

Programa de Mecânica Quântica

| 7600022 >

$$\left| \begin{array}{c} \text{Skeleto} \\ \text{cat} \end{array} \right\rangle = \alpha \left| \begin{array}{c} \text{White} \\ \text{cat} \end{array} \right\rangle + \beta \left| \begin{array}{c} \text{Black} \\ \text{cat} \end{array} \right\rangle$$

Prof. Valter L. Líbero

Instituto de Física de São Carlos

Programa resumido:

Equação de Schrödinger para $\Psi(\vec{r}, t)$

Potenciais 1D: oscilador harmônico

Fundamentos: operadores

Momento angular

Átomo de hidrogênio

Spin

Teoria de perturbações

Griffths, Mecânica Quântica

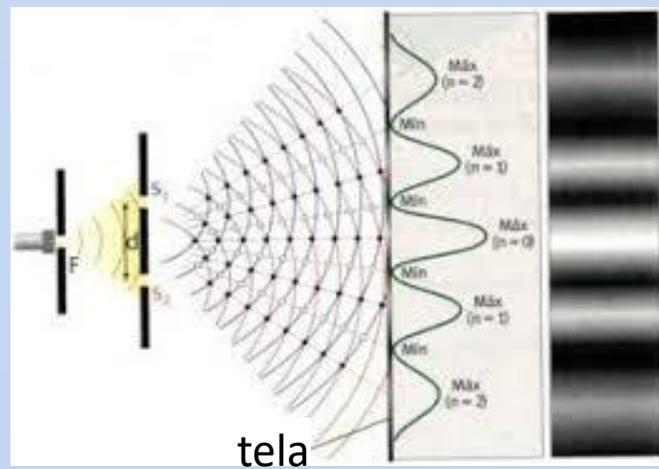
Cohen, Diu, Laloe, Quantum Mechanics

Programa

detalhado

Função de onda

$$\Psi(\vec{r}, t)$$



- Equação de Schrödinger para $V(\vec{r}, t)$

$$\mathbf{H} \Psi = i\hbar \partial_t \Psi$$

- Interpretação estatística: $|\Psi|^2$

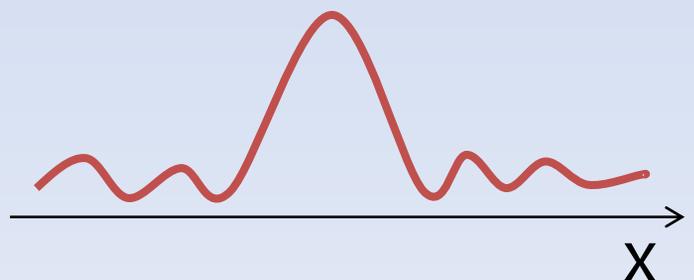
- Médias: $\int \Psi^* \mathcal{O} \Psi dx = \langle \mathcal{O} \rangle$

- Operadores **posição** e **momento linear**

- Outros operadores:
 - energia potencial
 - energia cinética
 - momento angular

- **Princípio de incerteza**

$$\Delta x \Delta p > \hbar/2$$



Equação de Schrödinger

para potenciais
independentes do tempo

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$$

-> Equação independente do tempo

$$H \varphi = E \varphi(\vec{r})$$



estado
estacionário

+ condições de contorno -> família de soluções

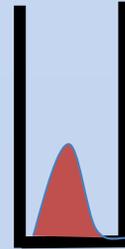
-> Superposição:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n A_n \varphi_n(\vec{r}) e^{-i E_n t}$$

Aplicações:

* **Partícula confinada entre duas paredes**

(poço quadrado infinito)



- condições de contorno
- autofunções e autoenergias
- normalização de autofunções
- **condição inicial e evolução temporal de pacote de onda**
- valor esperado da energia
- energia de ponto zero (para uma partícula!)

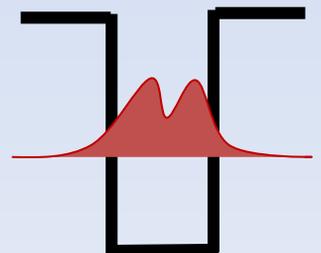
* **Oscilador Harmônico**



- **operadores de levantamento e abaixamento de estados**
- operadores \mathbf{p} e \mathbf{x} juntos em \mathbf{H} : eles não comutam!
- espectro de energias
- Frobenius: polinômios de Hermite
- limite clássico

• **Partícula livre**

- não há condição de contorno
- não há estado estacionário
- **as soluções formam um conjunto completo**
- pacotes
- velocidade de fase e de grupo



* **Poço quadrado finito**

O formalismo

$\Psi \in$ espaço de Hilbert

- operadores **Hermitianos**: observáveis
- espectro de **observáveis**:
- completeza e ortogonalidade
- princípio de **superposição**
- interpretação estatística
- valor esperado
- princípio de **incerteza** generalizado
- notação de Dirac: $\int f^*(x) \cdot g(x) dx = \langle f | g \rangle$

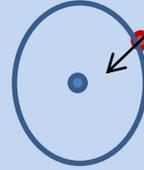
$$\begin{aligned} g(x) &\rightarrow |g\rangle \\ f^*(x) &\rightarrow \langle f| \end{aligned}$$

$\langle f | g \rangle =$ um número; $|f\rangle\langle g| =$ um operador

Três dimensões

- coordenadas esféricas (r, θ, φ)

- o átomo de **hidrogênio**

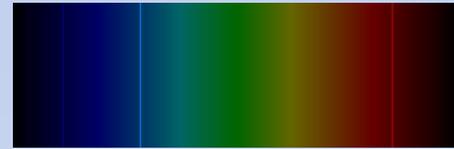


- potencial radial: $V(r)$ ← Módulo de \vec{r}

- separação de variáveis: $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$

- parte radial: polinômios de Laguerre

- o espectro de energias: $E_n = -E_0/n^2$



- o operador **momento angular L** e sua conservação

- parte angular: harmônicos esféricos Y_{lm}

- números quânticos $|n, l, m\rangle$

- **spin S** ($=1/2$) do elétron: $|n, l, m\rangle |\pm 1/2\rangle$

- soma de momentos angulares: **$J = L + S$**

Teoria de perturbação independente do tempo

$$\mathbf{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$$

↑
não sei diagonalizar

$$\mathbf{H} = H_0 + \mathbf{H}' \leftarrow \text{"pequeno"}$$

$$H_0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \leftarrow \text{sei diagonalizar}$$

$$E_n = E_n^0 + \langle \Psi_n^0 | \mathbf{H}' | \Psi_n^0 \rangle + \dots$$

Aplicações:

oscilador harmônico

hidrogênio:

- em campo elétrico
- interação fina e hiperfina
- em campo magnético

Teoria de perturbação no hidrogênio

$$H = H_0 + V(r)$$

↑
Perturbação inerente

* Estrutura fina no hidrogênio:

$$E_f \sim E_0/10.000$$

- correção relativística
- acoplamento spin-órbita
- o termo de Darwin

* Estrutura hiperfina no hidrogênio:

$$E_{hf} \sim E_f/2.000$$

- o spin do próton entra em cena
- origem da radiação de 21 cm, utilizada em radioastronomia

Se der tempo!

Partículas idênticas e indistinguíveis

- Bósons e Férmios



- Spin e estatística

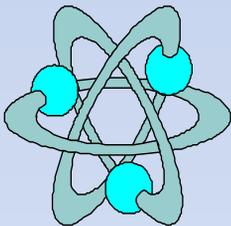


- Interação de troca

$$|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle$$

- O átomo de hélio: $H = H_1 + H_2 - e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

- A tabela periódica: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p



Mencionar:

- Gás de elétrons livres

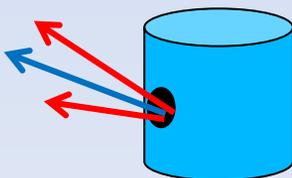
- Estrutura de bandas

- Estatística quântica

- Bose-Einstein ou Fermi-Dirac

- Espectro de corpo negro

Fluxo



T

Emite de
forma
especial

Se der tempo!

Princípio Variacional

$$H \Psi_0 = E_0 \Psi_0$$

↑
não sei diagonalizar

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle \leq \langle \phi | H | \phi \rangle \equiv E$$

$|\phi\rangle$ uma tentativa \rightarrow E um limite superior

Aplicações: oscilador harmônico e potencial caixa .

* Estado fundamental do hélio:

- Z_{efetivo} como parâmetro variacional
- importância da interação elétron – elétron

* Molécula de hidrogênio ionizada:

Avaliações



PROVAS

P1: função de onda (1), Eq. Schrödinger (2) e formalismo (3)

P2: Mec. Q. em 3D – hidrogênio (4)

P3: Teoria de Perturbação (6)

Sub.:
$$\frac{|bem\rangle + |mal\rangle}{\sqrt{2}}$$

cai tudo!