțele* sau la oricare moment al evoluției sale.

*Mecanica cuantică* este însă o teorie mai generală ce nu cere ca la repetiția unui experiment pentru măsurarea unei proprietăți fizice (lungime, viteză, energie, etc.) aceasta să se reproducă *exact* cu aceeași valoare la orice măsurătoare.

Mecanica cuantică este *o teorie statistică* prin excelență. Experimente celebre în difracția de electroni precum ale lui Davidson și Germer, Thomson, și Rupp, precum și cele în fascicule moleculare ale lui Rabi au confirmat pe deplin validitatea descrierii (măsurării) cuantice (statistice) a materiei.

În mecanica clasică abordarea statistică este văzută ca un instrument convenabil de caracterizare a evoluției unui sistem, prin mărimi precum probabilitatea, densitatea, etc.

În mecanica cuantică au sens fizic *doar* mărimile mediate, valorile medii măsurate. În aceste condiții, care sunt legile dinamice ale teoriei cuantice?

Se vor sintetiza în așa numitele Postulate ale mecanicii cuantice, cu directă aplicabilitate la structura atomilor și moleculelor. În continuare este redată o prezentare analitică a acestor concepte fără a se detalia excesiv aparatul matematic.