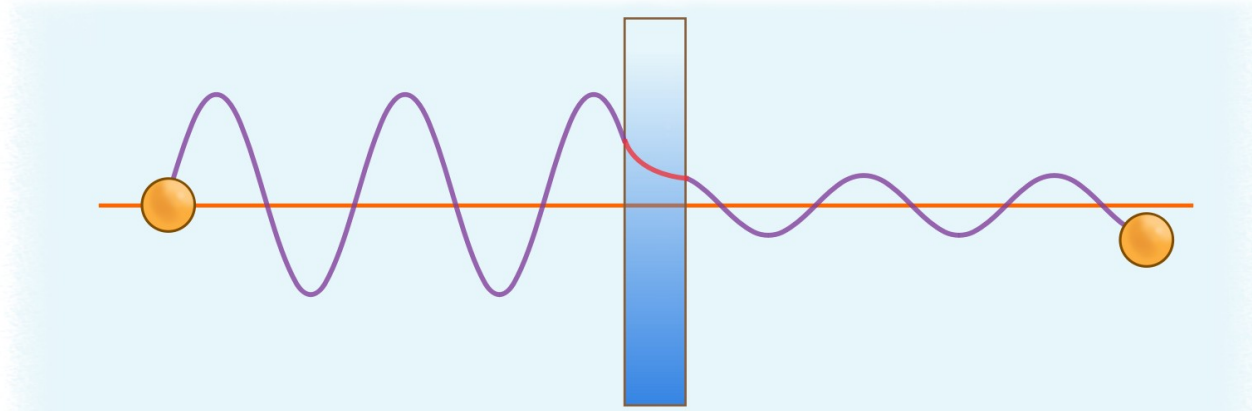


Aula 3 – Aplicações básicas de Mecânica Quântica

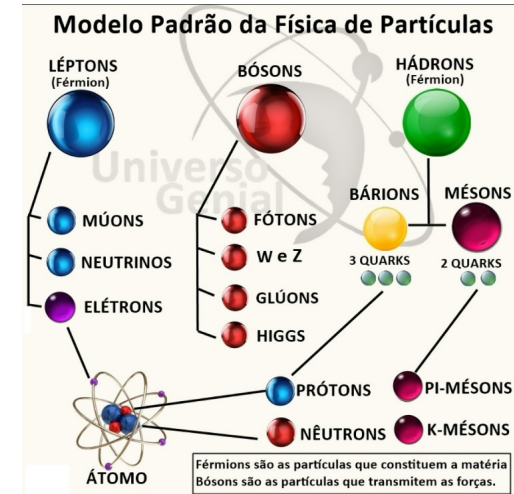


Cenas dos últimos capítulos

- A física do século XIX parecia estar quase completa, baseada na mecânica newtoniana, na termodinâmica e na teoria eletromagnética de maxwell
- No início do século XX o surgimento das teorias relativísticas e quânticas levou a uma mudança radical sobre a compreensão da realidade
- A ideia de átomos como elementos fundamentais logo deu lugar a ideia de partículas que por sua vez hoje são entendidas como representações de campos fundamentais
- Para entender a origem desses campos, estudamos os conceitos básicos e o formalismo matemático da teoria quântica não-relativística...

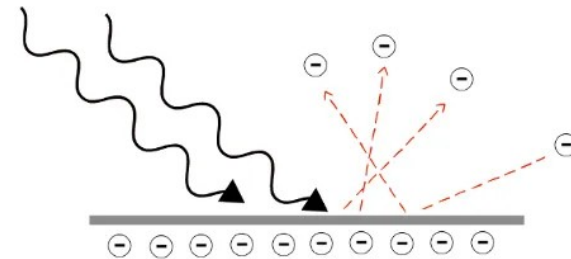
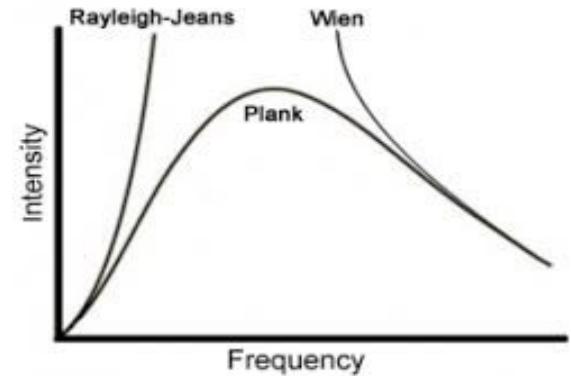


Ludwig Boltzmann



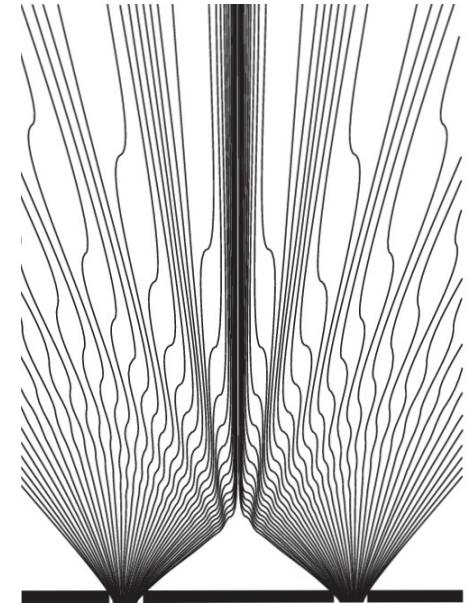
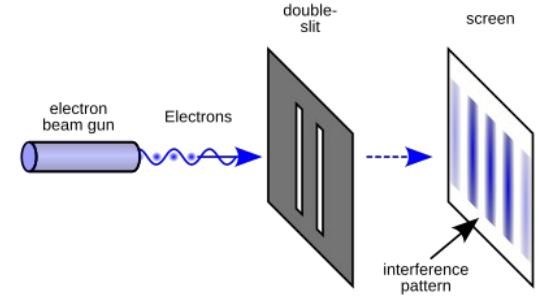
Cenas dos últimos capítulos

- 1900 – Quantização de níveis de energia responsáveis pela radiação do corpo negro
- 1905 – Quantização da radiação responsável pelo efeito fotoelétrico
- 1913 – Quantização do momento angular orbital do elétron $L = n \cdot \hbar$
- 1916 – Quantização da ação periódica de Sommerfeld $\oint p \, dq = nh$



Cenas dos últimos capítulos

- 1924 – Relações de de Broglie para ondas de matéria ($p=\hbar k, \lambda=2\pi/k, E=\hbar\omega, \nu=2\pi\omega$)
- 1925 – Heisenberg propõe a formulação em termos de matrizes, melhorada por Dirac e colocada na forma de vetores em espaços de Hilbert
- 1926 – Schrödinger apresenta sua equação de onda no artigo “Quantização como um problema de autovalores”, onde já demonstra a solução da função de onda para o átomo de Hidrogênio
- 1926 – Max Born introduz a interpretação probabilística da função de onda, associando resultados de medidas ao módulo quadrado da mesma.



Cenas dos últimos capítulos

A Conferência de Solvay de 1927

- Schrödinger apresentou uma teoria baseada em pacotes de onda evoluindo no espaço-tempo. Ele acreditava que ψ representava uma distribuição física real no espaço, como uma densidade de carga difusa, e não apenas uma probabilidade.
- Heisenberg apresentou na mesma conferencia a sua mecânica de matrizes que posteriormente foi demonstrada como equivalente a mecânica ondulatória de Schrödinger quando aplicada a interpretação probabilística de Born a função de onda.
- Louis de Broglie apresentou uma teoria com ondas E partículas – nessa teoria a matéria é guiada por uma onda de fase (a onda-piloto) que evolui num espaço multi-dimensional de configurações.



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



Cenas dos últimos capítulos

A Conferência de Como de 1927

- Niels Bohr introduz o princípio de complementaridade e fundamenta o formalismo quântico de Heisenberg, Born e Dirac em uma descrição que depende crucialmente de um observador ou aparato de medida clássico para a definição de estados quânticos estabelecendo assim a interpretação de Copenhague.
- Além da evolução de estados quânticos ser descrita pela equação de Schrodinger (ou sua forma equivalente nas equações de Heisenberg), a interpretação de Copenhague (referida apenas como “Mecânica Quântica” de forma geral) é baseada nos seguintes postulados:
 - Todo sistema físico é descrito por um vetor (ket) em um espaço de Hilbert;
 - As grandezas físicas observáveis são representadas por operadores Hermitianos (auto-adjuntos*) nesse espaço de estados;
 - Os únicos resultados possíveis de uma medida de um determinado observável são os autovalores associados ao seu operador;
 - A probabilidade de encontrar um ou outro valor é determinada pelo módulo quadrado da função de onda naquele intervalo;
 - Após uma medida, o estado quântico colapsa para o autovetor correspondente ao autovalor observado

No capítulo de hoje...

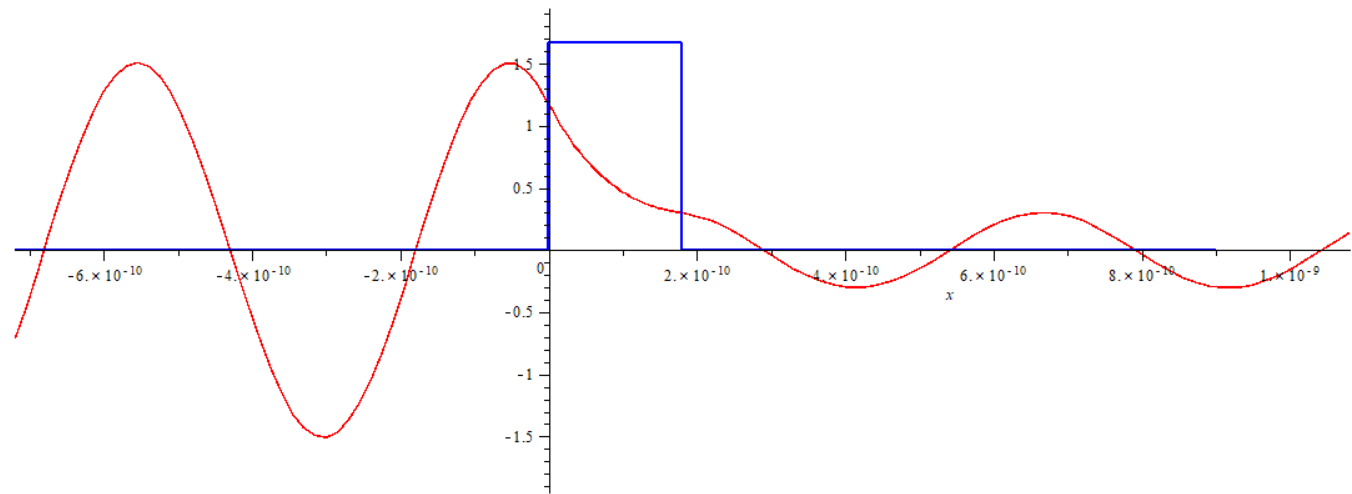
- Solução da equação de Schrödinger para potencial constante; barreira e poço de potencial
- O oscilador harmônico quântico; construindo estados e definindo o vácuo;
- Exercitando soluções com o Maple;
- Introduzindo o conceito de vácuo quântico..

Barreira de Potencial

$$\psi_1 := x \rightarrow e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2 := x \rightarrow F e^{ik_2 x} + G e^{-ik_2 x}$$

$$\psi_3 := x \rightarrow C e^{ik_1 x}$$



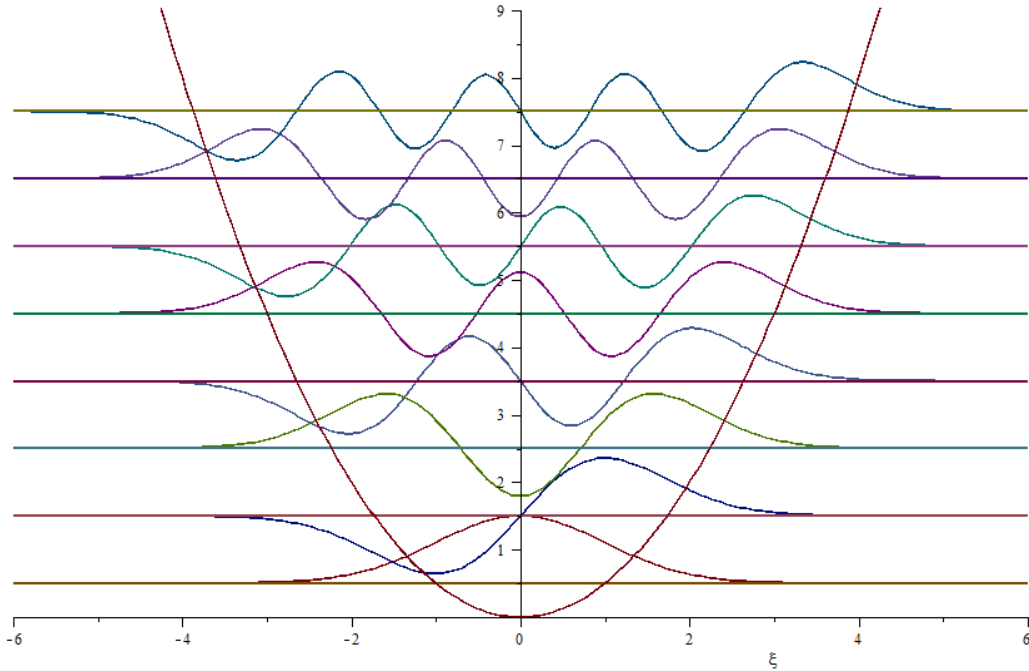
$$\Psi_1 := (x, t) \rightarrow \psi_1(x) e^{-i\omega t}$$

$$\Psi_2 := (x, t) \rightarrow \psi_2(x) e^{-i\omega t}$$

$$\Psi_3 := (x, t) \rightarrow \psi_3(x) e^{-i\omega t}$$

Physics with Maple – 14.4

Oscilador Harmônico



$$\Psi := (n, \xi) \rightarrow \frac{e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \text{HermiteH}(n, \xi)}{\sqrt{2^n n!}}$$

$$\begin{aligned} & e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ & \sqrt{2} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi \\ & \frac{1}{2} \sqrt{8} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^2 - \frac{1}{4} \sqrt{8} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ & \frac{1}{6} \sqrt{48} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^3 - \frac{1}{4} \sqrt{48} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi \\ & \frac{1}{24} \sqrt{384} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^4 - \frac{1}{8} \sqrt{384} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^2 + \frac{1}{32} \sqrt{384} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \\ & \frac{1}{120} \sqrt{3840} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^5 - \frac{1}{24} \sqrt{3840} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^3 + \frac{1}{32} \sqrt{3840} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi \\ & \frac{1}{720} \sqrt{46080} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^6 - \frac{1}{96} \sqrt{46080} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^4 + \frac{1}{64} \sqrt{46080} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \xi^2 - \frac{1}{384} \sqrt{46080} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \end{aligned}$$

Barreira de Potencial ($E > V$)

$$\psi = \psi_E(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

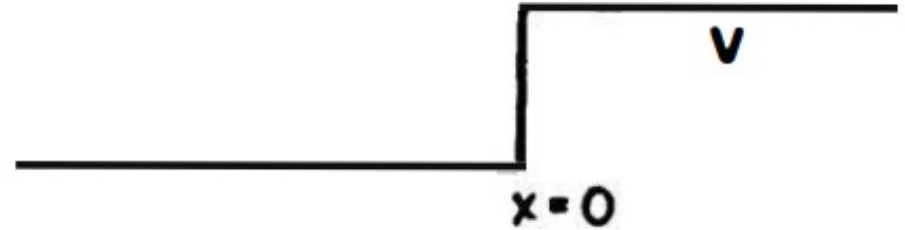


FIG. 6

$$H\psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x)\psi = E\psi$$

$$\psi_1 = B \exp\left(\frac{ip_1x}{\hbar}\right) + C \exp\left(\frac{-ip_1x}{\hbar}\right)$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi = 0$$

$$\psi_2 = A \exp\left(\frac{-ip_2x}{\hbar}\right)$$

$$\psi_E = A \exp\left[i \sqrt{2m(E - V)} \frac{x}{\hbar}\right] + B \exp\left[-i \sqrt{2m(E - V)} \frac{x}{\hbar}\right]$$

$$\psi = A \exp\left[\frac{i(px - Et)}{\hbar}\right] + B \exp\left[\frac{-i(px + Et)}{\hbar}\right] \quad p = \sqrt{2m(E - V)}.$$

Barreira de Potencial ($E < V$)

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

$$(E < V)$$

$$\psi = A \exp\left(\sqrt{2m(V - E)} \frac{x}{\hbar}\right) + B \exp\left(-\sqrt{2m(V - E)} \frac{x}{\hbar}\right)$$

$$A = 0.$$

$$\psi = C \exp\left(i \sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar}\right) + D \exp\left(-i \sqrt{2mE} \frac{x}{\hbar}\right)$$

$$C + D = B$$

Barreira de Potencial ($E < V$)

We see from eq. (18) that the entire wave is reflected because the reflected intensity is equal to the incident intensity. Because the wave

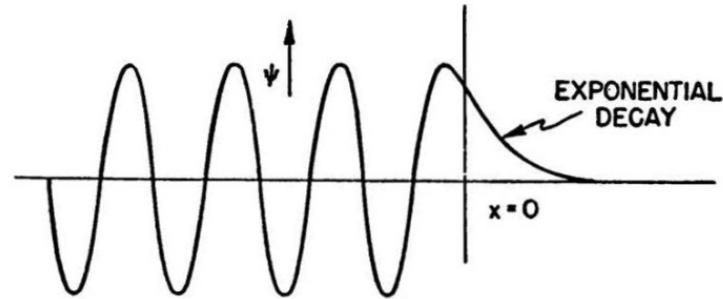


FIG. 7

equation implies the conservation of probability, we conclude that no electrons are transmitted.

Problem 3: Prove that the probability current is zero for Case B, that is, for $E < V$.

$$R = \frac{|D|^2}{|C|^2} = 1$$
$$C = \frac{B}{2}(1 + i \tan \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} (\cos \varphi + i \sin \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} e^{i\varphi}$$
$$D = \frac{B}{2}(1 - i \tan \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} (\cos \varphi - i \sin \varphi) = \frac{B}{2 \cos \varphi} e^{-i\varphi}$$

Barreira de Potencial ($E < V$)

$$m := 9.100000000 \cdot 10^{-31}$$

$$V0 := 1.600000000 \cdot 10^{-18}$$

$$h := 1.055000000 \cdot 10^{-34}$$

$$a := 1.800000000 \cdot 10^{-10}$$

$$En := 9.600000000 \cdot 10^{-19}$$

$$w := 9.099526066 \cdot 10^{15}$$

$$k1 := 1.252907044 \cdot 10^{10}$$

$$\kappa2 := 1.022994318 \cdot 10^{10}$$

$$\psi1 := x \rightarrow e^{I k1 x} + B e^{-I k1 x}$$

$$\psi2 := x \rightarrow F e^{\kappa2 x} + G e^{-\kappa2 x}$$

$$\psi3 := x \rightarrow C e^{I k1 x}$$

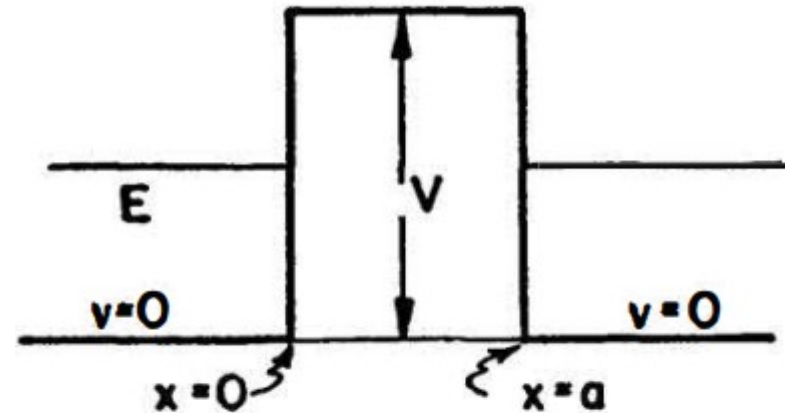


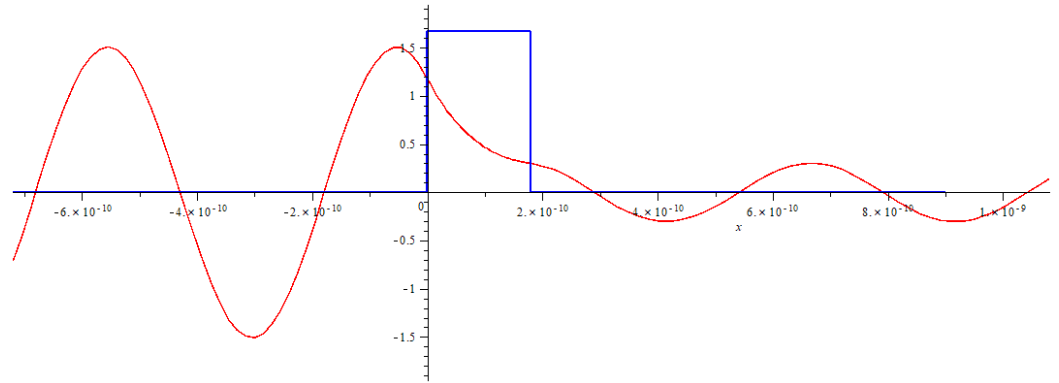
FIG. 8

$$\begin{aligned} \text{Soln1} := & \text{solve}(\{ \text{psi1}(0) = \text{psi2}(0), \text{psi2}(a) \\ & = \text{psi3}(a), D(\text{psi1})(0) = D(\text{psi2})(0), \\ & D(\text{psi2})(a) = D(\text{psi3})(a) \}, \{ B, C, F, G \}); \end{aligned}$$

Barreira de Potencial ($E < V$)

```

Psi1 := (x, t) → psi1(x) · exp(−I · w · t);
Psi2 := (x, t) → psi2(x) · exp(−I · w · t);
Psi3 := (x, t) → psi3(x) · exp(−I · w · t);
br := piecewise(0 < x and x < a,  $\frac{V0}{En}$ , x < 0,
    0, a < x, 0):
pt1 := animate(Re(Psi1(x, t)), x = −4 · a .. 0, t
    = 0 ..  $\frac{6 \cdot \text{Pi}}{w}$ ):
pt2 := animate(Re(Psi2(x, t)), x = 0 .. a, t = 0
    ..  $\frac{6 \cdot \text{Pi}}{w}$ ):
pt3 := animate(Re(Psi3(x, t)), x = a .. (a + 5
    · a), t = 0 ..  $\frac{6 \cdot \text{Pi}}{w}$ ):
pbr := plot(br, x = −4 · a .. 5 · a, color = blue,
    thickness = 2):
    
```



Refazer essa animação com o software ou linguagem de programação da sua escolha!

Maple (modificado)

MATLAB

Wolfram Mathematica

Python

C++

Fortran 90

Poço potencial?

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(p_1/p_2 - p_2/p_1)^2 \sin^2(2p_2 a/\hbar)} \quad (50)$$

This result is very interesting. First, we see that for $p_1 = p_2$, $T = 1$. This is very natural, because there is then no potential well at all. If $p_1 \neq p_2$, the transmissivity is, in general, less than unity, indicating that some reflection has taken place. This reflection from an attractive potential is a result of the wave nature of matter; it resembles the reflection of sound waves from the open end of an organ pipe. There is, however, one case in which $T = 1$ even though $p_1 \neq p_2$, namely, when $\sin^2(2p_2 a/\hbar) = 0$, or $p_2 = N\pi\hbar/2a$, where N is an integer.

How can we understand this result? To see what it means, we note

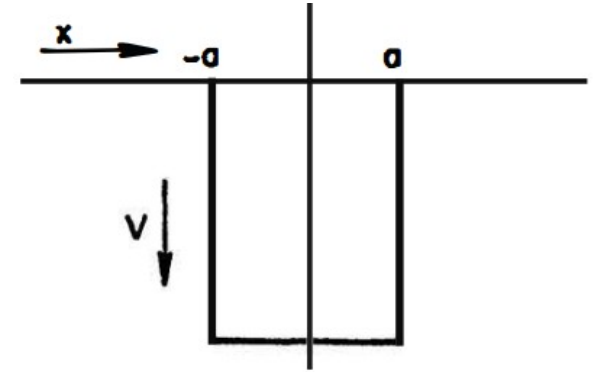
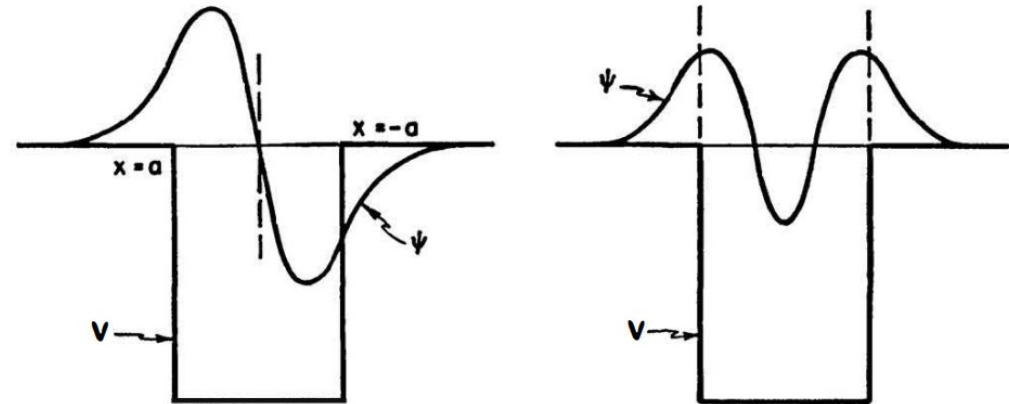


FIG. 11



Oscilador Harmônico Quântico

```
from pylab import *
from scipy.integrate import odeint
from scipy.optimize import brentq
#import matplotlib as plt

def V(x):
    """
    Potential function in the Harmonic oscillator. Returns  $V = 0.5 k x^2$  if  $|x| \leq L$  and  $0.5 * k * L^2$  otherwise
    """
    if abs(x) <= L:
        return 0.5 * k * x**2
    else:
        return 0.5 * k * L**2

def SE(psi, x):
    """
    Returns derivatives for the 1D schrodinger eq.
    Requires global value E to be set somewhere. state0 is first derivative of the
    wave function psi, and state1 is its second derivative.
    """
    state0 = psi[1]
    state1 = (2.0 * m / h**2) * (V(x) - E) * psi[0]
    return array([state0, state1])

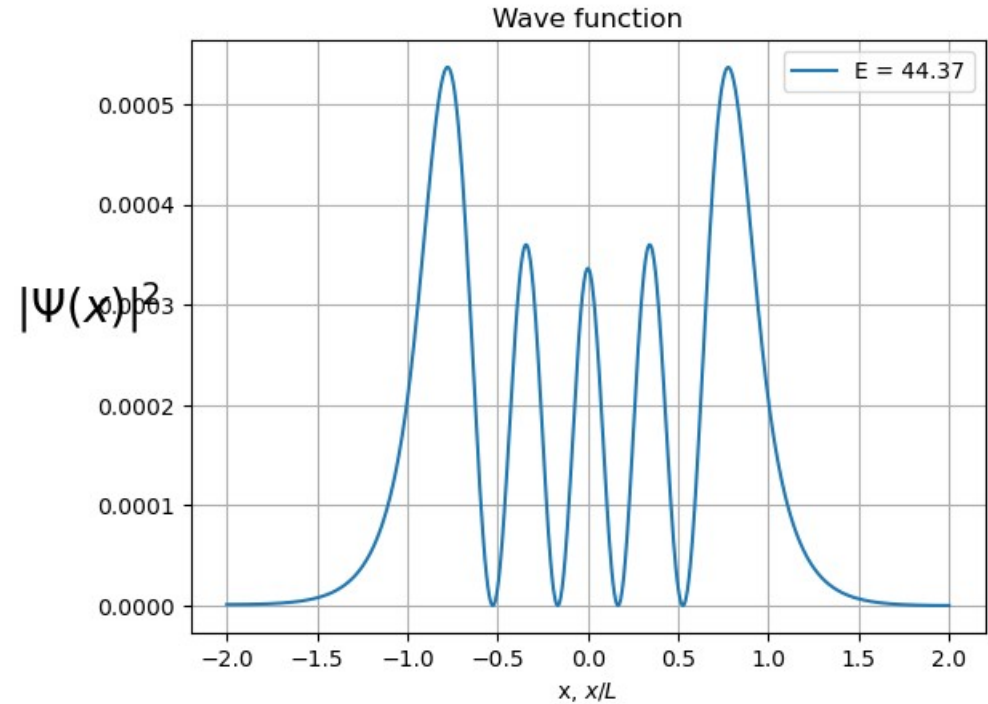
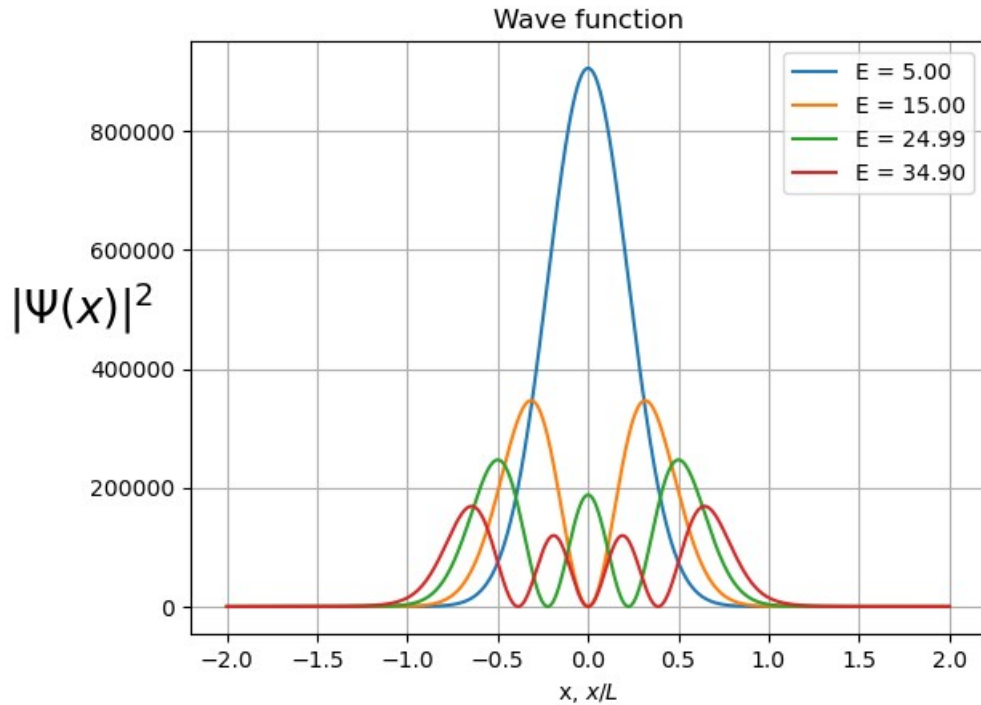
def Wave_function(energy):
    """
    Calculates wave function psi for the given value
    of energy E and returns value at point b
    """
    global psi
    global E
    E = energy
    psi = odeint(SE, psi_init, x)
    return psi[-1,0]
```

```
def find_all_zeroes(x,y):
    """
    Gives all zeroes in  $y = f(x)$ 
    """
    all_zeroes = []
    s = sign(y)
    for i in range(len(y)-1):
        if s[i] * s[i+1] == 0:
            zero = brentq(Wave_function, x[i], x[i+1])
            all_zeroes.append(zero)
    return all_zeroes

def find_analytic_energies(en):
    """
    Calculates Energy values for the harmonic oscillator using analytical
    model (Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, page 35.)
    """
    E_max = max(en)
    print('Allowed energies of HO:')
    i = 0
    while((i+0.5)*h*w < E_max):
        print('%.2f' % ((i+0.5)*h*w))
        i+=1
```

Continua em <https://hellectronica.com/2014/12/28/qm-with-python-swing-on-the-quantum-harmonic-oscillator/>

Oscilador Harmônico Quântico



Próximos capítulos

- O oscilador harmônico e seu estado de vácuo
- Campos livres e o vácuo
- Energia de ponto zero
- Flutuações quânticas do vácuo
- Criação e destruição de partículas
- Integrais de caminho...

