31/07/12

Introdução à Mecânica Quântica - Prof. André Malvezzi

Livro-texto: "Quantum Mechanics"
Volume 1

Autores:
- Claude Cohen-Tannoudji
- Bernard Diu
- Franck Laloë

Conteúdo:

I. Ondas e partículas: Introdução às ideias fundamentais da Mecânica Quântica.
- I.1. Dualidade Onda-Partícula
- I.2. Eq. de Schrödinger
- I.3. Pacotes de Onda e Princípio da Incerteza

II. Ferramentas Matemáticas da Mecânica Quântica
- II.1. Notação de Dirac: espaço de estados, representações e observáveis.

III. Postulados da Mecânica Quântica

IV. Sistemas de spin 1/2 e dois níveis.

Avaliação:

$M_{Final} = 0{,}8 \cdot M_{provas} + 0{,}2 \cdot M_{trabalhos}$

→ trabalhos: exercícios das listas

→ $M_{provas}: \dfrac{P_1 + P_2}{2}$

31/07/12

I. Ondas e Partículas: Introdução às ideias fundamentais da Mecânica Quântica.

A. Ondas eletromagnéticas e fótons.

A.1. O Quantum de luz e as relações de Planck-Einstein.

Luz: onda (Mec. Clássica) × partícula (Newton, Einstein)

propagação — dualidade — interação com a matéria

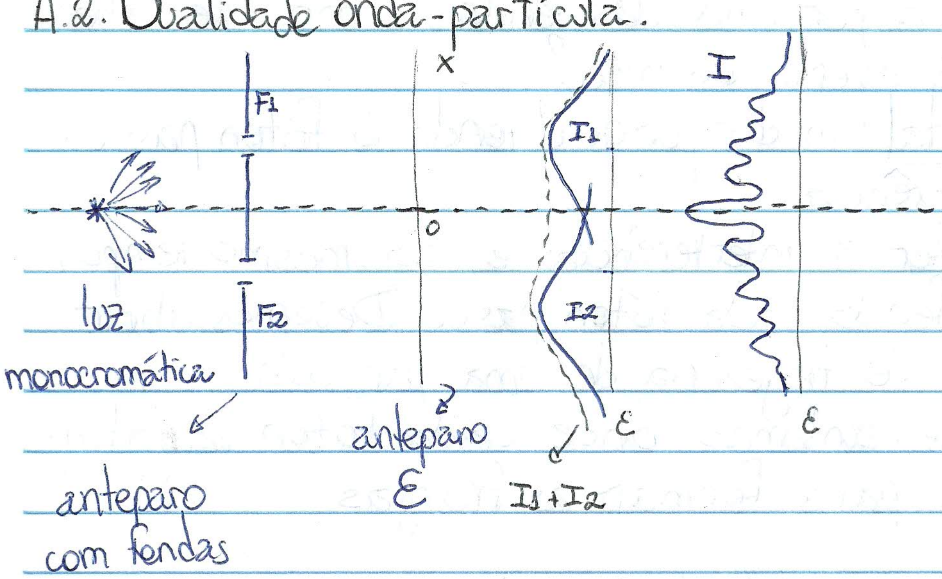
Parâmetros de partícula: energia (E) e momentum ($\vec{p}$).
Parâmetros de onda: frequência angular (ω) $\rightarrow \omega = 2\pi\nu$
vetor de onda ($\vec{k}$) $\rightarrow |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\left.\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} &= \hbar . \vec{k} \end{aligned}\right\} \text{Relações de Planck-Einstein}$$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ $\qquad h = 6{,}62 \times 10^{-34}\ J.s$

Momentum e energia são conservados em cada processo elementar de interação com a matéria.

A.2. Dualidade onda-partícula.



O campo elétrico total na posição x do anteparo é:

$E(x) = E_1(x) + E_2(x)$ → (descrição classica de onda)

$I(x) \propto |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 = |E_1(x)|^2 + |E_2(x)|^2 + \text{termos cruzados (interferência)} \neq$

$\neq I_1 + I_2$

Isso é inconsistente com a descrição de partícula!

Interação entre fótons?

Reduzimos a intensidade da luz de modo que um fóton atinge o anteparo de cada vez, eliminando a interação entre fótons.

(i) As franjas de interferência continuam existindo após uma longa exposição.

(ii) Cada fóton produz um impacto localizado no anteparo.

31/07/12

Se o fóton passa por uma das fendas, como ele sabe se a outra está aberta ou não?

Fato experimental: medir por qual fenda o fóton passa destrói a interferência.

É impossível obter a interferência e, ao mesmo tempo, saber por qual fenda cada fóton passa. Devemos abrir mão do conceito de trajetória de uma partícula.

Não sabemos, de antemão onde cada fóton vai atingir o anteparo para formar as franjas.

Conceito ortodoxo de dualidade onda partícula:

(i) Os aspectos de onda e partícula da luz são inseparáveis, onde a onda nos permite calcular a probabilidade de manifestação da partícula.

(ii) Predições são probabilísticas.

(iii) $\vec{E}(\vec{r},t) \Rightarrow$ (campo elétrico total - solução das eq. de Maxwell) caracteriza o estado do fóton e é interpretado como a amplitude de probabilidades de o fóton aparecer no ponto $\vec{r}$ e no instante t. A probabilidade correspondente é: $I \propto |E(\vec{r},t)|^2$

I.A.3 - O princípio da decomposição espectral

Experimento: Onda de luz monocromática e plana passa por um analisador A, que transmite totalmente a luz polarizada em x e absorve totalmente em y.

Descrição clássica: Inicialmente temos, para um feixe suficientemente intenso:

$$I = |E_0|^2 \quad e \quad \vec{E}(\vec{r},t) = E_0 . \hat{e}_p . e^{i(kz - \omega t)}$$

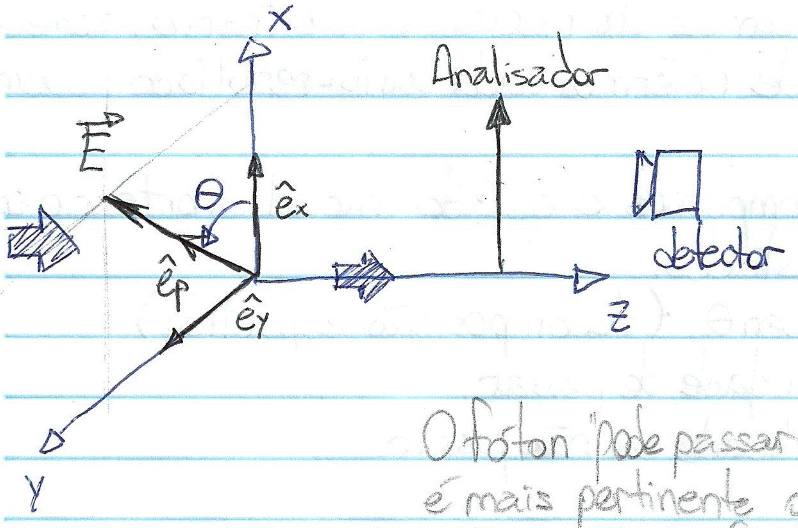
Após o analisador:

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

Com: $I' = |E_0'|^2$

Lei de Malus: $I' = I . \cos^2\theta$ *

* intensidade da luz que "passa" pelo detector no caso clássico!



Descrição de onda plana?

O fóton "pode passar ou não" porque não é mais pertinente o conceito de trajetória (dupla-fenda)!

Para observarmos o comportamento quântico, diminuímos a intensidade I até que apenas um fóton de cada vez atinja o analisador. Não podemos prever com certeza se um fóton incidente passará ou não pelo analisador. Após um grande número N de fótons devemos ter $N \cos^2\theta$ no detector.

07/08/12

(i) Somente dois resultados são possíveis: o foton passa ou não-passa. Chamamos essas duas possibilidades de "auto-resultados" (eigen results).
↳ apropriado, próprio.
Dizemos que há uma quantização dos resultados das medidas, em contraste com o caso clássico, onde a intensidade transmitida pode variar continuamente com o ângulo θ.

(ii) A cada auto-resultado corresponde um auto-estado*:

$\hat{e}_p = \hat{e}_x$ com certeza passa

* Estados em que o caráter probabilístico desaparece!

$\hat{e}_p = \hat{e}_y$ com certeza não passa

(iii) Quando o estado antes da medida é arbitrário, somente as possibilidades de obtermos cada auto-resultado podem ser previstas.
Para obtê-las, decompomos o estado inicial arbitrário em termos dos auto-estados:

$\hat{e}_p = \hat{e}_x . \cos\theta + \hat{e}_y \operatorname{sen}\theta$ (decomposição espectral)

→ $\cos^2\theta$ = probabilidade de passar

→ $\operatorname{sen}^2\theta$ = probabilidade de não passar

(quadrados dos coeficientes dos respectivos auto-estados)

$\cos^2\theta + \operatorname{sen}^2\theta = 1$ (probabilidade total)

"Princípio da decomposição espectral"!

(iv) Após a medida (passar pelo analisador) o estado do fóton é sempre $\hat{e}_x$. A medida perturbou fundamentalmente o estado inicial do sistema.

B. PARTÍCULAS MATERIAIS E ONDAS DE MATÉRIA

B.1. - As relações de de Broglie

A quantização dos níveis de energia E_i do átomo explicaram os espectros atômicos:

$$h\nu_{ij} = |E_i - E_j| \Longrightarrow \text{"cor das raias"}$$

(Bohr - Sommerfeld e Franck - Hertz)

Mas a origem das regras de quantização só foi demonstrada à partir da hipótese de de Broglie: partículas materiais possuem um aspecto de onda.

$$\vec{p} = \hbar.\vec{K} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{K}|} = \frac{h}{|\vec{P}|} \quad \text{(Relação de de Broglie)}$$

Confirmado experimentalmente pela difração de elétrons (microscopia eletrônica). Como h é muito pequena, o comportamento ondulatório não aparece facilmente na escala macroscópica.

I.B.3. Funções de Onda e a Eq. de Schrödinger

De acordo com as hipóteses de de Broglie, vamos utilizar as ideias introduzidas para fótons para todas as partículas materiais.

* No lugar do conceito clássico de trajetória, o estado quântico de uma partícula é definido pela função de onda $\Psi(\vec{r},t)$, a qual é complexa e contém toda informação possível de se obter sobre a partícula.

* $\Psi(\vec{r},t)$ é interpretada como a amplitude de probabilidade de a partícula estar na posição $\vec{r}$ no instante t, em analogia com $\vec{E}(\vec{r},t)$ para o fóton.

$dP(\vec{r},t) = C \cdot |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r \Rightarrow$ probabilidade de encontrar a partícula no instante t, no volume $d^3r = dx\,dy\,dz$ em torno do ponto $\vec{r}$. C é uma constante de normalização.

*auto-valor: energia
auto-resultado: orbital

* O princípio da decomposição espectral: o resultado da medida de uma quantidade física qualquer deve pertencer ao conjunto de auto-resultados $\{a_i\}$ (analogia com um fóton passar ou não pelo analisador). Para cada auto-resultado (auto-valor) a, temos um auto-estado correspondente, dado pela auto-função $\Psi_a(\vec{r})$*.

* Para qualquer $\Psi(\vec{r},t)$ a probabilidade P_A de encontrar um auto-valor a para uma medida no instante t_0 é obtida pela decomposição de $\Psi(\vec{r},t)$ em termos das auto funções. Ou seja:

08/08/12

$\hat{e}_\rho = \cos\theta \cdot \hat{e}_x + \text{sen}\,\theta\, \hat{e}_y$

$$\psi(\vec{r},t_0) = \sum_a C_a \psi_a(\vec{r}), \qquad P_a = \frac{|C_a|^2}{\sum_a |C_a|^2},$$

(auto-estados)?

normalização de $\psi(\vec{r},t)$

onde o denominador garante que $\sum_a P_a = 1$

Se a medida levar ao auto-valor $\underline{a}$, a função de onda da partícula logo após a medida será:

$$\psi(\vec{r},t_0) = \psi_a(\vec{r})$$

* A evolução de $\psi(\vec{r},t)$ é dada pela equação de Schrödinger, que para uma partícula de massa m sujeita a um potencial $V(\vec{r},t)$, tem a forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t).\psi(\vec{r},t), \Rightarrow \text{análoga}$$

$$\vec{F} = m.\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$$

onde: Δ(laplaciano) $= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Características da Eq. de Schrödinger:

* equação linear (só termos em $\psi(\vec{r},t)$).
* equação homogênea (não tem termos independentes) $\therefore$ ψ pode ser expressa pelo princípio da superposição.
* primeira ordem no tempo $\Rightarrow$ conhecendo $\psi(\vec{r},t)$ para t_0 podemos determinar para todo $\underline{t}$. Portanto, a evolução temporal é determinística. $\rightarrow$ Enquanto não é medida!

Comentarios:

(i) Dado: $dP(\vec{r},t) = C.|\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r$, devemos ter: $\int dP(\vec{r},t) = 1$

Logo: $\frac{1}{C} = \int |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r \Rightarrow$ precisa ser normalizada antes!

Ca

08/08/12

Portanto $\Psi(\vec{r},t)$ precisa ser quadrado integrável!

(ii) Descrição do estado da partícula no instante t:
* classicamente: $x, y, z, v_x, v_y, v_z \Rightarrow$ 6 parâmetros (trajetória)
* quanticamente: $\Psi(\vec{r},t) \Rightarrow$ infinitos parâmetros (onda de matéria).

(iii) Na Mecânica Quântica NÃO Relativística não há criação ou destruição de partículas.

I.C. Descrição Quântica de uma Partícula - Pacotes de Ondas

I.C.1. Partícula livre

Seja uma partícula livre ($V(\vec{r},t)=0$), ou seja, ela não está sujeita a nenhuma força ($\vec{F} = -\nabla V$). A equação de Schrödinger fica:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r},t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r},t) \qquad (1)$$

Uma solução possível para (1) é:

$$\psi(\vec{r},t) = A \cdot e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \qquad (2)$$

Com $\omega = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Usando as relações de deBroglie:

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$ e $E = \hbar\omega$, podemos reescrever a equação anterior:

$$\omega = \frac{p^2}{\hbar 2m} \Rightarrow \hbar\omega = E = \frac{p^2}{2m},$$

recuperando assim o resultado da Mecânica Clássica para a energia de uma partícula livre.

Temos ainda que:

14/08/12

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |A|^2$$

Isso significa que a onda plana $Ae^{(i\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ representa uma partícula cuja probabilidade de presença em qualquer lugar do espaço é sempre a mesma, ou seja, é uniforme.

A equação (2) acima é uma solução particular da eq. de Schrödinger mas não representa uma função de onda física pois não é quadrado integrável. Uma solução é tomarmos a superposição de ondas planas que, por sua vez, satisfaz a condição de quadrado integrável.

Assim, uma solução geral da eq. (1) pode ser expressa como uma combinação linear de ondas planas que satisfazem a condição $\omega(k) = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k)\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\, d^3k$$, onde $g(k)$ é uma função complexa e regular, ou seja, admite diferenciação.

A solução anterior é chamada de um <u>pacote de ondas</u>.

Vamos tratar aqui em geral com pacotes de ondas unidimensionais, obtidos a partir da superposição de ondas planas propagando-se paralelas ao eixo x.

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\, e^{i(k\cdot x-\omega t)}\, dk$$

Inicialmente, vamos estudar a forma do pacote de onda num dado instante, que podemos escolher com a origem do tempo (t=0):

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(K)\, e^{iKx}\, dK$$

Nesse caso g(K) é simplesmente a Transformada de Fourier de $\psi(x,0)$:

$$g(K) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x,0)\, e^{-iKx}\, dx$$

Assim, a equação acima para $\psi(x,0)$ é válida não apenas para o caso de uma partícula livre mas para qualquer potencial $V(\vec{r},t)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V(x,t)\cdot\psi$$

$$i\hbar(-i\omega)\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}(ik)^2\psi + V(x,t)\cdot\psi$$