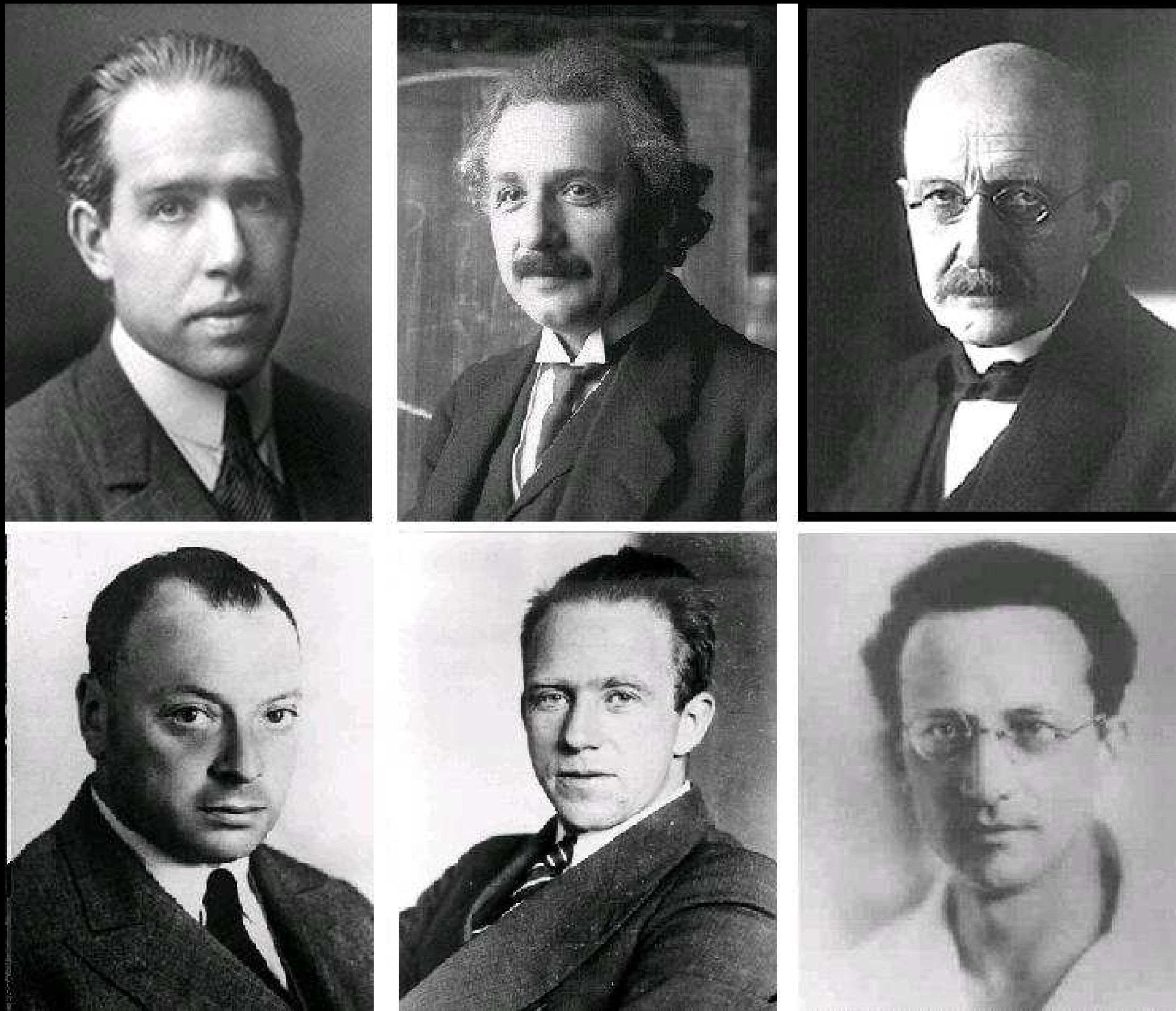
Física Quântica (BCK0103-15)

aula 08 - 2019



luciano.cruz@ufabc.edu.br

Na última aula (22/10/19)

- Estados quânticos “especiais”: Gato de Schrodinger e Emaranhados.
- Interpretações em Física Quântica.
- “Amarrando pontas soltas” (parte 1)

Dia 29/10/19 : PRIMEIRA AVALIAÇÃO

Na aula de hoje (31/10/19)

- Potenciais simples: poço de potencial;
- Espaço de estados e transições entre estados de energia;
- Elétrons em currais quânticos

Mudança para a próxima semana

Excepcionalmente, o atendimento que seria no dia 07/10 (quinta feira) será realizado no dia **5/10 (terça feira)**, pois serei membro de uma banca de defesa de Doutorando no dia 07/10 às 14h.

O horário de atendimento permanece das 13:30 às 15:30 h.

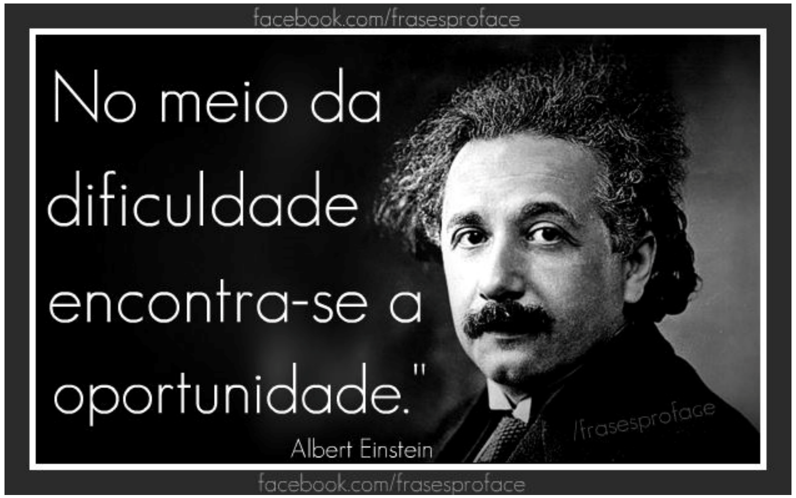
Alguns palavras sobre a Primeira Avaliação...

Questão 1: Efeito Fotoelétrico e comprimento de onda de matéria;
a) Ex. 22,23,24 b) Ex. 9, 10, 11 c) Ex. 7,10 d) Ex. 15 (lista 1)

Questão 2: Átomo de Hidrogênio (modelo de Bohr) e espectros;
a) Ex. 20 b) Ex. 16 (lista 1)

Questão 3: Polarização linear e probabilidade.
a) Ex. 4, 5 b) Ex. 5,6 (lista adicional)

Veja o gabarito das provas no site da disciplina!



As notas das avaliações e a data da vistas de provas serão disponibilizadas no moodle **EM BREVE.**

A equação de Schrodinger

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

Erwin Schröndiger
(1887-1961)

Propriedades das soluções da eq. de Schrodinger

Linearidade: Se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções da equação de Schrodinger. Então:

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$$

Realidade: Foi apresentado previamente que a função de onda de matéria permite uma associação ao que se é medido (o observável):

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \equiv |\Psi(x,t)|^2$$

Normalização: Uma vez que probabilidade deve ser um número no intervalo entre 0 e 1, é preciso definir que a função de onda seja normalizada, ou seja:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$$

A equação de Schrodinger independente do tempo

Para o caso de potenciais independentes do tempo [para **V(x,t) = V(x)**]

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\,x^2}\psi\left(x\right)+V\left(x\right)\psi\left(x\right)=E\,\psi\left(x\right)}$$

E a solução geral da Equação será dada por:

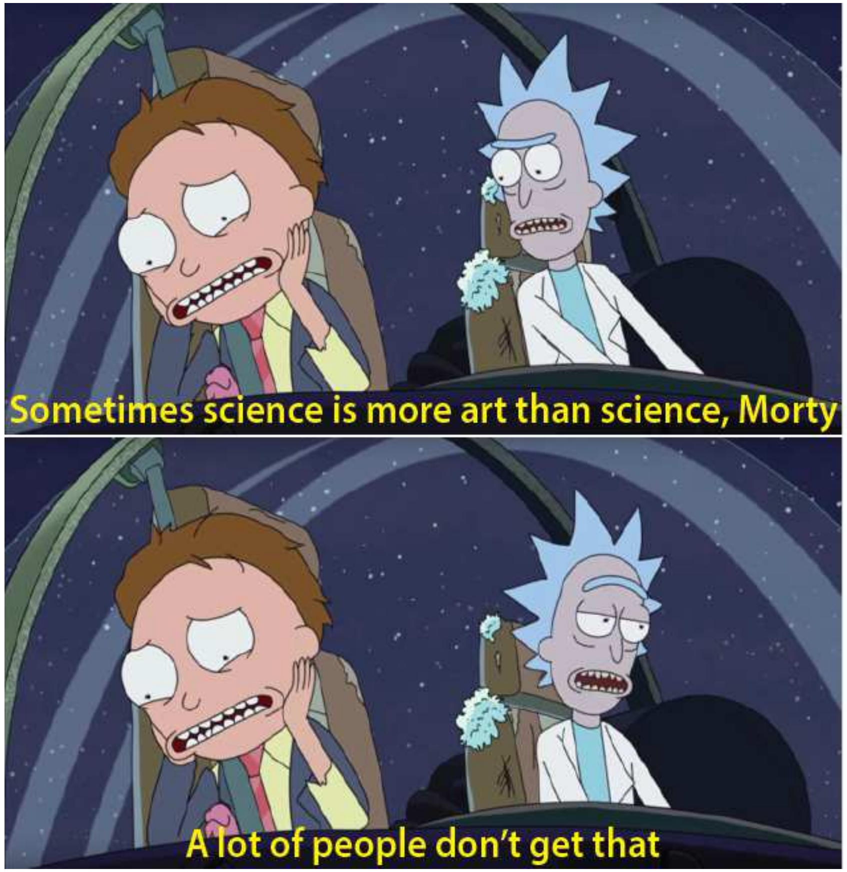
$$\boxed{\Psi\left(x,t\right)=\psi\left(x\right)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}$$

A distribuição de probabilidade pode ser então calculada diretamente como:

$$\boxed{P\left(x\right)=\Psi^*\left(x,t\right)\Psi\left(x,t\right)=\psi^*\left(x\right)\psi\left(x\right)}$$

Um lembrete...

Para cada problema estudado anteriormente, vimos que por meio de argumentos e postulados, que propriedades da física clássica eram desconsideradas e que "quantizações" eram inseridas para resolver os problemas.



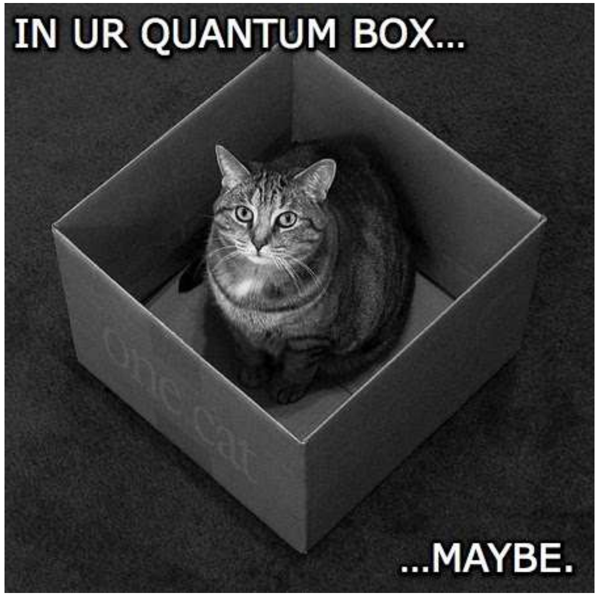
Contudo, não havia uma lógica muito clara de por que tais escolhas eram feitas e mesmo por que funcionavam. De certo modo, estas escolhas eram "quase" ARTE.

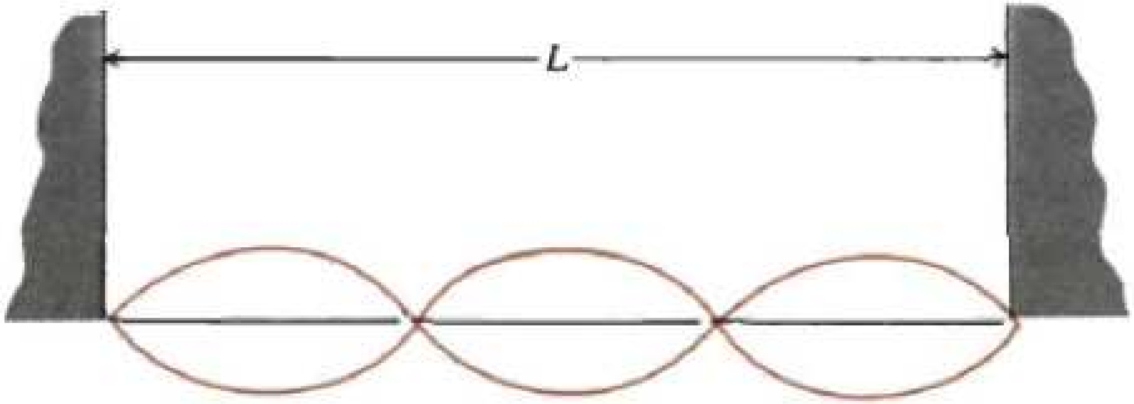
A partir desta aula, veremos como a Equação de Schrodinger nos permite desenvolver um procedimento para determinar soluções da dinâmica de sistemas quânticos.

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\,x^2}\psi\left(x\right)+V\left(x\right)\psi\left(x\right)=E\,\psi\left(x\right)}$$

Nesta parte de disciplina, as implicações da equação de Schrodinger por meio da solução de alguns exemplos de potenciais específicos.

Na aula de hoje, iniciaremos essa abordagem com o potencial de poço infinito.



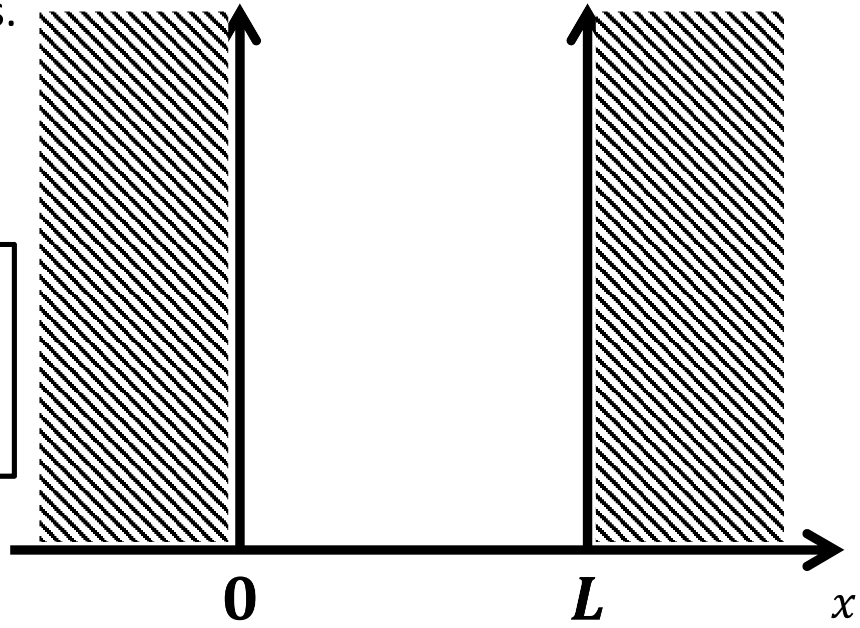


Solução do poço quadrado infinito

Um problema unidimensional que possue solução exata é o poço quadrado infinito (**o infinito aqui se refere ao valor do potencial fora do poço**). Diversos fenômenos quânticos podem ser aproximados por este problema e a sua solução permite uma visualização simples da física destes fenômenos.

Considere o potencial:

$$V = \begin{cases} 0\,, \text{ para } 0 < x < L \\ \infty\,, \text{ para } x \leq 0, \text{ e } x \geq L \end{cases}$$



Portanto, a partícula é livre [V(x) =0] na região 0 < x < L e o potencial é infinito fora desta região. Desse modo, a partícula não deve ser encontrada na região fora do "poço". Assim, esperamos que a função de onda seja nula fora do poço de potencial:

$$\psi_{ext}\,(x < 0) = \psi_{ext}\,(x > L) = 0$$

Nas fronteiras do poço, temos condições de contorno que devem ser satisfeitas:

$$\begin{aligned}\psi_{ext}(0) &= \psi(0) = 0 \\ \psi_{ext}(L) &= \psi(L) = 0\end{aligned}$$

Observe que estas são as mesmas condições impostas a uma corda vibrante com as duas pontas presas, como no caso visto em aula (e experimento) de ondas estacionárias na corda.

Na região do poço, 0 < x < L, o potencial é V(x) =0 e a solução pode ser determinada como:

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

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{d\,x^2}\psi(x) &= -\frac{2m\,E}{\hbar^2}\,\psi(x) \\ &= -k^2\psi(x)\end{aligned}$$

Com: $k^2 = \dfrac{2m\,E}{\hbar^2}$

A solução geral é dada por:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

(Já vimos este resultado em um exercício resolvido em aula)

Aplicando as condições de contorno definidas anteriormene, podemos determinar os valores das contantes A e B:

$$\begin{aligned} \psi_{ext}(0) &= \psi(0) = 0 \\ &= B = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{ext}(L) &= \psi(L) = 0 \\ &= A \sin k\,L = 0 \end{aligned}$$

A segunda condição leva a existência de soluções não nulas e que estão condicionadas a um conjunto discreto de possíveis valores de k:

$$k_n L \quad = \quad n\pi, \qquad n = 1,\, 2,\, 3,\, \ldots$$

$$k_n \quad = \quad \frac{n\pi}{L}$$

Lembre-se que o valor k está associado a energia da partícula: $k^2 = \dfrac{2m\,E}{\hbar^2}$

Desse modo, temos um conjunto discreto de valores de energia também:

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\,L^2}, \qquad n = 1,\, 2,\, 3,\, \ldots}$$

Observe que o resultado obtido para o poço infinito foi o mesmo que tivemos para o caso de ondas de de Broglie estacionárias, que foi tratado quando falamos das órbitas do átomo de Bohr.

As funções de onda correspondentes aos estados de energia apresentados anteriormente são:

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

O valor de A_n é determinado pela condição de normalização:

$$\begin{aligned}
\int_0^L |\psi_n(x)|^2\, dx &= \int_0^L |A_n|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \\
&= \frac{1}{2}\int_0^L |A_n|^2\, dx = \frac{1}{2}|A_n|^2 L \\
A_n &= \sqrt{\frac{2}{L}}
\end{aligned}$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}$$

Solução completa para o poço quântico infinito (dependência no tempo)

Como visto anteriormente, a solução da equação de Schrodinger quando V=V(x), pode ser escrita como:

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)\,\phi_n(t)$$

Asssim, para o poço infinito podemos escrever:

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

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\,L^2}, \qquad n = 1,\, 2,\, 3,\, \ldots}$$

Faça em casa

Outra forma de calcular a solução do poço de potencial infinito

Se no lugar da solução: $$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

Nós usássemos: $$\psi(x) = a\, e^{ikx} + b^*\, e^{-ikx}$$

Teríamos encontrado outros coeficientes para a solução, contudo a resposta final seriam as mesmas funções de onda.

Resolva a questão usando as usando as exponenciais.

Lembres-se: As funções cos kx e sen x, as funções e^{ikx} e e^{-ikx} são linearmente independentes.

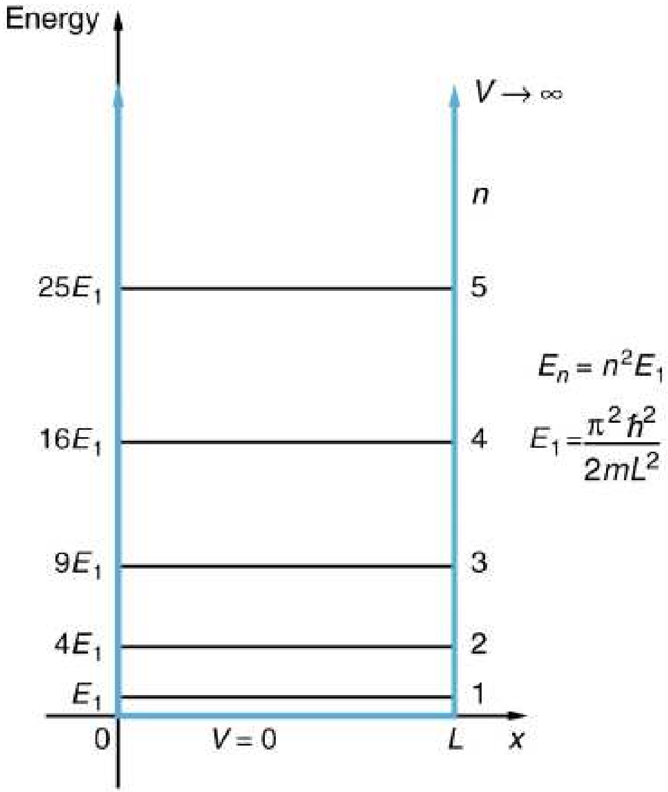
Analisando as soluções obtidas

Cada função $\psi_n(x)$ está associada a uma energia E_n específica

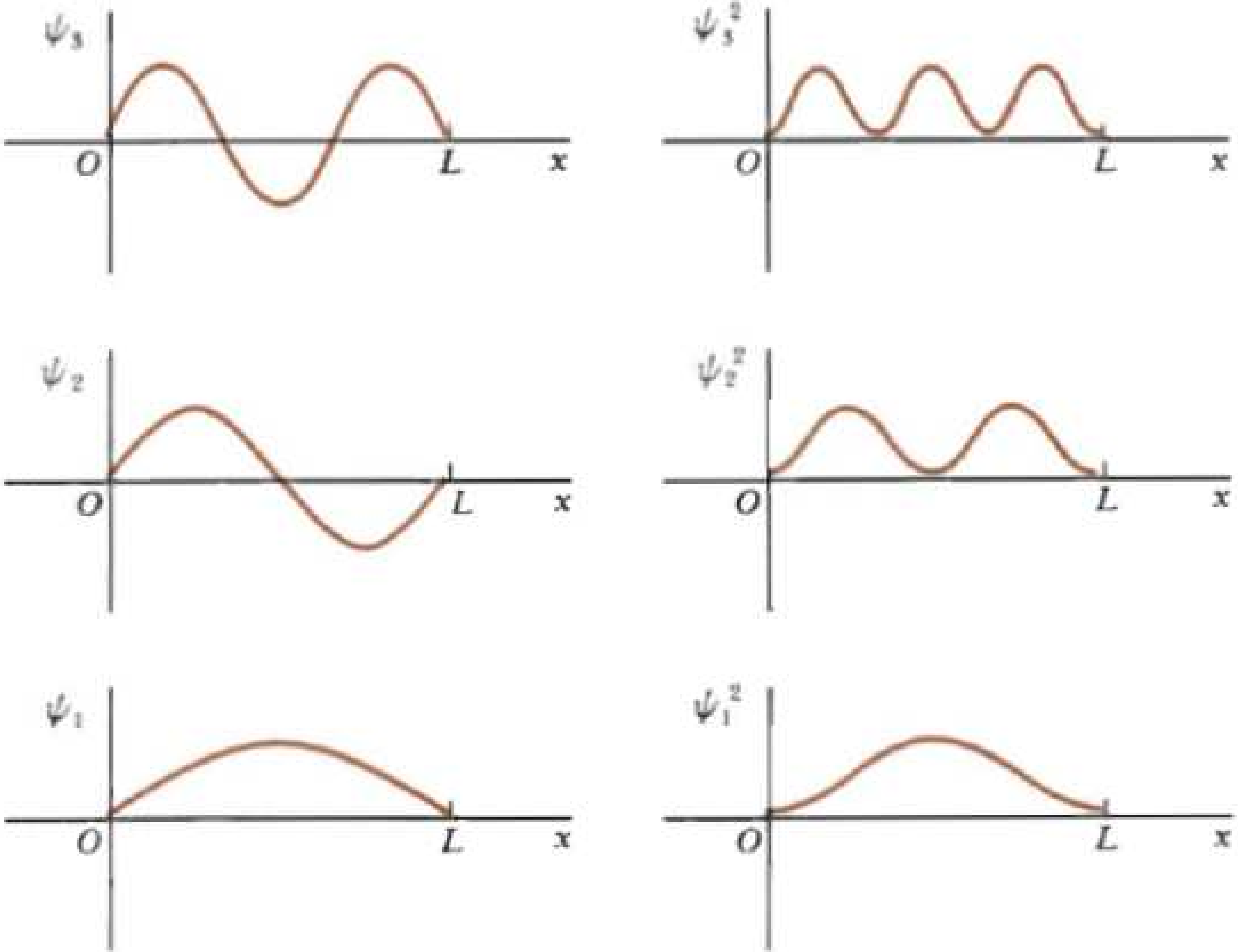
$$\psi_n(x) \longrightarrow E_n$$

As funções $\psi_n(x)$ são chamadas de **autofunções** ou **autoestados** e os E_n são os **autovalores** de energia.

O valor n rotula os diferentes estados do poço, o estado com n=1 é denominado estado fundamental.



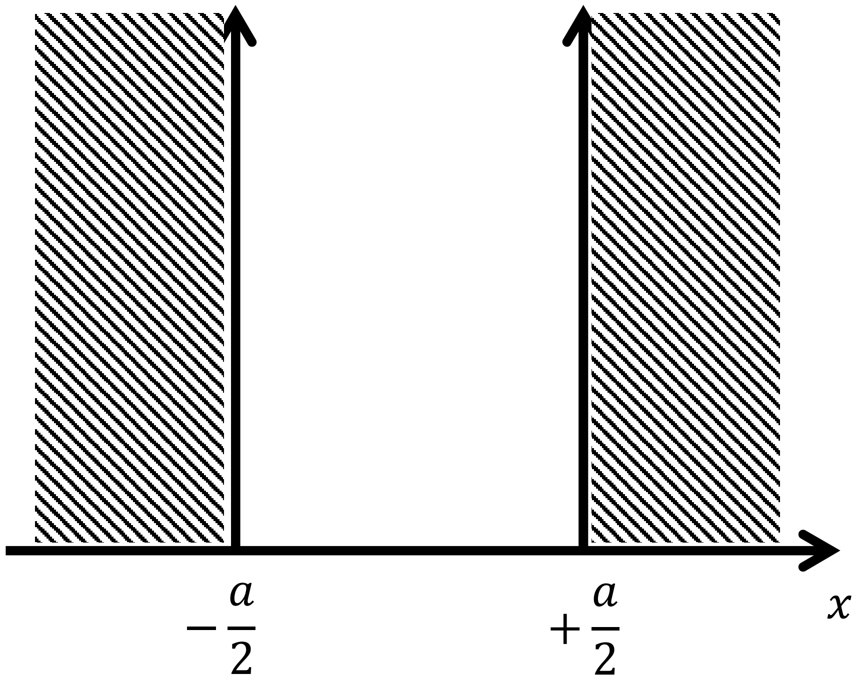
Abaixo, temos as três primeiras autofunções (do baixo para cima: estado fundamental, primeiro estado excitado e segundo estado excitado) e suas respectivas distribuições de probabilidade:



Faça em casa

Resolva o problema do poço quadrado infinito para o seguinte potencial:

$$V(x)\begin{cases} 0, para\ -\frac{a}{2} \leq x \leq +\frac{a}{2} \\ \infty\ , para\ \ x \leq -\frac{a}{2}\ e\ x\ \geq\ +\frac{a}{2} \end{cases}$$



Condição de contorno:

$$\boxed{\psi\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi\left(+\frac{a}{2}\right) = 0}$$

Veja o exercício 6 da lista 2.

Considere um elétron em uma caixa do tamanho de um átomo. (a) Determine a energia do estado fundamental de um elétron confinado em uma caixa unidimensional com L=0,1 nm de comprimento (o tamanho aproximado de um átomo) (b) Faça o diagrama de níveis de energia e calcule o comprimento de onda dos fótons emitidos em todas as transições possíveis entre o estado com n =3 ou menor e os estados de energia menor que n=3.

(a) A energia do estado fundamental (n=1) é dada por:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Multiplicando numerador e denomiador por $c^2/4\pi^2$ Temos:

$$E_1 = \frac{(hc)^2}{8mc^2L^2}$$

Substituindo $hc = 1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}$ e $mc^2 = 0.511 \text{ MeV}$ na expressão acima:

$$E_1 = \frac{(1240 \text{ eV} \cdot \text{nm})^2}{8(5.11 \times 10^5 \text{ eV})(0.1 \text{ nm})^2} = 37.6 \text{ eV}$$

A energia de um estado n qualquer é dada por:

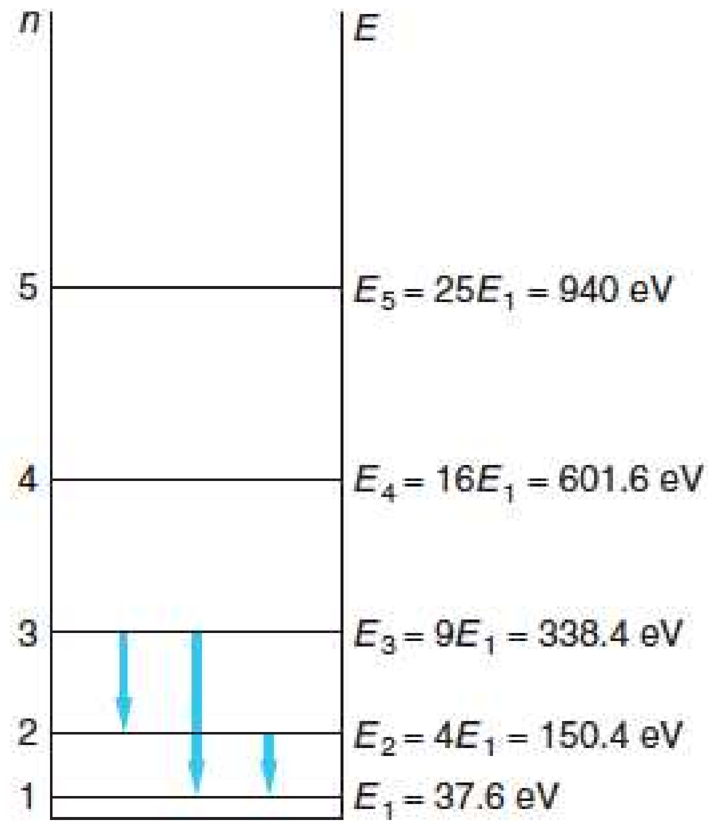
$$E_n = n^2 E_1 = n^2(37.6\text{ eV})$$

Dessa forma:

$$\Delta E_{3\to 2} = 338.4\text{ eV} - 150.4\text{ eV} = 188.0\text{ eV}$$
$$\Delta E_{3\to 1} = 338.4\text{ eV} - 37.6\text{ eV} = 300.8\text{ eV}$$
$$\Delta E_{2\to 1} = 150.4\text{ eV} - 37.6\text{ eV} = 112.8\text{ eV}$$

Pelo diagrama ao lado, temos 3 transições para calcular:

$$\lambda_{3\to 2} = \frac{hc}{\Delta E_{3\to 2}} = \frac{1240\text{ eV}\cdot\text{nm}}{188.0\text{ eV}} = 6.60\text{ nm}$$
$$\lambda_{3\to 1} = \frac{hc}{\Delta E_{3\to 1}} = \frac{1240\text{ eV}\cdot\text{nm}}{300.8\text{ eV}} = 4.12\text{ nm}$$
$$\lambda_{2\to 1} = \frac{hc}{\Delta E_{2\to 1}} = \frac{1240\text{ eV}\cdot\text{nm}}{112.8\text{ eV}} = 11.0\text{ nm}$$



O número total de estados ligados do poço quadrado infinito é também infinito. Não há possibilidade da partícula deixar o poço.

Transição entre estados quânticos

Da mesma forma que foi visto para o átomo de Hidrogênio no modelo de Bohr:

2 - Os átomos irradiam quando um elétron sofre uma transição de um estado estacionário para outro segundo a equação: hf = Ef – Ei (quantização do momento lugar);

No poço quadrado infinito, também teremos a transição de estados desde que seja recebida (ou emitida) uma energia correspondente a diferença de energia entre os estados envolvidos na transição.

Em física quântica, temos uma probabilidade de transição que pode ser calculada como:

$$P_{12}\,(x) = \int \psi_2{}^*(x)\boldsymbol{D}\psi_1(x)dx$$

ψ_1 Estado inicial

ψ_2 Estado final

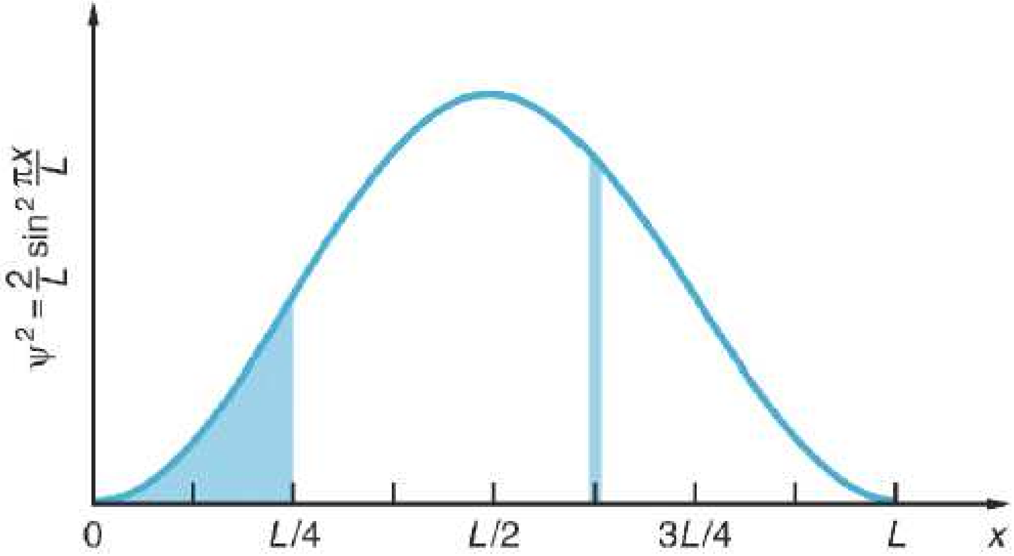
P_{12} Representa a probabilidade (“potencialidade”) do eletrons ir do estado 1 para o estado 2

$\boldsymbol{D}$ Representa o “operador de transição” (lembre-se do postulado III)

Exemplo de medida de probabilidade da particula estar em uma região da caixa.

A distribuiçãoteórica de probabilidade para uma partícula que se encontra no estado n=1 é dada por:

$$P_1(x) = |\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$



Vamos determinar a probabilidade de encontrar a partícula entre x=0 e x=L/4 no estado n=1.

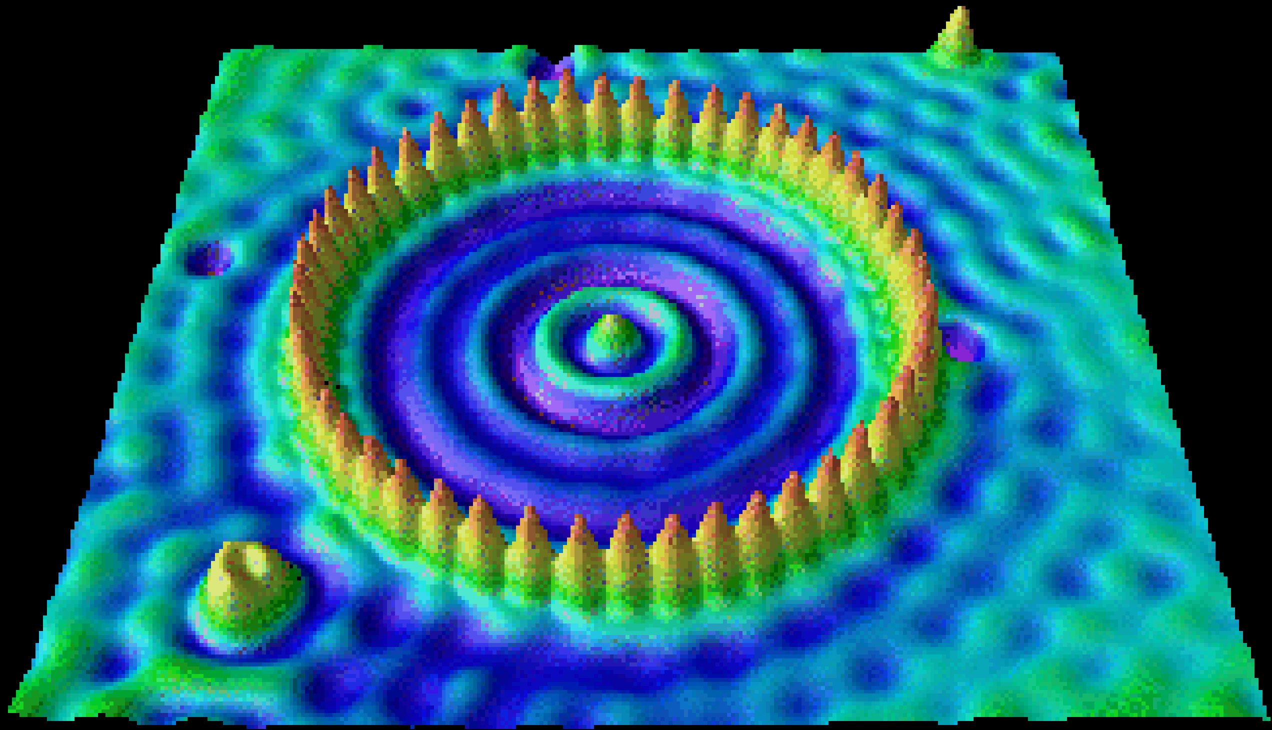
$$\begin{aligned} p_1\left[0, \frac{L}{4}\right] &= \int_0^{\frac{L}{4}} \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) \\ &= \int_0^{\frac{L}{4}} \frac{2}{L}\left[\frac{1-\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)}{2}\right] dx \\ &= \frac{2}{L}\left[\frac{L}{8} - \frac{L}{4\pi}\right] = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} \approx 0.09 \end{aligned}$$

Por completeza, se quisermos determinar a probabilidade de encontrar a partícula entre x=L/4 e x=L, temos:

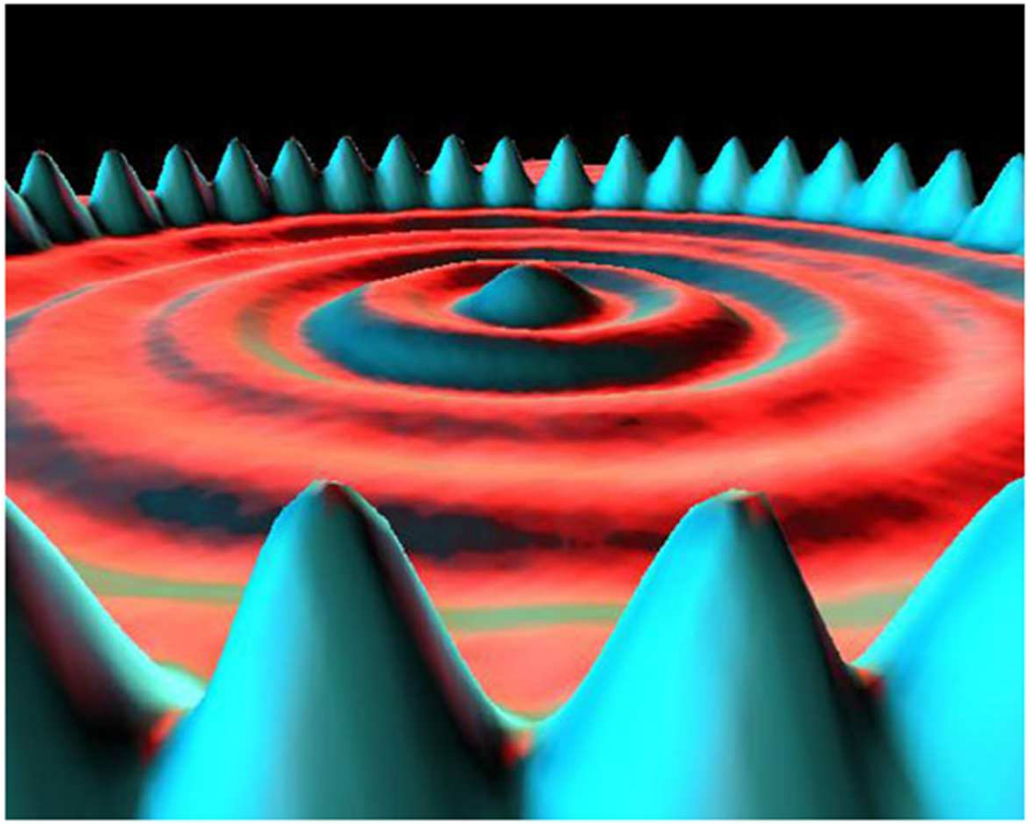
$$p_1\left[\frac{L}{4}, L\right] = 1 - p_1\left[0, \frac{L}{4}\right] \approx 0.91$$

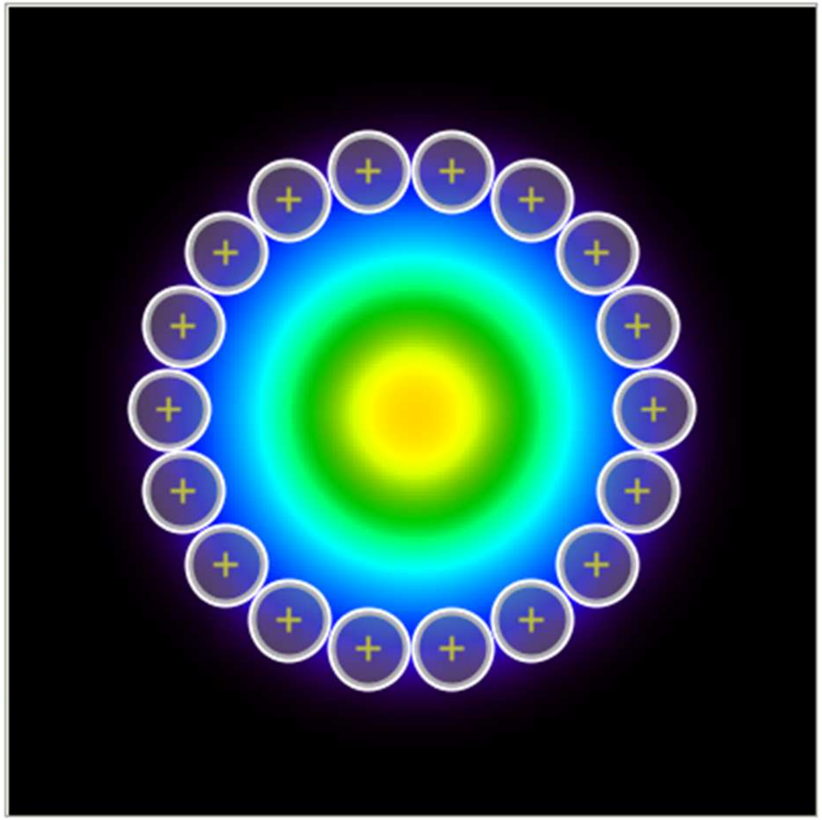
Faça os exercícios 3 a 6 da lista 2.

Confinando elétrons



Os elétrons da superfície de uma lâmina de Cobre foram confinados em um curral atômico - uma barreira de 71,3 ângstrons de diâmetro, imposta por 48 átomos de Ferro.





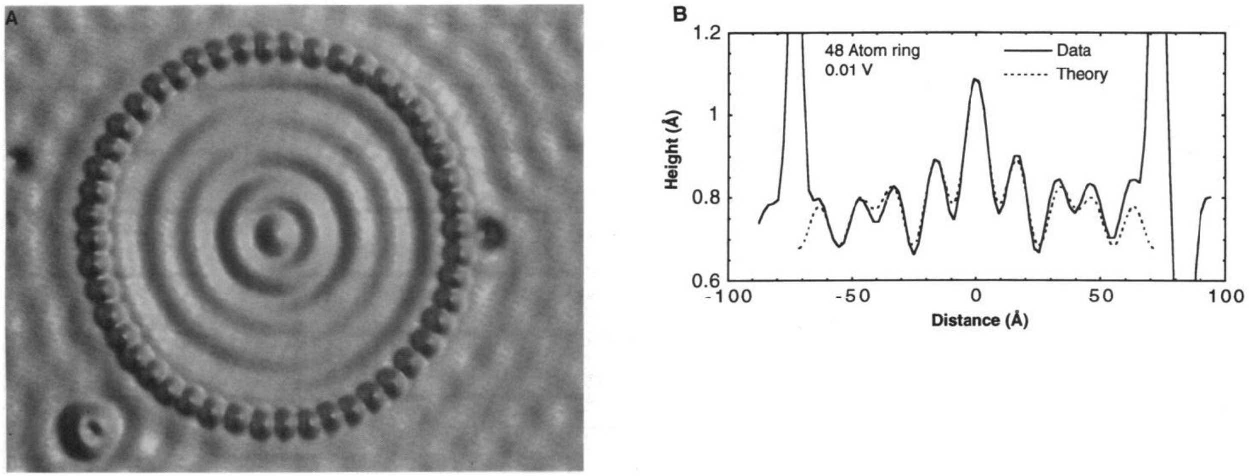
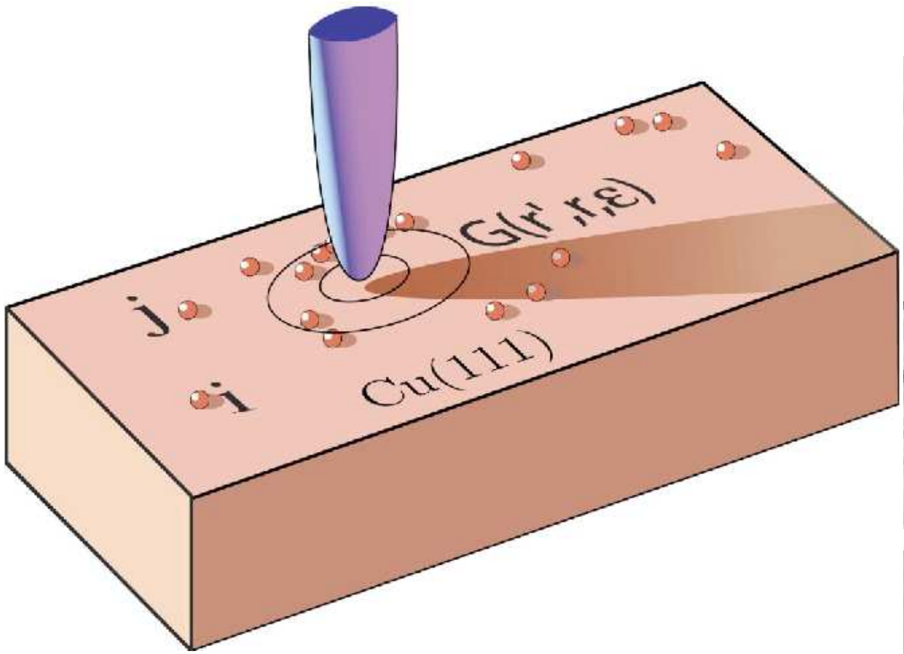
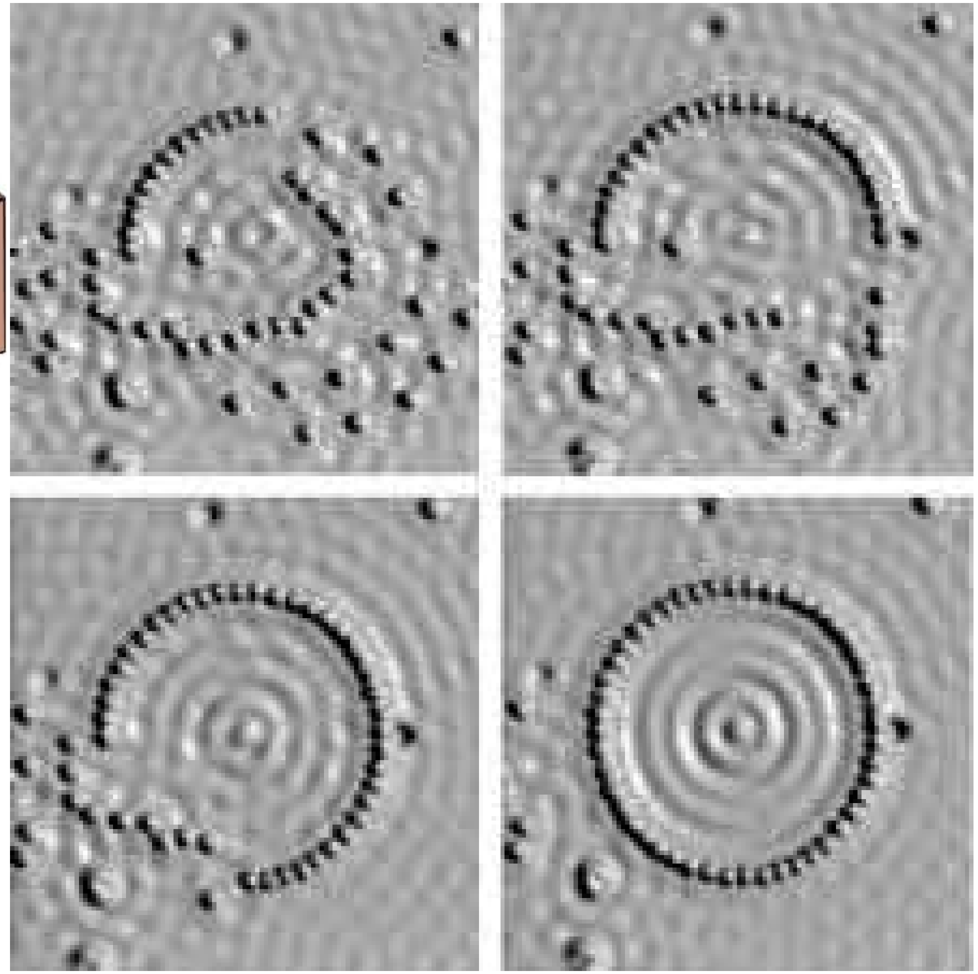


Fig. 2. Spatial image of the eigenstates of a quantum corral. (**A**) 48-atom Fe ring constructed on the Cu(111) surface ($V = 0.01$ volt, $I = 1.0$ nA). Average diameter of ring (atom center to atom center) is 142.6 Å. The ring encloses a defect-free region of the surface. (**B**) Solid line: cross section of the above data. Dashed line: fit to cross section using a linear combination of $|5,0\rangle$, $|4,2\rangle$, and $|2,7\rangle$ eigenstate densities.

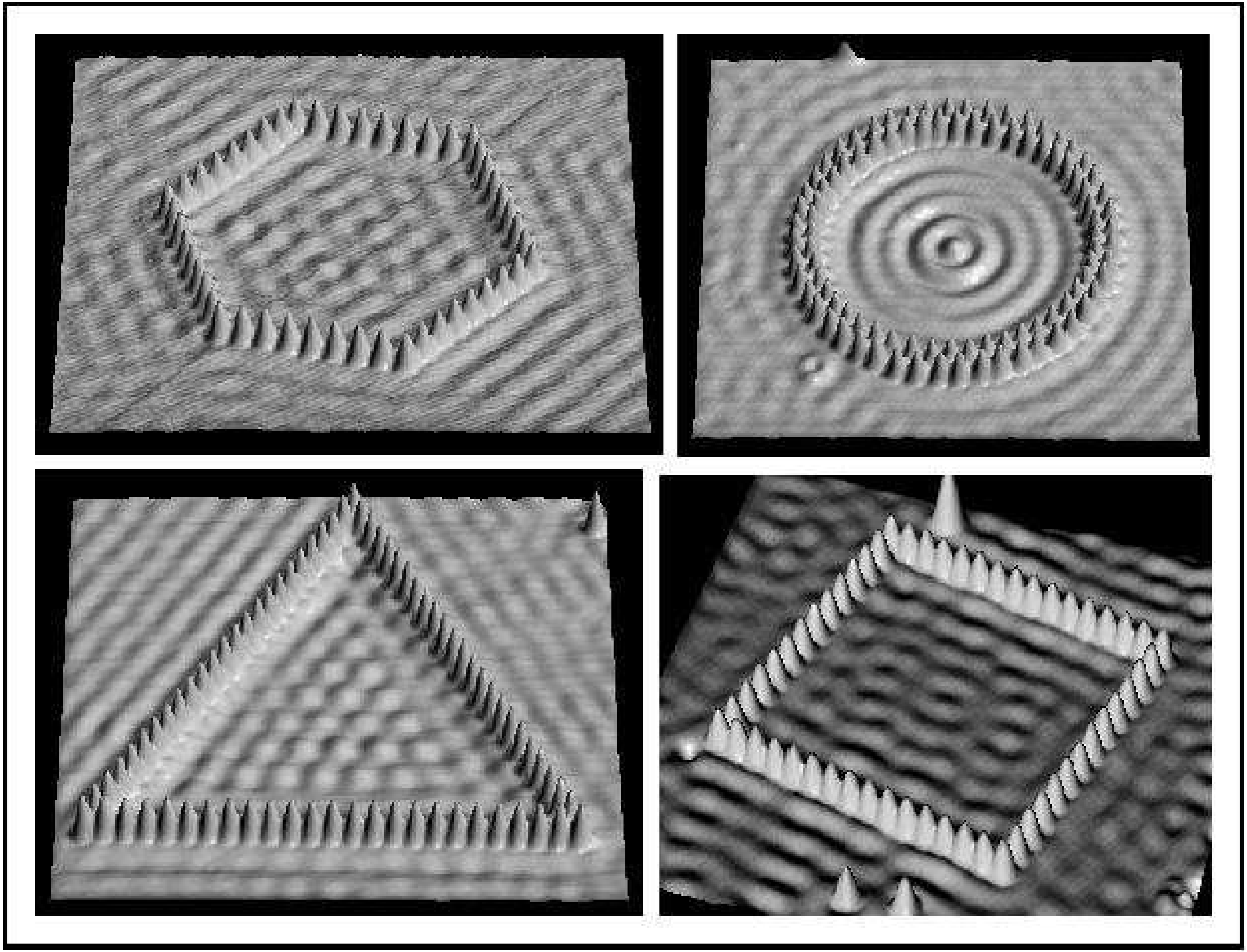




Os átomos foram colocados um a um, com o auxílio da ponta de um STM (Scanning Tunneling Microscope), que discutiremos futuramente no tópico Tunelamento.

Confinement of Electrons to Quantum Corrals on a Metal Surface
M. F. Crommie, C. P. Lutz and D. M. Eigler
Science, **262**, 218(1993)

O padrão de oscilação de onda dos elétrons confinados nos "currais" é previsto adequadamente pelas equações de Schrodinger sob as condições de contorno corretas.



Superposição de funções de onda

Uma partícula pode ser descrita por uma superposição dos possíveis auto-estados que ela pode assumir.

Contudo, ao se realizar uma medida, a partícula é “projetada” para um destes estado específico **(colapso da função de onda – postulado V).**

$$\boxed{\psi(x) = \sum_n \Phi_i(x)}$$

$\Phi_i(x)$ São as autofunções ou autoestados associados ao sistema quântico

Para o poço infinito, um estado arbitrário é dado por:

$$\psi(x) = \sum_n c_i \sqrt{\frac{2}{L}}\, sen\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \qquad \text{com} \qquad \sum_n |c_i|^2 = 1$$

Faça em casa

Considere uma particula livre confinada em um poço infinito de tamanho L, cujas soluções são:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Mostre que a relação abaixo é verdadeira para n, m = 1,2,3... :

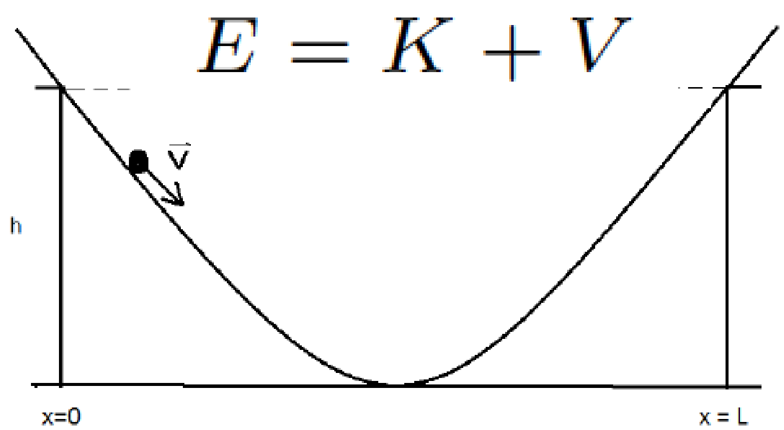
$$\boxed{\int \psi_m{}^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{nm}}$$

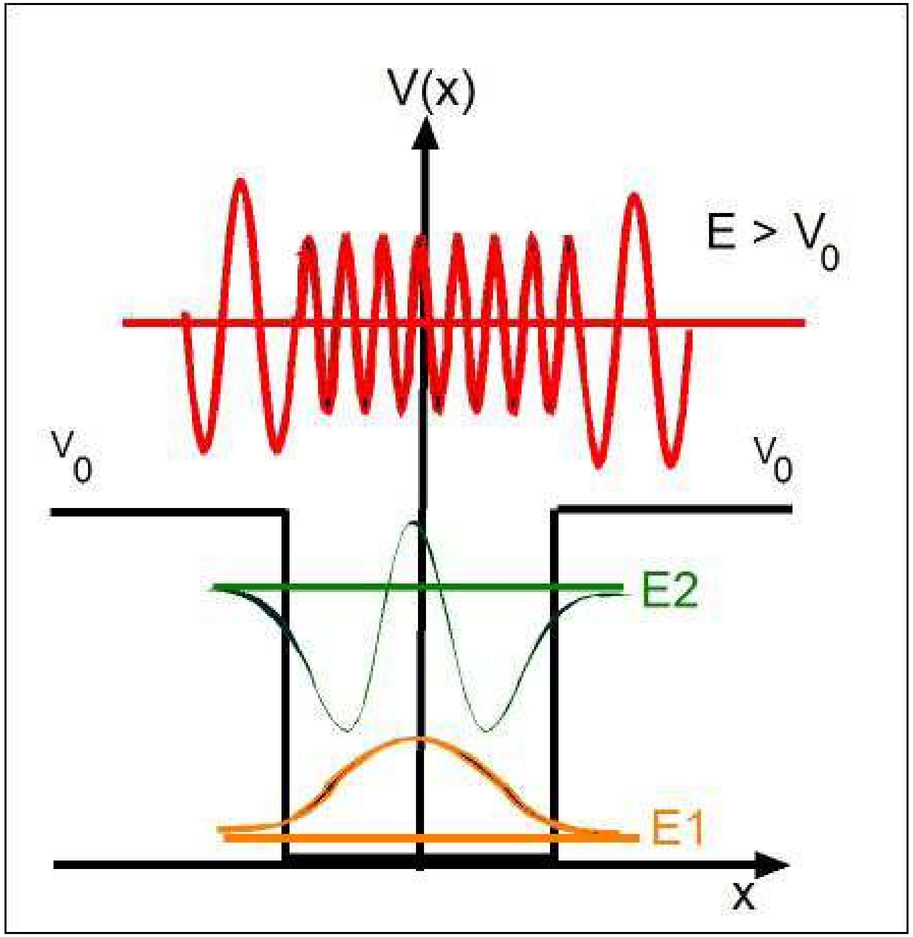
Onde $\delta_{nm} = 0, se\ n\ \neq m\ \ e\ \delta_{nm} = 1, se\ n = m$

Esta é a propriedade de ortonormalidade, que é satisfeita pelas soluções para o poço infinito! De fato, isso é uma exigência das soluções de um sistema quântico. Chamamos o conjunto destas funções ortonormais de base de estados do sistema quântico

O Gato de Schrodinger é “apenas” um caso de estados superpostos de uma “partícula confinada em uma caixa” ;-)

Na próxima aula, iremos discutir sobre o poço de **potencial finito**, no qual a altura da barreira de potencial é limitada. Veremos que este é um caso mais "realista" e com uso prático em algumas aplicações, como *quantum dots*.





Na aula de hoje (31/10/19)

- Potenciais simples: poço de potencial;
- Espaço de estados e transições entre estados de energia;
- Elétrons em currais quânticos

Na próxima aula (05/11/19)

- Operadores e valores médios de observáveis;
- Potenciais simples: poço quadrado finito;
- Pontos quânticos e suas aplicações.

Perguntas, dúvidas, comentários, aflições?

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 1)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
1	~~24/09 (Ter)~~	~~1~~	~~Apresentação a disciplina; Evidências experimentais da teoria quântica : radiação do Corpo Negro.~~
	~~---~~	~~---~~	~~---~~
2	~~01/10 (Ter)~~	~~2~~	~~Evidências experimentais da teoria quântica: efeito foto-elétrico, efeito Compton, espectros atômicos~~
	~~03/10 (Qui)~~	~~3~~	~~Modelos atômicos, Modelo quântico de Bohr, Experimento de Franck-Hertz, Hipótese de de Broglie e ondas de matéria.~~
3	~~08/10 (Ter)~~	4	~~Revisitando ondas; interferência (fótons e elétrons) e interferômetros; dualidade onda-partícula e princípio de complementaridade; Principio de incerteza de Heisenberg.~~
	---	---	---
4	~~15/10 (Ter)~~	~~5~~	~~Interferômetros e fótons únicos, polarização da luz, postulados da física quântica e notação de Dirac~~
	~~17/10 (Qui)~~	~~6~~	~~Relação entre estados quânticos e funções de onda. Espaços discretos e contínuos na~~ física quântica. Mecânica Quântica Ondulatória, Determinação eurística da Equação de Schrodinger, propridades da equação de Schrodinger e funções de ondas.
5	~~22/10 (Ter)~~	~~7~~	~~Interpretações da física quântica, amarrando pontas soltas.~~
	---	---	---
6	**29/10 (Ter)**	**P1**	**Primeira Avaliação**
	~~31/10 (Qui)~~	~~8~~	~~Potenciais simples: poço de potencial, Espaço de estados e transições entre estados de energia; Elétrons em currais quânticos~~

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 2)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
7	05/11 (Ter)	9	Potenciais simples: poço quadrado finito; operadores e valores médios de observáveis, pontos quânticos e suas aplicações.
	---	---	---
8	12/11 (Ter)	10	Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico. Armadilhas de íons e principios de informação quântica. Requisitos essenciais de um computador quântico, Emaranhamento Quântico.
	14/11 (Qui)	11	Potenciais simples: potenciais degraus, reflexão, Transmissão de Ondas, Tunelamento. Tempo de tunelamento em uma barreira (revisitando o princípio de incerteza de Heisenberg). Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.
9	19/11 (Ter)	12	Equação de Schrodinger em três dimensões: O cubo quântico (coordenadas cartesianas), O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas), Separação de variáveis e a quantização de Momento Angular e Energia.
	---	---	---
10	26/11 (Ter)	13	Funções de ondas do átomo de Hidrogênio; Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos. Imagens, Abstrações e Interpretações.
	28/11(Qui)	14	Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons, spin (quarto número quântico atômico) e tabela periódica. O fim de um começo.
11	**03/12 (Ter)**	**P2**	**Segunda Avaliação da Disciplina**
	---	---	---
12	**10/12 (Ter)**	**Psub\REC**	**Avaliação Substitutiva ou Avaliação de Recuperação**
13			
	14 a 21/9		**Lançamento de conceitos e faltas**