CF372-Mecânica Quântica I

T1 - Ondas e partículas. Introdução às ideias fundamentais da Mecânica Quântica

Márcio H. F. Bettega

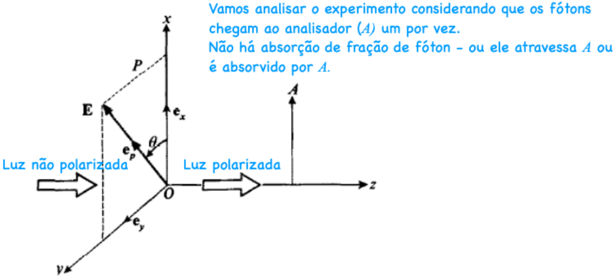
Departamento de Física

Universidade Federal do Paraná

bettega@fisica.ufpr.br

Introdução.

- Vamos discutir o problema da polarização da luz, ilustrado na figura abaixo, considerando que a fonte emite um fóton por vez.



onde $\mathbf{e}_p = \cos\theta\,\mathbf{e}_x + \sin\theta\,\mathbf{e}_y$.

- Luz linearmente polarizada na direção $\mathbf{e}_p$:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = E_0\mathbf{e}_p \exp[i(kz-\omega t)]$$

- Luz linearmente polarizada na direção $\mathbf{e}_x$:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r},t) = E_0'\mathbf{e}_x \exp[i(kz-\omega t)]$$

- Lei de Malus: $I' \propto |E_0'|^2,\ I \propto |E_0|^2 \to I' = I\cos^2\theta$

Introdução

- Ideias principais:

1. quantização (resultados próprios ou autovalores):
   -o fóton atravessa A
   -o fóton é absorvido por A

2. autoestados (autovetores):

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_p = \mathbf{e}_x &\rightarrow \text{atravessa } A \\ \mathbf{e}_p = \mathbf{e}_y &\rightarrow \text{absorvido por } A\end{aligned}$$

3. antes da medida: $\mathbf{e}_p = \cos\theta\, \mathbf{e}_x + \sin\theta\, \mathbf{e}_y$

$$\begin{aligned}&\text{atravessa } A \rightarrow \mathbf{e}_x \ (\text{probabilidade } = \cos^2\theta) \\ &\text{absorvido por } A \rightarrow \mathbf{e}_y \ (\text{probabilidade } = \sin^2\theta)\end{aligned}$$

4. Após a medida ocorre uma mudança abrupta no estado de polarização do fóton (a medida perturba o sistema):
   -o fóton atravessa A: $\mathbf{e}_p \rightarrow \mathbf{e}_x$.
   -o fóton é absorvido por A: $\mathbf{e}_p \rightarrow \mathbf{e}_y$.

Partículas materiais e ondas de matéria.

- Relação de de Broglie: $\mathbf{p} = m\mathbf{v} \to \lambda = h/|\mathbf{p}|$. Desta forma:$E = \hbar\omega$, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ (valem para radiação e para matéria, o que muda é a relação de dispersão $\omega(k)$).
- Equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

  Condição inicial: $\psi(\mathbf{r},t_0)$.
- A função de onda $\psi(\mathbf{r},t)$ governa o movimento da partícula, e é uma amplitude de probabilidade de tal forma que $d\mathcal{P}(\mathbf{r},t) = c|\psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r$ (c é uma constante) fornece a probabilidade de encontrar a partícula, no instante de tempo t, com coordenadas entre x e $x+dx$, y e $y+dy$ e z e $z+dz$ (no elemento de volume d^3r em torno do ponto $\mathbf{r}$).
- No caso em que V é independente do tempo, ou seja, $V = V(\mathbf{r})$, podemos separar a equação de Schrödinger. Para isso, escrevemos $\psi(\mathbf{r},t) = \varphi(\mathbf{r})\chi(t)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\varphi(\mathbf{r})\chi(t) = i\hbar\frac{\partial[\varphi(\mathbf{r})\chi(t)]}{\partial t}$$

$$\chi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\varphi(\mathbf{r}) = i\hbar\varphi(\mathbf{r})\frac{d\chi(t)}{dt}$$

$$\div\varphi(\mathbf{r})\chi(t) \to \frac{1}{\varphi(\mathbf{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\varphi(\mathbf{r}) = i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt} = E$$

  onde E é uma constante de separação (igual à energia da partícula).

Partículas materiais e ondas de matéria.

- Desta forma obtemos duas equações:

$$i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt} = E \to \frac{d\chi(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\chi(t) \to \chi(t) = \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) = \exp(-i\omega t)$$

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]}_{H}\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \to H\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r})$$

onde H é o operador Hamiltoniano (representa a energia da partícula) e $H\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r})$ é a equação de Schrödinger independente do tempo (equação de autovalores) . Assim a função de onda fica:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right) = \varphi(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)$$

e a densidade de probabilidade fica:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\varphi(\mathbf{r})|^2$$

- A equação de Schrödinger independente do tempo pode ser escrita na forma $H\varphi_E(\mathbf{r}) = E\varphi_E(\mathbf{r})$, onde incluímos a dependência da autofunção em relação ao autovalor de energia E. Podemos generalizar esta discussão considerando uma equação de autovalores na forma $A\varphi_a(\mathbf{r}) = a\varphi_a(\mathbf{r})$, onde $\{\varphi_a(\mathbf{r})\}$ são autofunções (base) do operador A com autovalores a.

Partículas materiais e ondas de matéria.

- Para a base $\{\varphi_a(\mathbf{r})\}$ temos (definição de produto escalar):

$$(\varphi_a, \varphi_{a'}) = \int d^3r \varphi_a^*(\mathbf{r})\varphi_{a'}(\mathbf{r}) = \delta_{aa'}$$

- Podemos escrever a função de onda em termos da base $\{\varphi_a(\mathbf{r})\}$ como:

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_a c_a(t_0)\varphi_a(\mathbf{r}) \to \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_a c_a(t)\varphi_a(\mathbf{r})$$

$$P_a(t_0) = \frac{|c_a(t_0)|^2}{\sum_a |c_a(t_0)|^2}, \sum_a P_a(t_0) = 1 \to P_a(t) = \frac{|c_a(t)|^2}{\sum_a |c_a(t)|^2}, \sum_a P_a(t) = 1$$

onde usamos:

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r \left(\sum_a c_a(t)\varphi_a(\mathbf{r})\right)^* \left(\sum_{a'} c_{a'}(t)\varphi_{a'}(\mathbf{r})\right) =$$

$$= \sum_a \sum_{a'} c_a^*(t)c_{a'}(t) \int d^3r \varphi_a^*(\mathbf{r})\varphi_{a'}(\mathbf{r}) = \sum_a \sum_{a'} c_a^*(t)c_{a'}(t)\delta_{aa'} = \sum_a |c_a(t)|^2$$

$P_a(t_0)$ e $P_a(t)$ são as probabilidades de obter o autovalor a em uma medida de A em t_0 e t respectivamente. $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ e $\psi(\mathbf{r}, t)$ representam estados diferentes.

- Em uma medida de A temos:

$$\text{antes da medida de } A : \psi(\mathbf{r}, t_0) \xrightarrow{a} \text{depois da medida de } A : \varphi_a(\mathbf{r})$$

Partículas materiais e ondas de matéria.

- Ideias principais (em analogia à polarização do fóton):

1. $\psi(\mathbf{r}, t)$ (em geral é uma função complexa): descreve o estado da partícula, no sentido que contém toda a informação a respeito da partícula.
2. $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ é uma densidade de probabilidade ($\psi(\mathbf{r}, t)$ é uma amplitude de probabilidade) e $d\mathcal{P}(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ fornece a probabilidade de encontrar a partícula, no instante de tempo t, no elemento de volume d^3r em torno do ponto $\mathbf{r}$.
3. princípio da decomposição espectral ($A\varphi_a(\mathbf{r}) = a\varphi_a(\mathbf{r})$):
   -resultados (autovalores): $\{a\}$
   -autoestados (autofunções): $\{\varphi_a(\mathbf{r})\}$
   -$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \varphi_a(\mathbf{r}) \rightarrow a$ (se o estado do sistema corresponde a uma das autofunções de A, o resultado da medida de A é sempre igual ao autovalor associado à autofunção).

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_a c_a(t_0)\varphi_a(\mathbf{r}) \rightarrow P_a(t_0) = \frac{|c_a(t_0)|^2}{\sum_a |c_a(t_0)|^2}, \sum_a P_a(t_0) = 1$$

$$\text{antes da medida de } A : \psi(\mathbf{r}, t_0) \xrightarrow{a} \text{depois da medida de } A : \varphi_a(\mathbf{r})$$

4. equação de Schrödinger (partícula de massa m):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)\right]\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

   -$\psi(\mathbf{r}, t)$: função de quadrado integrável (normalização):

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_a c_a(t)\varphi_a(\mathbf{r}) \rightarrow \int d^3r|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \sum_a |c_a(t)|^2 = 1$$

Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- Vamos considerar o problema da partícula livre $V = 0$. A equação de Schrödinger é:

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

Separando as variáveis:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \varphi(\mathbf{r})\chi(t) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}),\ \chi(t) = \left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)$$

Escrevendo $\varphi(\mathbf{r}) = \alpha(x)\beta(y)\gamma(z)$ temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\alpha(x)}{dx^2} = E_x\alpha(x) \rightarrow \frac{d\alpha(x)}{dx^2} + k_x^2\alpha(x) = 0 \rightarrow \alpha(x)\exp(ik_x x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\beta(y)}{dy^2} = E_y\beta(y) \rightarrow \frac{d\beta(y)}{dy^2} + k_y^2\beta(y) = 0 \rightarrow \beta(y) = \exp(ik_y y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\gamma(z)}{dz^2} = E_z\gamma(z) \rightarrow \frac{d\gamma(z)}{dz^2} + k_z^2\gamma(z) = 0 \rightarrow \gamma(z) = \exp(ik_z z)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \exp(ik_x x)\exp(ik_y y)\exp(ik_z z) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$$

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2,\ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},\ \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\psi(\mathbf{r},t) = A\exp\left[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)\right], A = \text{constante} \rightarrow |\psi(\mathbf{r},t)|^2 = |A|^2$$

Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- As ondas planas $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)$ não são funções quadraticamente integráveis, mas podemos utilizar o princípio de superposição para construir um pacote de ondas $\psi(\mathbf{r},t)$ como:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t) = A\exp\left[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)\right] \rightarrow \psi(\mathbf{r},t) = \int d^3k\, g(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)$$

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3k\, g(\mathbf{k})\exp\left[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)\right],\ \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

  onde escolhemos $A = 1/(2\pi)^{3/2}$ (normalização de função delta).

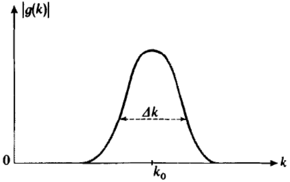
- Vamos simplificar o problema considerando apenas uma dimensão (x). Assim:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\, g(k)\exp\left[i(kx-\omega t)\right],\ \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

  Em $t=0$:

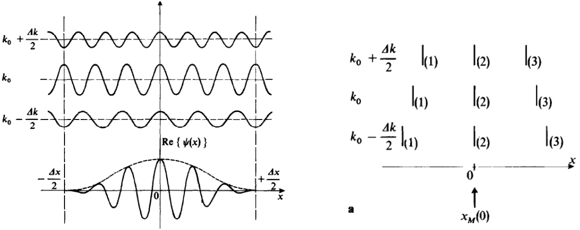
$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\, g(k)\exp\left[ikx\right] \rightarrow g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dx\, \psi(x,0)\exp\left[-ikx\right]$$

- Vamos discutir a forma do pacote em $t=0$. Para isso vamos escrever $g(k) = |g(k)|\exp[i\alpha(k)]$. A função $|g(k)|$ é localizada em torno de $k=k_0$, com largura Δk, como mostra a figura abaixo:



Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- Para uma discussão qualitativa, vamos construir $\psi(x,0)$ utilizando apenas 3 ondas planas com $(k_0, k_0 - \Delta k/2, k_0 + \Delta k/2)$ com amplitudes $(1, 1/2, 1/2)$, como ilustrado nas figuras abaixo:



O pacote fica:

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left[\exp[ik_0 x] + \frac{1}{2}\exp[i(k_0 - \Delta k/2)x] + \frac{1}{2}\exp[i(k_0 + \Delta k/2)x] \right]$$

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \exp[ik_0 x] \left[1 + \frac{1}{2}\exp[-i(\Delta k/2)x] + \frac{1}{2}\exp[i(\Delta k/2)x] \right]$$

$$\psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \exp[ik_0 x] \left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right) \right] \rightarrow |\psi(x,0)| = \frac{|g(k_0)|}{\sqrt{2\pi}} \left| 1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right) \right|$$

Da figura vemos que o máximo do pacote, $x_M(0) = 0$, onde as 3 ondas estão em fase e interferem construtivamente.

Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- Podemos encontrar os "zeros" de $|\psi(x,0)|$:

$$|\psi(x,0)| = 0 \rightarrow \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right) = -1 \rightarrow \frac{\Delta k}{2}\bar{x} = \pm\pi \rightarrow \Delta k\,\bar{x} = \pm 2\pi$$

  Fazendo: $\bar{x} = \Delta x/2 \rightarrow \Delta k\,\Delta x = 4\pi$. Isto que fornece uma relação entre as larguras de $|g(k)|$ e $|\psi(x,0)|$.

- Vamos discutir agora o caso geral. A forma de $\psi(x,0)$ resulta da interferência de infinitas ondas planas, e o máximo ocorre quando houver interferência construtiva entre as ondas planas. Vamos escrever $g(k) = |g(k)|\exp[i\alpha(k)]$ e considerar que $g(k)$ varia pouco no intervalo $(k_0 - \Delta k/2, k_0 + \Delta k/2$, onde $|g(k)|$ é apreciável. Para Δk suficientemente pequeno temos:

$$\alpha(k) \sim \alpha(k_0) + (k-k_0)\left.\frac{d\alpha(k)}{dk}\right|_{k=k_0} + \cdots$$

  e, com isto, $\psi(x,0)$ fica:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\,g(k)\exp\left[ikx\right] \rightarrow \psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\,|g(k)|\exp[i\alpha(k)]\exp\left[ikx\right]$$

$$\psi(x,0)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\,|g(k)|\exp\left[i\left(\alpha(k_0) + (k-k_0)\left.\frac{d\alpha(k)}{dk}\right|_{k=k_0}\right)\right]\exp\left[ikx\right]$$

Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- Definindo:

$$x_0 = -\left.\frac{d\alpha(k)}{dk}\right|_{k=k_0}$$

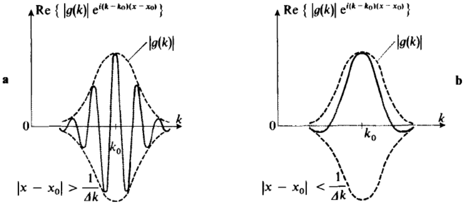
temos:

$$\psi(x,0) = \frac{\exp[i\alpha(k_0) + ik_0 x]}{\sqrt{2\pi}} \int dk\, |g(k)| \exp[i(k-k_0)(x-x_0)]$$

Vamos olhar os comprimentos de onda:

$$x \to \lambda = \frac{2\pi}{k} \to k = \frac{2\pi}{\lambda},\ \ k \to \bar{\lambda} = \frac{2\pi}{x} \to x = \frac{2\pi}{\bar{\lambda}}$$

Para $|x - x_0| > 1/\Delta k$, $\bar{\lambda}$ é pequeno e a função oscila muito no intervalo Δk. Desta forma a integral contribui pouco para o pacote. Para $|x - x_0| < 1/\Delta k$, $\bar{\lambda}$ é grande e a função oscila pouco no intervalo Δk. Desta forma a integral contribui bastante para o pacote. O máximo de $|\psi(x,0)|$ ocorre em $x \sim x_0$. Isto está ilustrado na figura abaixo:



Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- Podemos encontrar o centro do pacote utilizando a aproximação de fase estacionária:

$$\frac{d}{dk}[\alpha(k) + k\,x]_{k=k_0} = 0 \rightarrow x_M(0) = -\left.\frac{d\alpha(k)}{dk}\right|_{k=k_0}$$

- Podemos também estimar a relação entre as larguras de $\psi(x,0)$ e $g(k)$:

$$|x - x_0| \sim \frac{1}{\Delta k} \rightarrow \Delta k|x - x_0| \sim 1 \rightarrow \Delta k\,\Delta x \sim 1$$

Esta é uma propriedade que vem da transformada de Fourier. O limite inferior deste produto depende das definições de Δk e Δx. Nós interpretamos este produto dentro do princícipo de incerteza de Heisenberg, lembrando que $p = \hbar k$, temos $\Delta x\,\Delta p \sim \hbar$. No caso de uma onda plana com (k_0, ω_0) temos:

$$\psi(x,t) = A\exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \rightarrow |\psi(x,t)|^2 = |A|^2$$

Neste caso $\Delta x \rightarrow \infty$, uma vez que a densidade de probabilidade é constante. Esta onda plana corresponde a valores bem definidos $E = \hbar\omega_0$ e $p = \hbar k_0$. Desta forma $g(k) = \delta(k - k_0)$, ou seja, $\Delta k \rightarrow 0$:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk\,\delta(k-k_0)\exp\left[i(kx - \omega t)\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[i(k_0 x - \omega_0 t)\right], \omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m}$$

Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- Para $t = 0$:

$$\psi_k(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp[ikx] \to \psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk\, g(k) \exp[ikx]$$

  Note que $\psi_k(x,0)$ é uma autofunção de momentum linear com autovalor $p = \hbar k$. Podemos interpretar $|g(k)|^2$ como uma densidade de probabilidade no espaço k, onde $d\bar{\mathcal{P}}(k) = |g(k)|^2 dk$ é a probabilidade de encontrar a partícula com momentum entre $\hbar k$ e $\hbar(k + dk)$.

- Considerando agora $p = \hbar k$ temos:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \bar{\psi}(p) = \exp[ipx/\hbar] \to \bar{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\, \psi(x,0) \exp[-ipx/\hbar]$$

- Podemos mostrar que (fórmula de Parseval-Pancherel):

$$\int dx |\psi(x,0)|^2 = \int dp |\bar{\psi}(p)|^2$$

  Para isso usamos:

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp[ip(x - x')/\hbar],\ \delta(p - p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \exp[i(p - p')x/\hbar]$$

- Temos assim:

$$d\mathcal{P}(x) = |\psi(x,0)|^2 dx \to x, x + dx$$

$$d\bar{\mathcal{P}}(p) = |\bar{\psi}(p)|^2 dp \to p, p + dp$$

$$\Delta x\, \Delta p \geq \hbar/2$$

Descrição quântica de uma partícula. Pacotes de onda.

- É impossível definir, em um dado instante de tempo, a posição e o momentum de uma partícula com um grau de precisão arbitrário. Quando o limite inferior da relação $\Delta x \, \Delta p$ é atingido, uma melhora na posição da partícula (diminuir Δx), causa um aumento na incerteza do momentum (aumentar Δp) e vice-versa. Esta relação é chamada de "relação de incerteza de Heisenberg".
- Na próxima aula vamos discutir a evolução temporal de um pacote de ondas livre:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \, g(k) \exp\left[i(kx - \omega t)\right], \; \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$