Visualização Completa dos Sistemas Quânticos Fundamentais

Samuel Keullen Sales

October 12, 2025

Contents

1 Poço Infinito Unidimensional

Equação e Solução

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \psi(0) = \psi(L) = 0$$

Soluções normais:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{L}, \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

Densidade de Probabilidade

A densidade de probabilidade é:

$$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Ela indica a chance relativa de encontrar a partícula em cada ponto x.

- Para $n = 1$: máxima probabilidade no centro, sem nós.
- Para $n = 2$: há um nó central ($\rho = 0$ em $x = L/2$), indicando uma região onde a partícula nunca é detectada.
- Para $n = 3$: dois nós — o padrão ondulatório cresce com n.

A função de onda muda de sinal entre nós, mas $|\psi|^2$ sempre é positiva.

Exemplo Numérico

Para $L = 1\,\mathrm{m}$, $m = 1\,\mathrm{kg}$, $\hbar = 1\,\mathrm{Js}$:

$$E_1 = 4.9348\,\mathrm{J}, \quad E_2 = 19.7392\,\mathrm{J}, \quad E_3 = 44.4132\,\mathrm{J}$$

A probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $0.4 < x < 0.6$ (no estado fundamental) é:

$$P_{(0.4,0.6)} = \int_{0.4}^{0.6}\rho_1(x)\,dx = \frac{2}{L}\int_{0.4}^{0.6}\sin^2(\pi x)\,dx \approx 0.124$$

Ou seja, cerca de 12,4% de chance de detectar a partícula nessa região.

Interpretação Física

O poço infinito representa confinamento absoluto: a partícula só existe entre $x = 0$ e $x = L$. As regiões onde $\rho_n(x)$ é alta são análogas às posições "mais prováveis" do elétron em uma cavidade quântica. O aumento de n corresponde a maior energia cinética e frequência de oscilação — o comportamento aproxima-se do clássico.

2 Oscilador Harmônico Quântico

Equação e Soluções

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi = E\psi$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Densidade e Forma da Onda

O termo exponencial $e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ garante confinamento — a partícula é mais provável próxima ao centro $x = 0$. Os polinômios de Hermite $H_n(x)$ introduzem nós e alternância de sinal conforme n aumenta.

- $n = 0$: sem nós, máxima densidade no centro.
- $n = 1$: um nó central, simetria ímpar.
- $n = 2$: dois nós, simetria par.

Exemplo Numérico

Para $m = 1\,\mathrm{kg}$, $\omega = 1\,\mathrm{rad/s}$, $\hbar = 1\,\mathrm{Js}$:

$$E_0 = 0.5\,\mathrm{J}, \quad E_1 = 1.5\,\mathrm{J}, \quad E_2 = 2.5\,\mathrm{J}$$

A densidade no estado fundamental:

$$\rho_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}$$

A largura da distribuição é $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = 0.707\,\mathrm{m}$. Ela define a incerteza de posição mínima do sistema — origem do princípio de Heisenberg.

Interpretação Física

O oscilador harmônico descreve qualquer sistema que oscile em torno de um equilíbrio: vibração de átomos, modos de cordas ou campos quantizados. Cada nível E_n corresponde à excitação de um "quantum" de vibração. A energia de ponto zero ($E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$) mostra que mesmo no estado mais baixo há flutuações inevitáveis.

3 Átomo de Hidrogênio

Equação e Soluções

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi$$

com soluções separáveis:

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

Energias:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Função Radial

O termo radial mais simples ($n = 1, \ell = 0$):

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

onde $a_0 = 5.29 \times 10^{-11}$ m é o raio de Bohr.

A densidade radial de probabilidade é:

$$P(r) = r^2|R_{10}(r)|^2 = 4\left(\frac{r^2}{a_0^3}\right) e^{-2r/a_0}$$

Seu máximo ocorre em $r = a_0$, ou seja, o elétron é mais provável de ser encontrado a um raio de Bohr do núcleo.

Exemplo Numérico

$$E_1 = -13.6\,\text{eV}, \quad E_2 = -3.4\,\text{eV}, \quad E_3 = -1.51\,\text{eV}$$

A transição $n = 3 \to n = 2$ libera:

$$\Delta E = 1.89\,\text{eV} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 656\,\text{nm}$$

correspondendo à linha vermelha da série de Balmer (H_α).

Interpretação Física

O átomo de hidrogênio representa o equilíbrio entre atração coulombiana e confinamento quântico. A densidade $P(r)$ explica a "nuvem eletrônica" — regiões de maior probabilidade. Os números quânticos n, ℓ, m descrevem o tamanho, forma e orientação dessa nuvem. Cada transição entre níveis gera um fóton, origem dos espectros atômicos.

4 Conclusão Geral

- O **poço infinito** introduz quantização por confinamento espacial e nós de onda.
- O **oscilador harmônico** introduz o formalismo de operadores e o conceito de energia de ponto zero.
- O **átomo de hidrogênio** introduz potenciais reais e revela a estrutura discreta da matéria observável.

A densidade de probabilidade $|\psi|^2$ é o elo comum entre todos — é ela que conecta o formalismo matemático à interpretação física. Na teoria de campos, cada modo quântico de um campo comporta-se como um oscilador harmônico, e cada excitação (fóton, elétron, bóson) é uma "partícula" desse campo.