

Aula 20: 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.

Evolução temporal do vetor de estado

Postulado 3

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?

- ▶ Determinar H ;

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

Física

- ▶ Determinar H ;
- ▶ Resolver a equação de Schrödinger;
- ▶ Encontrar a solução que satisfaz as condições *Física*
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

Procuramos inicialmente soluções da forma:

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

Método de separação de variáveis

Com essa suposição temos:

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

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

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

Estados estacionários

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

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

não depende do tempo.

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

Exemplo

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

Partícula em uma dimensão

$$\psi(x, t)$$

Vamos supor que a partícula se desloca na presença de uma força conservativa associada ao potencial $U(x)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)+U(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

Estados estacionários

$$\Psi(x, t) = T(t)\psi(x)$$

Estados estacionários

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

Estados estacionários

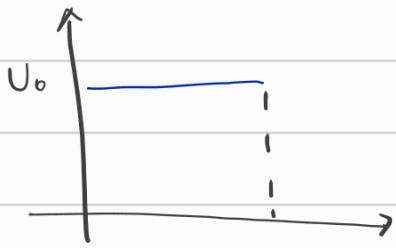
$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Potencial constante

$$U(x) = U_0$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + U_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (U_0 - E) \psi(x) = 0$$

(#)

$$\psi''(x) - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

$$\begin{aligned}\psi(x) &= e^{rx} \\ \psi'(x) &= r e^{rx} \\ \psi''(x) &= r^2 e^{rx}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \cos(rx) \\ \psi'(x) &= -r \sin(rx) \\ \psi''(x) &= -r^2 \cos(rx)\end{aligned}$$

1) $\beta > 0$

Solução de (#) é

$$\psi(x) = c_1 e^{Kx} + c_2 e^{-Kx} \quad K = \sqrt{\beta}$$

2) $\beta < 0$

Solução de (#) é

$$\psi(x) = c_1 \cos(Kx) + c_2 \sin(Kx) \quad K = \sqrt{-\beta}$$

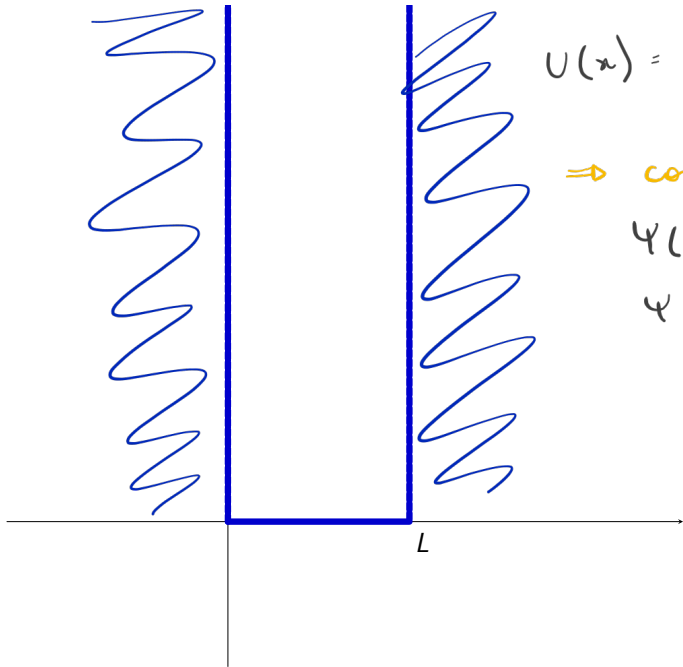
Partícula em um poço de potencial infinito

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ condições de contorno

$$\psi(0) = 0$$

$$\psi(L) = 0$$



Dentro do poço

B

$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2} (-E) \psi(x) = 0$$

1) $\beta < 0$

$$\psi(x) = c_1 e^{Kx} + c_2 e^{-Kx}$$

$$K = \sqrt{\beta}$$

$$\psi(0) = c_1 + c_2 = 0$$

$$\psi(L) = c_1 e^{KL} + c_2 e^{-KL} = 0$$



$$\Rightarrow c_1 = c_2 = 0 \Rightarrow \psi(x) = 0 \quad \text{NÃO SERVE!}$$

2) $\beta > 0 \Rightarrow E > 0$

$$\psi(x) = c_1 \cos(Kx) + c_2 \sin(Kx)$$

$$K = \sqrt{-\beta} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Condição de contorno

$$\psi(0) = c_1 = 0$$

$$\psi(L) = c_2 \sin(KL) = 0$$

$$\Rightarrow \sin(KL) = 0 \Rightarrow KL = n\pi \quad n \in \mathbb{N}$$

$$L \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = n\pi$$

$$\frac{L^2 2mE}{\hbar^2} = n^2 \pi^2$$

$$n \in \mathbb{N}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

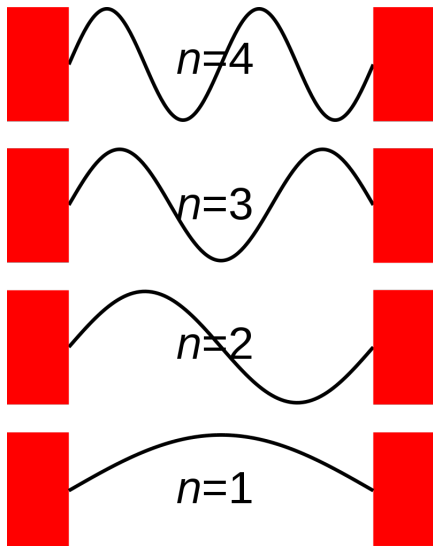
$$n \in \mathbb{N}$$

QUANTIZAÇÃO DA ENERGIA

$$\psi_n(x) = c_2 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$



A função de onda de uma partícula pode ser escrita como uma **superposição** dessas autofunções .

Partícula em uma caixa

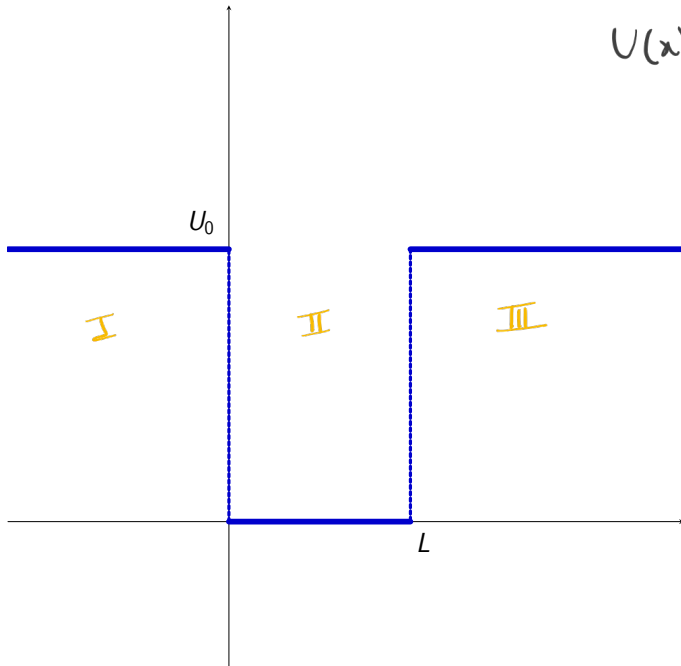
$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Partícula em um poço de potencial finito

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ U_0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$E < U_0$$



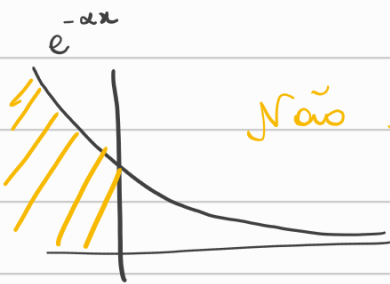
II) Entre $0 < x < L$

$$\psi(x) = c_1 \cos(Kx) + c_2 \sin(Kx)$$

$$K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

I) $\psi(x) = d_1 e^{\alpha x} + d_2 e^{-\alpha x}$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$



Não é normalizável!

III) $\psi(x) = f_1 e^{-\alpha x}$

Estados ligados: $E < U_0$

$$\psi(x) = \begin{cases} a_1 e^{\alpha x} & x \leq 0 \\ c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx) & 0 < x < L \\ b_2 e^{-\alpha x} & x > L \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Condições de contorno

ψ e ψ' contínuas
em 0 e L.

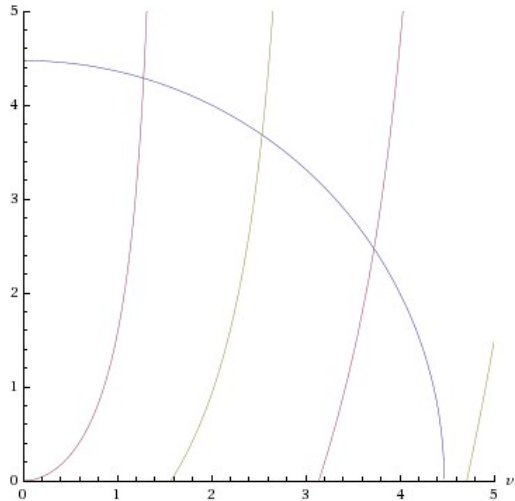
$$a_1 = c_1$$

$$\alpha a_1 = kc_2$$

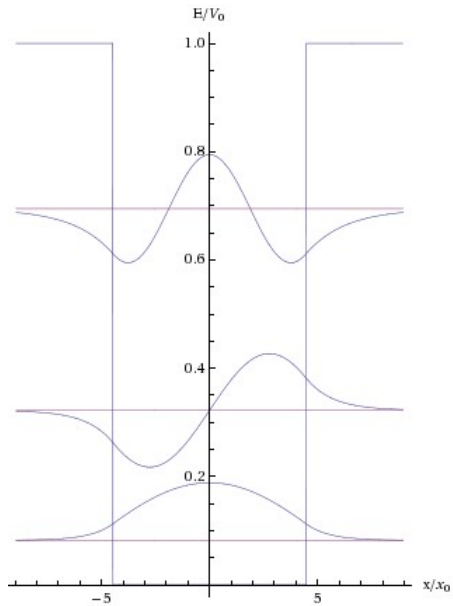
$$c_1 \cos(kL) + c_2 \sin(kL) = b_2 e^{-\alpha L}$$

$$-kc_1 \sin(kL) + kc_2 \cos(kL) = -\alpha b_2 e^{-\alpha L}$$

$$2\sqrt{(U_0 - E)E} = (2E - U_0) \tan\left(\sqrt{\frac{2mEL^2}{\hbar^2}}\right)$$



By Anna Fitzgerald - Own work, CC BY-SA 3.0,
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=7600246>



By Annafitzgerald - Own work, CC BY-SA 3.0,
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=7600246>

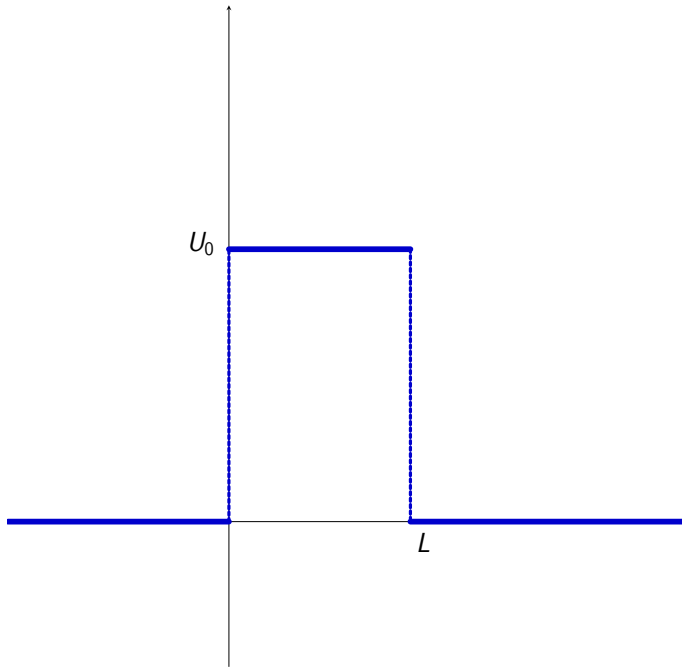
Comparação com o caso clássico

Uma partícula clássica com energia $E < U_0$ está confinada à região $0 < x < L$.

Se a partícula é quântica, existe uma probabilidade de encontrá-la fora da região $0 < x < L$.

Esse comportamento é uma consequência de descrevermos o comportamento da partícula através de uma **onda**.

Barreira de potencial



Estados ligados: $E < U_0$

$$\psi(x) = \begin{cases} a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx} & x \leq 0 \\ b_1 e^{\alpha x} + b_2 e^{-\alpha x} & 0 < x < L \\ c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} & x > L \end{cases}$$

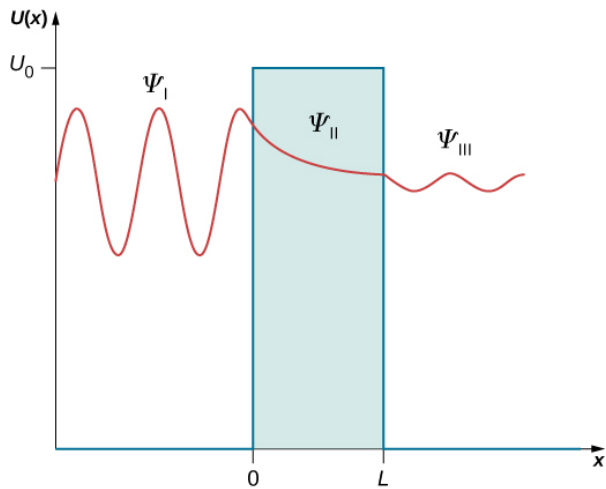
$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Condições de contorno

Continuidade de ψ e ψ' em $x = 0$ e $x = L$.

Apenas alguns valores de E são permitidos. **A energia do sistema é quantizada.**



Comparação com o caso clássico

Uma partícula clássica com energia $E < U_0$ está confinada à região $x < 0$ ou $x > L$.

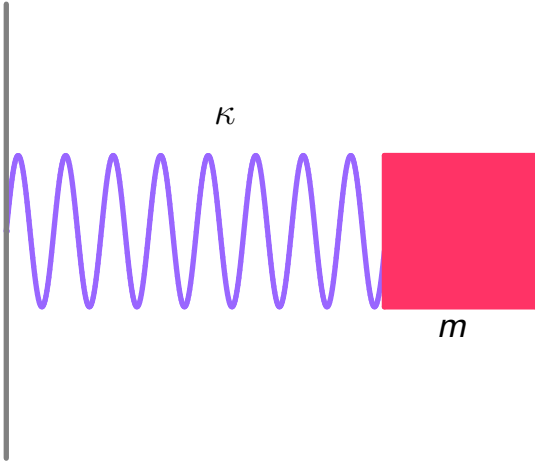
Se a partícula é quântica, existe uma probabilidade de encontrá-la na região $0 < x < L$.

Aplicação

Microscópio de tunelamento.

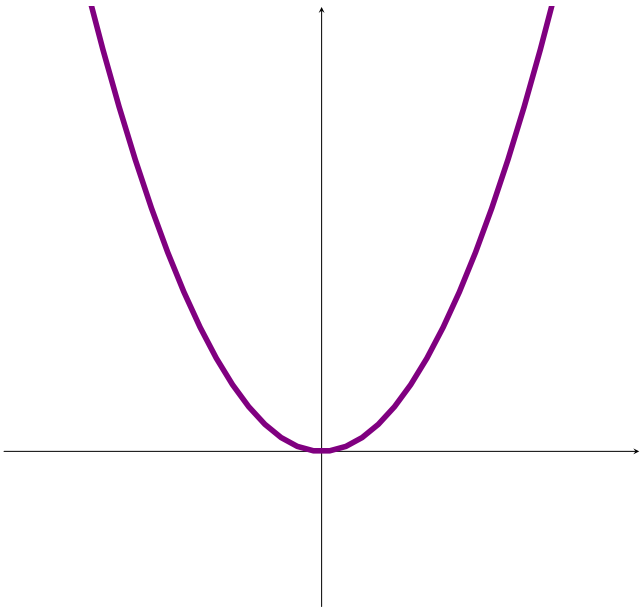
Oscilador harmônico

Oscilador harmônico clássico



$$F = -\kappa x$$

$$U(x) = \frac{\kappa x^2}{2}$$

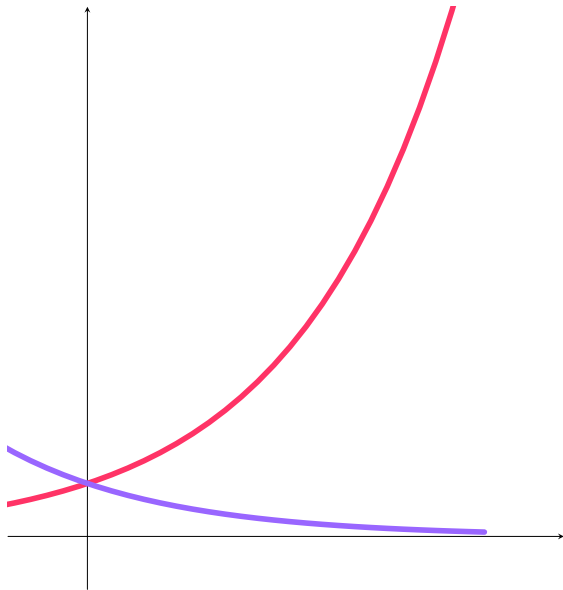


Oscilador harmônico quântico

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{\kappa x^2}{2} \psi(x) = E \psi(x)$$

Condições de contorno

A função de onda precisa ser normalizável.

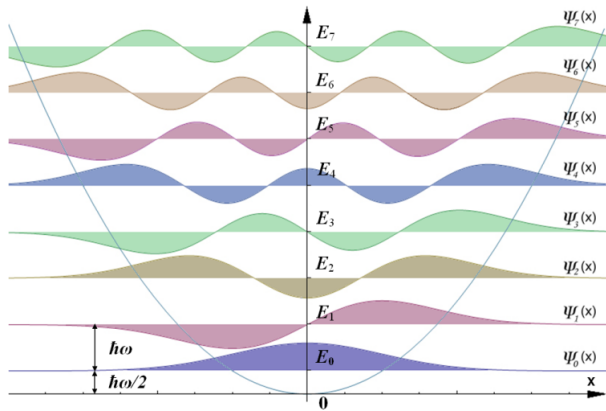


Essa condição só é satisfeita para alguns valores de E . **A energia do sistema é quantizada.**

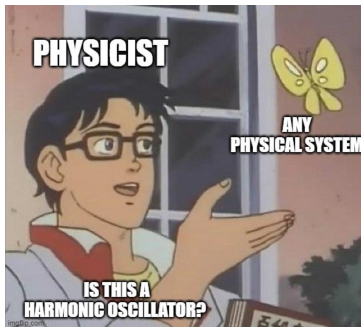
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{\kappa}{m}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

As funções de onda correspondentes são proporcionais a **funções de Hermite**:

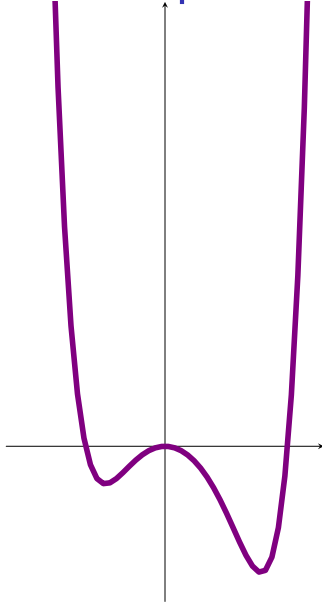
$$\psi_n(x) = C p_n(x) e^{\frac{-\sqrt{m\kappa}x^2}{2\hbar}}.$$

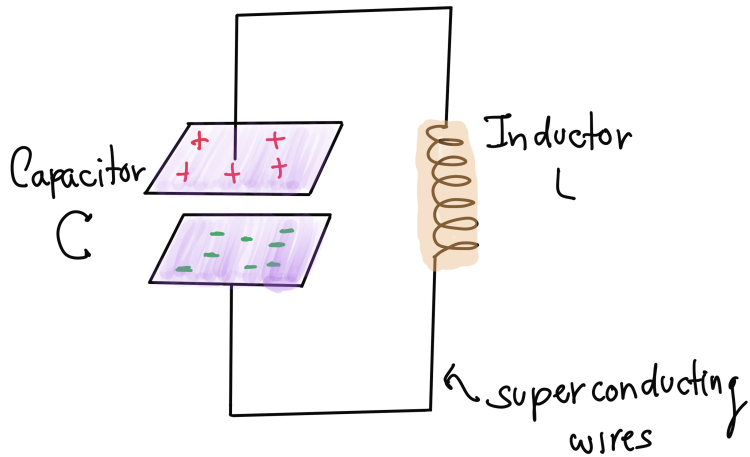


O oscilador harmônico quântico possui inúmeras aplicações .

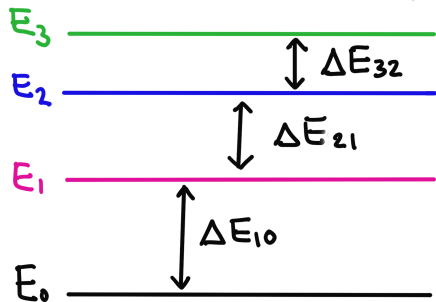


Aproximação de potenciais perto de um mínimo





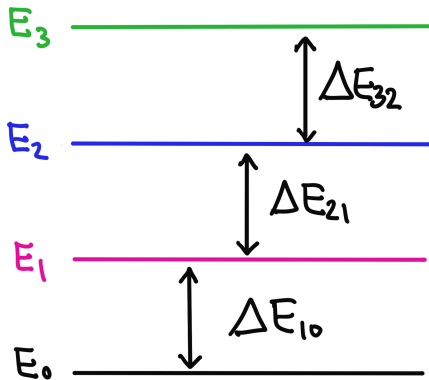
Atomic energy levels



$$\Delta E_{10} \neq \Delta E_{21} \neq \Delta E_{32}$$

(non-uniform)

LC circuit energy levels



$$\Delta E_{10} = \Delta E_{21} = \Delta E_{32}$$

(uniform)

