F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022

22/08/2022

Aula 2

Aula passada

Início do séc. XX: Inconsistências entre a física clássica e os experimentos (radiação de corpo negro, efeito fotoelétrico, efeito Compton, teoria atômica de Bohr, entre outros) levaram à postulação de um dualidade onda-partícula, tanto da luz quanto da matéria.

$$\underbrace{E}_{} = \overbrace{h\nu = \hbar\omega}^{\text{Propriedades de ondas}}$$

$$\underbrace{p}_{\text{Propriedades de partículas}} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

$$\boxed{\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ p &= \frac{h}{\lambda} = \hbar k \end{aligned}}$$

$\omega = 2\pi\nu$

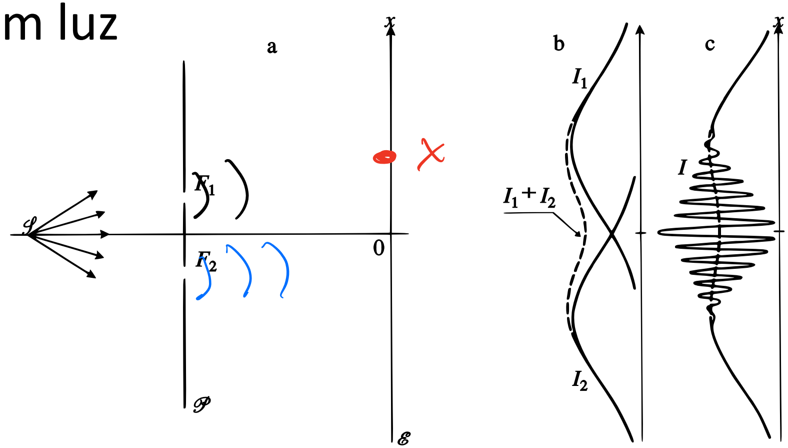
$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\boxed{h = 6,63 \times 10^{-34}\ \text{J.s}}$$

A dualidade onda-partícula

Experimento de dupla fenda com luz

$$I \propto |E(x)|^2$$



INTENSIDADE $I \propto |E|^2$

$E_1(x)$ POR F_1

$E_2(x)$ POR F_2

$I_1 \propto |E_1(x)|^2$

$I_2 \propto |E_2(x)|^2$

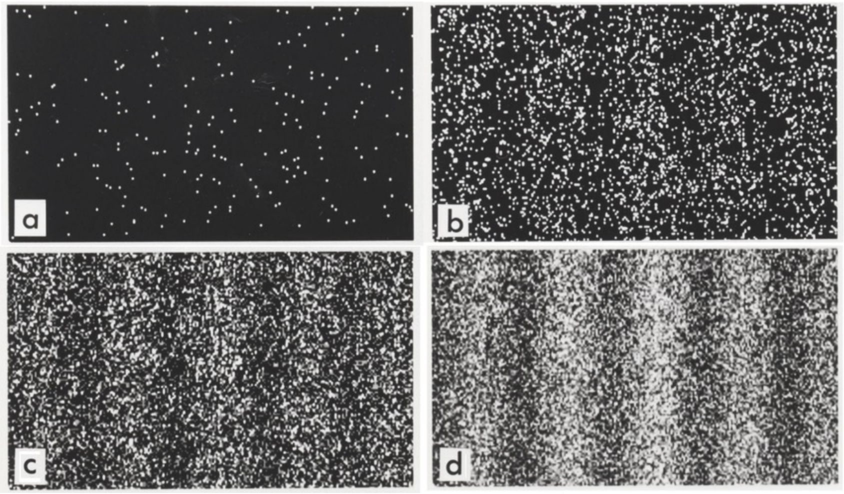
$E(x) = E_1(x) + E_2(x)$

$$I \propto |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 = \underbrace{|E_1(x)|^2}_{I_1} + \underbrace{|E_2(x)|^2}_{I_2} + \underbrace{2\,\mathrm{Re}\left[E_1^*(x)\,E_2(x)\right]}_{\text{FRANJAS DE INTERFERÊNCIA}}$$

Baixas intensidades: fóton a fóton

Em baixas intensidades, o padrão se forma fóton a fóton. É impossível prever onde cada fóton cairá.

Se tentarmos descobrir por qual fenda cada fóton passou, o padrão de interferência é destruído. Não há sentido no conceito de trajetória.



a) Complementaridade onda-partícula.
b) Ausência de trajetórias.
c) Descrição puramente probabilística.
d) Processos de detecção (medida) perturbam de maneira fundamental o sistema.
e) Vale não só pra luz: elétrons, neutrons, átomos, moléculas.

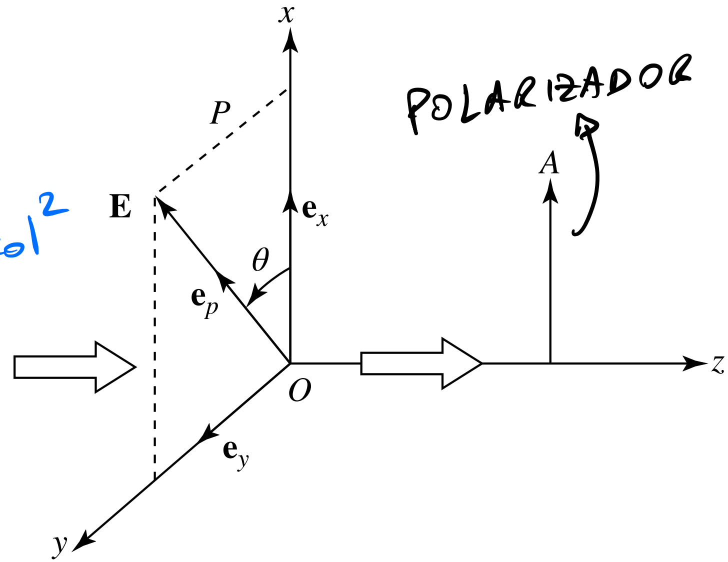
Princípio da decomposição espectral

Podemos aprender bastante com um experimento de polarização de luz monocromática.

Análise clássica:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = E_0 \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{p}} e^{i(kz-\omega t)} \rightarrow I_0 \propto |E_0|^2$$

$$\hat{e}_p = \cos\theta\, \hat{e}_x + \sin\theta\, \hat{e}_y$$



APÓS O POLARIZADOR:

$$\vec{E}'(\vec{r},t) = E_0 \cos\theta\, \hat{e}_x\, e^{i(kz-\omega t)}$$

INTENSIDADE MEDIDA EM A É: $I \propto |\vec{E}'(\vec{r},t)|^2 = \cos^2\theta\, |E_0|^2$

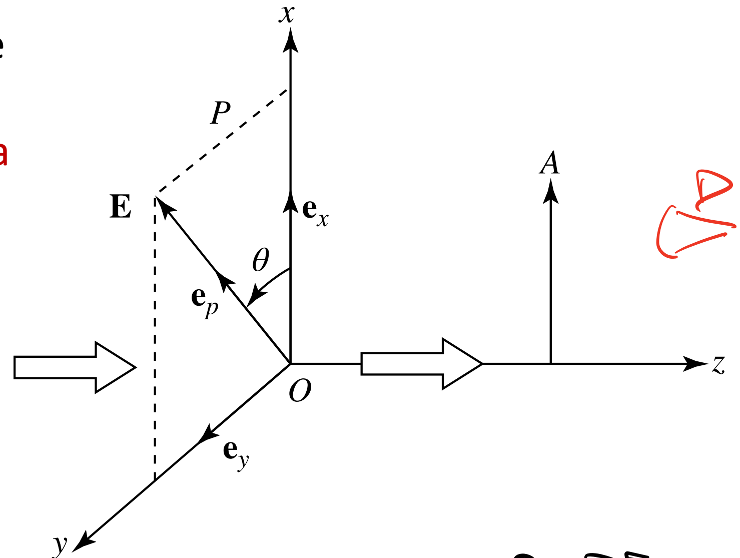
$$\boxed{I = I_0 \cos^2\theta}$$

LEI DE MALUS

Princípio de decomposição espectral

Análise quântica: intensidade tão baixa, que os fótons incidem "um a um".

- Polarizador A: o fóton incidente ou passa inteiro ou não passa (não há "frações de fótons").
- Detector (ideal) após o polarizador A: registra todos os fótons que passaram.



a) SE $\theta = 0$: $\hat{e}_p = \hat{e}_x$ TODOS OS FÓTONS PASSAM POR A E SÃO POSTERIORMENTE DETECTADOS.

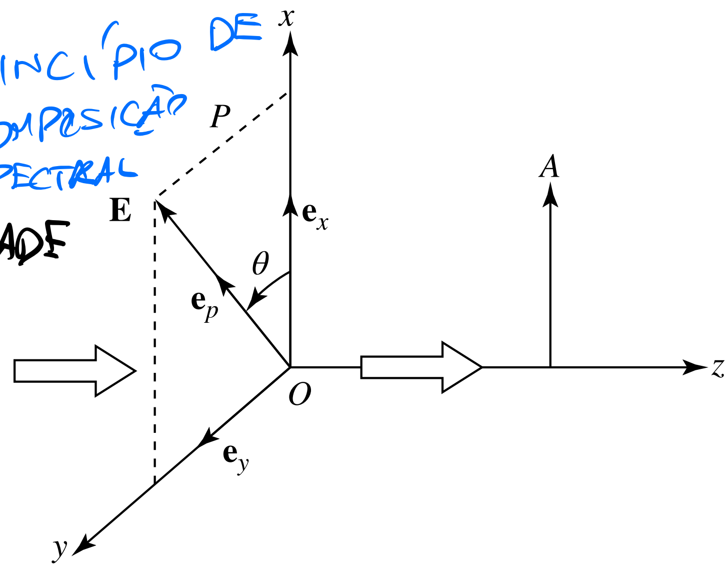
b) SE $\theta = \frac{\pi}{2}$: $\hat{e}_p = \hat{e}_y$ NENHUM FÓTON PASSA POR A E, LOGO, NENHUM É DETECTADO EM D

AS DIREÇÕES $\hat{e}_x$ E $\hat{e}_y$ SÃO CHAMADAS AUTO-ESTADOS DE POLARIZAÇÃO

Princípio de decomposição espectral

c) SE $\theta \neq 0$ E $\theta = \frac{\pi}{2}$:

$\hat{e}_p = \cos\theta \, \hat{e}_x + \sin\theta \, \hat{e}_y$ → PRINCÍPIO DE DECOMPOSIÇÃO ESPECTRAL



ELE PASSA COM PROBABILIDADE

$$P_1 = \cos^2\theta$$

$$P_0 = 1 - P_1 = \sin^2\theta$$

PROBABILÍSTICO !

OS AUTO-ESTADOS DE POLARIZAÇÃO DEPENDEM DA MEDIDA, OU SEJA, DA DIREÇÃO DO EIXO DE A

NUM NÚMERO GRANDE N DE EVENTOS ($N \gg 1$) (CASO CLÁSSICO), NA MÉDIA, PASSAM $N \cos^2\theta$ FÓTONS.

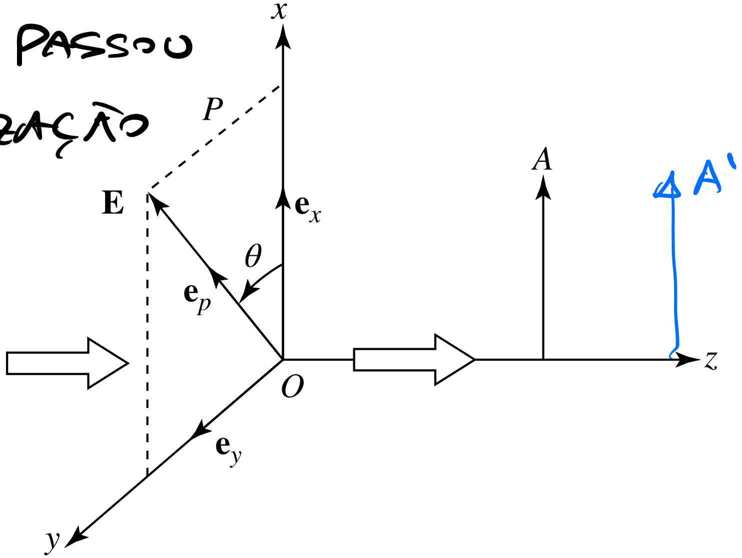
⇒ RECUPERAMOS MALUS

Princípio de decomposição espectral

d) APÓS $\underline{A}$, SE O FÓTON PASSOU SEU NOVO ESTADO DE POLARIZAÇÃO

E' : $\hat{e}_p' = \hat{e}_x$

SE O FÓTON PASSAR POR $\underline{A}$ PASSARÁ TAMBÉM POR A'



Resumo

a) Se o estado do fóton é um auto-estado do aparato medidor ($\mathbf{e}_x$ ou $\mathbf{e}_y$) → resultados determinísticos.
b) Se o estado for uma superposição de auto-estados → só se podem descrever os resultados probabilisticamente.
c) O ato de medir modifica o estado do sistema após a medida.

A função de onda e sua interpretação

POR ANALOGIA ÀS ONDAS E.M., SCHRÖDINGER POSTULOU A EXISTÊNCIA DE UM CAMPO $\psi(\vec{r},t) \in \mathbb{C}$ (FUNÇÃO DE ONDA) DE TAL FORMA QUE:

$$dP(\vec{r},t) = C|\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r$$

$\Rightarrow$ A PROBABILIDADE DE SE ENCONTRAR A PARTÍCULA NUM VOLUME $d^3r = dx\,dy\,dz$ EM TORNO DE $\vec{r}$ NO INSTANTE $\underline{t}$ (MAX BORN)

$$\int dP(\vec{r},t) = \int C|\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$$

TODO ESPAÇO

PROBABILIDADE DA PARTÍCULA ESTAR EM ALGUM LUGAR

$$\Rightarrow C = \frac{1}{\int |\psi|^2 d^3r}$$

Interferência

SE $\psi(\vec{r},t) = \psi_1(\vec{r},t) + \psi_2(\vec{r},t)$

$$\Rightarrow \frac{dP(\vec{r},t)}{d^3r} = |\psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi_1(\vec{r},t) + \psi_2(\vec{r},t)|^2$$

$$= |\psi_1(\vec{r},t)|^2 + |\psi_2(\vec{r},t)|^2 + \underbrace{2\,\mathrm{Re}\left[\psi_1^*(\vec{r},t)\,\psi_2(\vec{r},t)\right]}_{\text{TERMOS DE INTERFERÊNCIA}}$$

O princípio de decomposição espectral

SEJA UMA QUANTIDADE FÍSICA $\underline{A}$ (ENERGIA, POR EXEMPLO)

a) SÓ PODEM SER MEDIDOS CERTOS VALORES DE $\underline{A}$

$a_1, a_2, a_3, \ldots$ (AUTO-VALORES DE $\underline{A}$)

b) A CADA AUTO-VALOR ESTÁ ASSOCIADO UM AUTO-ESTADO: $\phi_i(\vec{r})$ $i = 1, 2, 3, \ldots$

$$a_1 \rightarrow \phi_1(\vec{r})$$
$$a_2 \rightarrow \phi_2(\vec{r})$$
$$\vdots$$

(c) SE $\psi(\vec{r}, t_0) = \phi_i(\vec{r}) \Rightarrow$ MEDIDA DE $\underline{A}$ DARÁ $\underline{a_i}$ COM CERTEZA

d) SE, POR OUTRO LADO, :

$$\psi(\vec{r},t_0) = \sum_i c_i \phi_i(\vec{r})$$

$$\Rightarrow P(a_i) = \frac{|c_i|^2}{\sum_i |c_i|^2}$$ PROBABILÍSTICO

SE $\sum_i |c_i|^2 = 1 \Rightarrow P(a_i) = |c_i|^2$

e) APÓS A MEDIDA DE $\underline{A}$, SE O RESULTADO TIVER SIDO $\underline{a_i}$, O ESTADO $\psi(\vec{r},t_0^+)$ PASSA A SER :

$$\psi(\vec{r},t_0^+) = \phi_i(\vec{r})$$

(COLAPSO DA FUNÇÃO DE ONDA)

A equação de Schrödinger

EINSTEIN–PLANCK: $E = h\nu = \hbar\omega$

DE BROGLIE: $p = \dfrac{h}{\lambda} = \hbar k$

$\to$ 3D: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ $\quad |\vec{k}| = \dfrac{2\pi}{\lambda}$

PARTÍCULA LIVRE É "NATURAL" CHUTAR:

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} = \psi_0 e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar}$$

PARTÍCULA LIVRE NÃO-RELATIVÍSTICA:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{p^2}{2m}t)/\hbar}$$

EQ. DE ONDA E.M.

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)E(\vec{r},t) = 0$$

$$\Rightarrow \omega = ck \Rightarrow c = \lambda\nu$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = i\cancel{\hbar}\left[-\frac{i}{\cancel{\hbar}}\left(\frac{p^2}{2m}\right)\psi_0 e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-\frac{p^2}{2m}t)/\hbar}\right]$$

$$= \frac{p^2}{2m}\psi(\vec{r},t)$$

$$\frac{1}{2m}\underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)}_{\vec{p}}\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)\psi(\vec{r},t)$$

$$= \frac{1}{2m}(-\hbar^2)\nabla^2\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_0 e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-\frac{p^2}{2m}t)/\hbar}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left[\left(\frac{ip_x}{\hbar}\right)\left(\frac{ip_x}{\hbar}\right)+\left(\frac{ip_y}{\hbar}\right)\left(\frac{ip_y}{\hbar}\right)+\left(\frac{ip_z}{\hbar}\right)\left(\frac{ip_z}{\hbar}\right)\right]}_{-\vec{p}^2}\psi(\vec{r},t)$$

$$= \frac{\vec{p}^2}{2m}\psi(\vec{r},t)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} e^{i(p_x x + p_y y + p_z z)/\hbar}$$

$$= i\frac{p_x}{\hbar} e^{i(\quad)/\hbar}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \left(i\frac{p_x}{\hbar}\right)\left(\frac{i p_x}{\hbar}\right) e^{i(\quad)/\hbar}$$

$$= -\frac{p_x^2}{\hbar^2}$$

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

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)}$$

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

a) A EQUAÇÃO É LINEAR. SOMA DE SOLUÇÕES É SOLUÇÃO.

b) A EQUAÇÃO É DE 1ª ORDEM NO TEMPO.

$\Rightarrow$ DADA $\psi(\vec{r},t_0)$, RESOLVER A EQ. DE SCH. NOS DÁ $\psi(\vec{r},t)$ PARA TODO $\underline{t}$