

Aula 19: Física Quântica

Bárbara Amaral
Instituto de Física da USP

Os postulados da Física Quântica

Bibliografia

- ▶ Moysés: seções 8.1, 8.2, 9.1, 10.1 a 10.4.

A dualidade onda-partícula

Dualidade onda-partícula

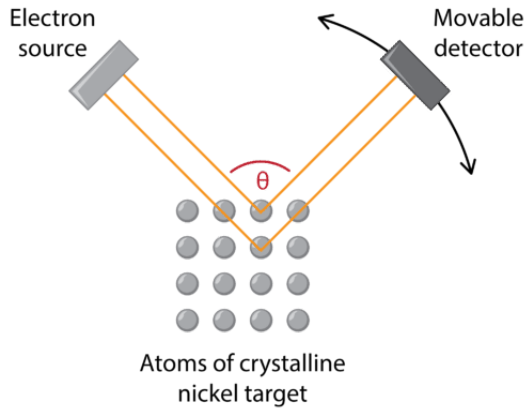
A radiação eletromagnética algumas vezes se comporta como onda e algumas vezes se comporta como partícula.

Princípio da complementaridade

É necessário usar o modelo ondulatório juntamente com o modelo corpuscular para termos uma descrição completa da natureza.

De Broglie

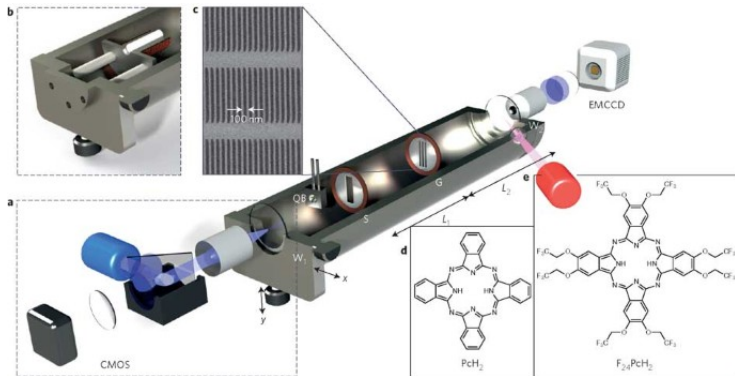
Se a natureza é simétrica, essa dualidade também deveria ser válida para a matéria.



Feixes de elétrons são difratados ao passarem por um cristal.

Experimento da fenda dupla com ftalocianina

$C_{32}H_{18}N_8$



O que a onda associada a uma partícula representa?

Uma partícula não é um ponto geométrico, mas uma entidade que ocupa uma região do espaço.

A distribuição espacial de uma partícula é descrita por uma função chamada de **função de onda**.

A **função de onda** está relacionada à probabilidade de encontrar a partícula em uma região do espaço.

Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen.

Von W. Heisenberg in Göttingen.

(Eingegangen am 29. Juli 1926.)

In der Arbeit soll versucht werden, Grundlagen zu gewinnen für eine quantentheoretische Mechanik, die ausschließlich auf Beziehungen zwischen prinzipiell beobachtbaren Größen basiert ist.

Bekanntlich läßt sich gegen die formalen Regeln, die allgemein in der Quantentheorie zur Berechnung beobachtbarer Größen (z. B. der Energie im Wasserstoffatom) benutzt werden, der schwerwiegende Einwand erheben, daß jene Rechenregeln als wesentlichen Bestandteil Beziehungen enthalten zwischen Größen, die scheinbar prinzipiell nicht beobachtet werden können (wie z. B. Ort, Umlaufzeit des Elektrons), daß also jenen Regeln offenbar jedes anschauliche physikalische Fundament mangelt, wenn man nicht immer noch an der Hoffnung festhalten will, daß jene bis jetzt unbeobachtbaren Größen später vielleicht experimentell zugänglich gemacht werden könnten. Diese Hoffnung könnte als berechtigt angesehen werden, wenn die genannten Regeln in sich konsequent und auf einen bestimmt umgrenzten Bereich quantentheoretischer Probleme anwendbar wären. Die Erfahrung zeigt aber, daß sich nur das Wasserstoffatom und der Starkereffekt dieses Atoms jenen formalen Regeln der Quantentheorie fügen, daß aber schon beim Problem der „gekreuzten Felder“ (Wasserstoffatom in elektrischem und magnetischem Feld verschiedener Richtung) fundamentale Schwierigkeiten auftreten, daß die Reaktion der Atome auf periodisch wechselnde Felder sicherlich nicht durch die genannten Regeln beschrieben werden kann, und daß schließlich eine Ausdehnung der Quantenregeln auf die Behandlung der Atome mit mehreren Elektronen sich als unmöglich erwiesen hat. Es ist üblich geworden, dieses Versagen der quantentheoretischen Regeln, die ja wesentlich durch die Anwendung der klassischen Mechanik charakterisiert waren, als Abweichung von der klassischen Mechanik zu bezeichnen. Diese Bezeichnung kann aber wohl kaum als sinngemäß angesehen werden, wenn man bedenkt, daß schon die (ja ganz allgemein gültige) Einstein-Bohrsche Frequenzbedingung eine so völlige Absage an die klassische Mechanik oder besser, vom Standpunkt der Wellentheorie aus, an die dieser Mechanik zugrunde liegende Kinematik darstellt, daß auch bei den einfachsten quantentheoretischen Problemen an

THE
PHYSICAL REVIEW

AN UNDULATORY THEORY OF THE MECHANICS
OF ATOMS AND MOLECULES

BY E. SCHRÖDINGER

ABSTRACT

The paper gives an account of the author's work on a new form of quantum theory. §1. The Hamiltonian analogy between mechanics and optics. §2. The analogy is to be extended to include real "physical" or "undulatory" mechanics instead of mere geometrical mechanics. §3. The significance of wave-length; macro-mechanical and micro-mechanical problems. §4. The wave-equation and its application to the hydrogen atom. §5. The intrinsic reason for the appearance of discrete characteristic frequencies. §6. Other problems; intensity of emitted light. §7. The wave-equation derived from a Hamiltonian variation-principle; generalization to an arbitrary conservative system. §8. The wave-function physically means and determines a continuous distribution of electric-ity in space, the fluctuations of which determine the radiation by the laws of ordinary electrodynamics. §9. Non-conservative systems. Theory of dispersion and scattering and of the "transitions" between the "stationary states." §10. The question of relativity and the action of a magnetic field. Incomplete-ness of that part of the theory.

A função de onda

Em escalas atômicas e subatômicas, uma partícula não pode ser tratada como um ponto.

Descrevemos uma **função de onda** para descrever o estado da partícula:

$$\Psi(x, y, z, t)$$

A partir dessa função de onda podemos encontrar previsões **probabilísticas** sobre o comportamento da partícula.

A física quântica é probabilística *a priori*.

Interpretação da função de onda

A função de onda descreve a **distribuição de probabilidade** de uma partícula no espaço.

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 dV$$

é a probabilidade de que a partícula seja encontrada no tempo t dentro do volume dV em torno do ponto (x, y, z) .

Polarização



Distingue entre polarização H e V

$|H\rangle$ é absorvido

$|V\rangle$ é transmitido

$$|\psi\rangle = \alpha |H\rangle + \beta |V\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2$$

amplitudes de probabilidade α associado à resposta H β associado à resposta V

$$P(\text{absorvido}) = |\alpha|^2 \quad \text{probabilidade}$$

$$P(\text{transmitido}) = |\beta|^2 \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Posição:

Possíveis respostas: $\vec{r} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$

Precisamos associar uma amplitude de probabilidade a cada possível resposta

t fixo

$\Psi(x, y, z)$ é a amplitude de probabilidade associada à posição (x, y, z)

$\Psi(x, y, z)$ é a "coordenada" do "vetor de estado" associado a (x, y, z)

"vetor infinito"

A probabilidade de encontrar a partícula na região V no tempo t é:

$$\iiint_V |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV.$$

A função de onda precisa ser **normalizada**:

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1$$

Postulado 1

- ▶ Todo sistema quântico está associado a um espaço vetorial $\mathcal{H}$ chamado seu **espaço de estados**.

Postulado 1

- ▶ Todo sistema quântico está associado a um espaço vetorial $\mathcal{H}$ chamado seu **espaço de estados**.
- ▶ O **estado** do sistema é um vetor normalizado em seu espaço de estados.

Dimensão finita:

$$\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$$

$$|\psi\rangle \in \mathbb{C}^d$$

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_d \end{bmatrix}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* & \dots & \alpha_d^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_d \end{bmatrix}$$

$$= \alpha_1^* \alpha_1 + \alpha_2^* \alpha_2 + \dots + \alpha_d^* \alpha_d$$

$$= |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \dots + |\alpha_d|^2 = 1$$

Partícula em 3 dimensões

→ *Análise funcional*

- ▶ **Espaço de estados:** Espaço das funções quadrado
integráveis. L^2

Partícula em 3 dimensões

- ▶ **Espaço de estados:** Espaço das funções quadrado integráveis.
- ▶ **Estado:** Função $\Psi(x, y, z, t)$ tal que

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1$$

Posição:

t fixo

Espaco de estados:

$$L^2: \left\{ \Psi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C} \mid \iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x, y, z)|^2 dV \text{ existe} \right\}$$

Estado: $\Psi(x, y, z)$ tais que

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x, y, z)|^2 dV = 1$$

Produto interno:

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \iiint_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(x, y, z) \Phi(x, y, z) dV$$

Postulado 2

Uma medição ou teste em um sistema quântico é dada por uma base ortonormal de $\mathcal{H}$:

$$\{|\mathbf{v}_1\rangle, \dots, |\mathbf{v}_d\rangle, \dots\}$$

Postulado 2

Uma medição em um sistema quântico é dada por um operador hermitiano A .

$$A = \sum_j a_j P_j.$$

Postulado 2

Se a medição associada aos projetores P_j é aplicada a um sistema no estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de obtermos a resposta j é

$$p(j) = \langle \psi | P_j | \psi \rangle.$$

Postulado 2

Se a resposta j foi obtida, o estado do sistema após a medição é

$$|\psi_j\rangle = \frac{P_j|\psi\rangle}{\|P_j|\psi\rangle\|}.$$

Coordenadas espaciais

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow x\Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow y\Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow z\Psi(\mathbf{r}, t)$$

Coordenadas do momento

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}(\mathbf{r}, t)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial y}(\mathbf{r}, t)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial z}(\mathbf{r}, t)$$

Energia potencial

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow U(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)$$

Energia cinética

$$\psi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t).$$

$$\nabla^2 \psi(r, t) = \frac{d^2}{dx^2} \psi(r, t) + \frac{d^2}{dy^2} \psi(r, t) + \frac{d^2}{dz^2} \psi(r, t)$$

Evolução temporal do vetor de estado
da função de onda

Postulado 3

função de onda

O vetor de estado deve satisfazer uma equação chamada **equação de Schrödinger**:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle.$$

H é um operador associado à energia do sistema, chamado **operador Hamiltoniano**.

Para encontrar o vetor de estado que descreve um sistema, temos que resolver a equação de Schrödinger e encontrar a solução que satisfaz as condições iniciais adequadas.

Como encontrar a evolução temporal do vetor de estado?

função de onda

- ▶ Determinar H ;

- ▶ Determinar H ;
- ▶ Resolver a equação de Schrödinger;

Matemática
EDP

- ▶ Determinar H ;
- ▶ Resolver a equação de Schrödinger;
- ▶ Encontrar a solução que satisfaz as condições iniciais adequadas.

Resolvendo a equação de Schrödinger

Vamos resolver a a equação de Schrödinger para o caso em que H não depende de t .

Método de separação de variáveis

→ superição bem forte

Procuramos inicialmente soluções da forma:

$$|\Psi(t)\rangle = \underline{T(t)}|\psi\rangle.$$

$$T(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$$

$|\psi\rangle$ parte vetorial, constante em t

separação de variáveis

$$|\Psi(t)\rangle = T(t) |\Psi\rangle$$

substituímos na eq. de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} (T(t) |\Psi\rangle) = H (T(t) |\Psi\rangle)$$

$$T' = \frac{dT}{dt}$$

$$\underbrace{i\hbar T'(t)}_{\in \mathbb{C}} |\Psi\rangle = \underbrace{T(t)}_{\in \mathbb{C}} \underbrace{(H |\Psi\rangle)}_{\text{não depende de } t}$$

H não depende de t

$$\underbrace{\frac{i\hbar T'(t)}{T(t)}}_E |\Psi\rangle = \underbrace{H |\Psi\rangle}_{\text{não depende de } t}$$

$\hookrightarrow$ não depende de t

E não pode depender de t

$$\frac{i\hbar T'(t)}{T(t)} = E$$

↳ não depende do tempo

$$T'(t) = \frac{E}{i\hbar} T(t)$$

$$\frac{1}{i} = -i$$

$$T(t) = e^{Et/i\hbar}$$

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

PARTE
TEMPORAL

Parte espacial

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$|\psi\rangle$ é autovetor de H com autovalor E .

Solução separável não da forma:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi\rangle$$

$|\psi\rangle$ é autovetor de H com autovalor E .

Método de separação de variáveis

Com essa suposição temos:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{\frac{-iEt}{\hbar}} |\psi\rangle.$$

$|\psi\rangle$ é solução da **equação de Schrödinger independente do tempo**:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Estados estacionários

$$|\Psi(t)|^2 = |\psi|$$

não depende do tempo.

Em geral o estado do sistema é uma **superposição** dos estados estacionários.

Interação do Spin com um campo magnético

Momento de dipolo magnético de Spin

$$\mu_S = \gamma_S S$$

constante giro magnética

$$= \gamma_S (S_x, S_y, S_z)$$

Torque

$$\tau_S = \mu_S \times B$$

Energia associada

$$\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$$

$$\mu_S = \gamma_S (S_x, S_y, S_z)$$

$$H_S = -\mu_S \cdot \mathbf{B}$$

$$\begin{aligned} H_S = & -\gamma_S B_x S_x - \gamma_S B_y S_y \\ & - \gamma_S B_z S_z \end{aligned}$$

Exemplo

Partícula de spin 1 em um campo magnético na direção x .

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\vec{B} = (B, 0, 0)$$

$$H_s = -\gamma_s B S_x - \gamma_s \cdot 0 \cdot S_y - \gamma_s \cdot 0 \cdot S_z$$

$$= -\gamma_s B S_x = \underbrace{-\frac{\gamma_s B \hbar}{\sqrt{2}}}_{\alpha} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Estados estacionarios

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi\rangle$$

$$H_s |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

Encontrar autovalores e autovetores de H_S

$$\det(H_S - \lambda I) = 0$$

$$H_S = \underbrace{-\frac{\gamma_S B \hbar}{2}}_{\alpha} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$H_S - \lambda I = \begin{bmatrix} -\lambda & \alpha & 0 \\ \alpha & -\lambda & \alpha \\ 0 & \alpha & -\lambda \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \det(H_S - \lambda I) &= -\lambda^3 + \alpha^2 \lambda + \alpha^2 \lambda \\ &= -\lambda^3 + 2\alpha^2 \lambda = 0 \end{aligned}$$

$$\lambda(-\lambda^2 + 2\alpha^2) = 0$$

$$\lambda = 0, \quad \lambda = \pm \sqrt{2} \alpha = \pm \sqrt{2} \left(-\frac{\gamma_S B \hbar}{\sqrt{2}} \right)$$

$$\lambda = \pm \gamma_S B \hbar$$

valores possíveis p/ energia:

$$E_1 = \gamma_S B \hbar, \quad E_2 = 0, \quad E_3 = -\gamma_S B \hbar$$

↳ autovalores do Hamiltoniano

Autovalores:

$$E_3 = \gamma_3 B \hbar = -\sqrt{2} \alpha$$

$$|v_3\rangle = (x_3, y_3, z_3)$$

$$(H_3 - \lambda I) |v_3\rangle = 0$$

$$\begin{bmatrix} -\lambda & \alpha & 0 \\ \alpha & -\lambda & \alpha \\ 0 & \alpha & -\lambda \end{bmatrix} |v_3\rangle = 0$$

$$\lambda = -\sqrt{2} \alpha$$

$$\begin{bmatrix} \sqrt{2}\alpha & \alpha & 0 \\ \alpha & \sqrt{2}\alpha & \alpha \\ 0 & \alpha & \sqrt{2}\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} \sqrt{2}\alpha x_1 + \alpha y_1 = 0 & (1) \\ \alpha x_1 + \sqrt{2}\alpha y_1 + \alpha z_1 = 0 & (2) \\ \alpha y_1 + \sqrt{2}\alpha z_1 = 0 & \leftarrow (3) \end{cases}$$

de (3) : $y_1 = -\sqrt{2} z_1$

substituindo em (2)

$$\alpha x_1 + \sqrt{2}\alpha (-\sqrt{2} z_1) + \alpha z_1 = 0$$

$$\alpha x_1 - 2\alpha z_1 + \alpha z_1 = 0$$

$$\alpha x_1 - \alpha z_1 = 0$$

$$x_1 = z_1$$

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ -\sqrt{2} z_1 \\ z_1 \end{pmatrix}$$

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$E = \gamma_s B \hbar$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

Estado estacionário correspondente:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi\rangle$$

$$= e^{-i\gamma_s B \hbar t/\hbar} \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$|\Psi_s(t)\rangle = e^{-i\gamma_s B t} \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$E_2 = 0$$

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$|\Psi_2(t)\rangle = e^{-i0t/\hbar} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$E_3 = -\gamma_s B \hbar$$

$$|\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

$$|\Psi_3(t)\rangle = e^{+i\gamma_3 B t} \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

Conjunto de estados estacionários

$$|\Psi_1(t)\rangle, |\Psi_2(t)\rangle, |\Psi_3(t)\rangle$$

Todos os outros estados são da forma:

$$|\Psi(t)\rangle = c_1 |\Psi_1(t)\rangle + c_2 |\Psi_2(t)\rangle + c_3 |\Psi_3(t)\rangle$$

Como encontrar c_1 , c_2 e c_3 ?

$$\underline{|\Psi(0)\rangle} = c_1 |\Psi_1(0)\rangle + c_2 |\Psi_2(0)\rangle$$

estado inicial

$$+ c_3 |\Psi_3(0)\rangle$$

$$= c_1 \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$