TÉCNICO LISBOA

Física de Partículas
Aula 1
Breve Revisão de Mecânica Quântica

Jorge C. Romão
Instituto Superior Técnico, Departamento de Física & CFTP
A. Rovisco Pais 1, 1049-001 Lisboa, Portugal

19 Setembro 2013

Sumário da Aula

- Princípios básicos de Mecânica Quântica
- A equação de Schrödinger
- O átomo de Hidrogénio
  - A equação de Schrödinger para o átomo de hidrogénio
  - Significado físico dos resultados
  - As funções de onda atómicas
  - Propriedades das funções de onda atómicas
  - Normalização, Ortogonalidade e nodos das soluções radiais $R_{n\ell}(r)$
  - O spin
  - Adição de momentos angulares
  - Estrutura fina
  - Desdobramento de Lamb
  - Desdobramento hiperfino

Princípios básicos de Mecânica Quântica

Listamos os princípios básicos de Mecânica Quântica:

- Para um dado estado do sistema há uma função de estado $|\Phi\rangle$ que contém toda a informação possível sobre o sistema.
    - Em muitos casos tratamos com a representação do estado $|\Phi\rangle$ em termos das coordenadas, a chamada função de onda $\Psi(q_i, s_i, t)$.
    - $|\Psi(q_i, s_i, t)|^2 \geq 0$ tem a interpretação duma densidade de probabiblidade de encontrar a partícula num estado com coordenadas q_i, números quânticos internos s_i no instante t.
- As observáveis físicas são representadas por operadores hermíticos,

$$p_i \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \;, \qquad E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

- O estado $|\Phi_n\rangle$ é um estado próprio do operador Ω se

$$\Omega\, |\Phi_n\rangle = \omega_n\, |\Phi_n\rangle$$

onde $|\Phi_n\rangle$ é o estado próprio que corresponde ao valor próprio ω_n. Se Ω e hermítico então ω_n são números reais.

Princípios básicos de Mecânica Quântica ...

- Para um conjunto completo de operadores que comutam $\{\Omega_1, \Omega_2, \ldots\}$, existe um conjunto completo de funções próprias simultâneas, Ψ_n. Um estado arbitrário (função de onda) pode ser expandido neste conjunto

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n$$

- O resultado duma medida da observável Ω é qualquer dos seus valores próprios ω_n com probabilidade $|a_n|^2$. O valor médio duma observável é

$$< \Omega >_\Psi = \sum_s \int dq_1 \ldots \Psi^*(q_i, s_i, t) \Omega \Psi(q_i, s_i, t) = \sum_n |a_n|^2 \omega_n$$

- A evolução temporal do sistema é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

(O Hamiltoniano H é um operador linear e hermítico)

- A linearidade implica o princípo da sobreposição e a hermiticidade conduz à conservação da corrente de probabilidade

$$\frac{d}{dt} \sum_s \int dq_1 \cdots \Psi^* \Psi = \frac{i}{\hbar} \sum_s \int dq_1 \cdots [(H\Psi)^* \Psi - \Psi^*(H\Psi)] = 0$$

Equação de Schrödinger

- Equação Schrödinger a 3 dimensões

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t), \qquad \int d^3r|\Psi|^2 = 1$$

- Simetria esférica

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

onde $\vec{L}$ é o operador momento angular, para separar ainda mais as soluções.

- Sabe-se que as funções próprias do operador L^2 são as harmónicas esféricas, isto é,

$$L^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar^2\, l(l+1)\, Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (1)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar\, m\, Y_{lm}(\theta,\phi)\ . \qquad (2)$$

Notar que as harmónicas esféricas são funções próprias simultâneas dos operadores L_z e L^2 pois eles comutam.

Equação de Schrödinger

- Para o caso de simetria esférica $V(\vec{r}) = V(r)$, a equação de Schrödinger separa-se nas 3 variáveis r, θ e ϕ,

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\ Y_{lm}(\theta,\phi)$$

onde a função radial satisfaz a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = ER$$

- É por vezes conveniente escrever $R(r) = u(r)/r$. Então a função $u(r)$ satisfaz

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right] u = Eu$$

que é uma equação para um potencial a uma dimensão aumentada pela barreira centrífuga.

Harmónicas esféricas

As harmónicas esféricas são o produto da soluções das equações para θ e ϕ

$$\frac{d}{d\theta}(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}) + \ell(\ell+1)\sin\Theta - \frac{m_\ell^2}{\sin\theta}\Theta = 0 \ .$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m_\ell^2 \ ,$$

convenientemente normalizadas,

$$Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi) \equiv N_{\ell m_\ell} P_\ell^{m_\ell}(\theta) e^{i m_\ell \varphi}$$

$$N_{\ell m_\ell} = (-1)^m \left[\frac{2\ \ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m_\ell)!}{(\ell+m_\ell)!}\right]^{1/2} \ ,$$

onde $P_\ell^{m_\ell}(\theta)$ são os polinómios associados de Legendre e a normalização é convencional.

As funções de onda atómicas

Vimos que as funções de onda são da forma,

$$\psi_{n\ell m_\ell}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)$$

Para as as harmónicas esféricas temos,

$$\ell = 0 \qquad Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin\theta$$

$$\ell = 1 \qquad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

$$Y_{1,-1} = -Y_{11}^*$$

$$Y_{22} = \sqrt{\frac{13}{32\pi}} e^{i2\varphi} \sin^2\theta$$

$$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin\theta\cos\theta$$

$$\ell = 2 \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_{2,-1} = -Y_{21}^*$$

$$Y_{2,-2} = Y_{22}^*$$

$$\boxed{\int d\Omega\; Y^*_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)\; Y_{\ell' m'_\ell}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{m_\ell m'_\ell}}$$

As funções de onda atómicas

Usando o raio de Bohr,

$$r_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha} = 0.53\text{Å} \ ,$$

Temos então

$$n = 1 \qquad R_{10}(r) = 2\left(\frac{1}{r_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{r_0}}$$

$$n = 2 \qquad R_{20}(r) = 2\left(\frac{1}{2r_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{r}{2r_0}\right) e^{-\frac{r}{2r_0}}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2r_0}\right)^{3/2}\frac{r}{r_0}\ e^{-\frac{r}{2r_0}}$$

e

$$\boxed{\int_0^\infty drr^2|R_{n\ell}(r)|^2 = 1}$$

$$R_{30}(r) = 2\left(\frac{1}{3r_0}\right)^{3/2}\left[1 - \frac{2r}{2r_0} + \frac{2r^2}{27\alpha_0^2}\right] e^{-\frac{r}{3r_0}}$$

$$n = 3 \qquad R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{3}\left(\frac{1}{3r_0}\right)^{3/2}\frac{r}{r_0}\left(1 - \frac{r}{6r_0}\right)\ e^{-\frac{r}{3r_0}}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{1}{3r_0}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3r_0}}$$

Propriedades das funções de onda atómicas

Para as propriedades de

- Normalização
- Ortogonalidade das soluções radiais $R_{n\ell}(r)$
- Nodos de $R_{n\ell}(r)$
- Densidade de Probablilidade

ver o Notebook do mathematica `FunctionsAtomoH.nb`

O Spin

Mostrar o programa Spins

`http://porthos.ist.utl.pt`