XXII SICITE 18,19 e 20 de Outubro de 2017 Londrina-PR
Seminário de Iniciação Científica e Tecnológica

https://eventos.utfpr.edu.br//sicite/sicite2017/index

Dois elétrons num bilhar com paredes suaves

Pedro Chebenski Júnior
pedroj@alunos.utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, Paraná, Brasil.

Hércules Alves de Oliveira Junior
hercules@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, Paraná, Brasil.

RESUMO

O conhecimento da dinâmica de bilhares é aplicado diretamente no estudo de pontos quânticos. Em geral são estudados sistemas clássicos, mas sabe-se que sistemas reais, na realidade, pertencem à Mecânica quântica. Dessa forma, busca-se entender o que ocorre na dinâmica de dois elétrons com spin e interação num bilhar com paredes suaves. Para isso, precisa-se entender como sistemas mais simples se comportam. Neste sentido, estuda-se uma partícula dentro de um potencial infinito, um bilhar quântico simples. São observadas as características do sistema quando duas partículas, sem interação, são inseridas no bilhar. Através do método de soluções de equações diferenciais ordinárias e parciais, foram obtidas as soluções para a equações de Schrödinger independente do tempo, para uma e para duas partículas. Também é mostrado que os valores esperados para a posição e momento ao quadrado são diferentes de zero. Os resultados obtidos concordam com a literatura existente. As soluções para duas partículas são pouco conhecidas e mostram que o comportamento de cada partícula não é afetado pelo da outra. Mostra-se que o princípio de incerteza é mantido para os valores de uma e de duas partículas idênticas num bilhar unidimensional.

PALAVRAS-CHAVE: Elétrons interagentes. Bilhar quântico. Dinâmica quântica.

INTRODUÇÃO

Um Bilhar é um sistema composto de partículas confinadas em uma região determinada. Em geral, são estudados apenas partículas clássicas, que podem ser descritas pelas suas posições e velocidades. Os bilhares podem ter geometria diversa em uma dimensão como uma linha, em duas dimensões como um círculo ou em três dimensões como um cilindro (OLIVEIRA et. al. 2008).

Quanticamente, bilhares aparecem nos chamados Pontos Quânticos (QUANTUM DOTS) (LIU et. al., 2017) e Nanotubos. Estes estão intimamente ligados à Física, Ciência dos Materiais e à medicina.

Classicamente, OLIVEIRA et. al. (2008), mostraram que o sistema com duas partículas interagentes e paredes suaves como potencial apresenta comportamento dinâmico caótico e regular, coexistindo no espaço de fases. O mesmo estudo ainda não foi feito para um sistema quântico. Neste sentido, buscamos entender o comportamento de dois elétrons num potencial suaves. Para isso, precisamos determinar como uma partícula se comporta num bilhar infinito, chamado de poço de potencial infinito costumeiramente. Na sequência, introduzimos duas partículas sem interação, para que, nos passos seguintes, elas possam interagir e serem substituídas por elétrons com spin.

O problema mais usual de partículas confinadas em Mecânica Quântica é o de uma partícula submetida a um potencial infinito, onde o potencial pode ser definido como:

$$\mathrm{V}\ (\mathrm{x}) = \begin{cases} \infty, & x = 0, x = L \\ 0, & 0 < x < L \end{cases} \tag{1}$$

Partindo da equação de Schrödinger independente do tempo.

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{2}$$

Onde $\left\langle x \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| \psi(x) \right\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, em que $\hbar$ é a constante de Planck.

O interesse é saber qual o comportamento da partícula dentro do potencial. Com isso, o potencial se anula $V(x)$= 0 e devemos utilizar as condições de contorno para a função $\psi(x)$ na forma $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Note que $\frac{d\psi(x)}{dx} \neq 0$. Assim, a equação (2) torna-se (3) e resolvendo (3):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \tag{3}$$

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Através das Álgebra linear e Equações diferenciais ordinárias e parciais, conseguimos obter as soluções para a equação de Schrodinger e os valores esperados para x e P. A solução encontrada é:

$$\psi(x) = Bsen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{4}$$

A constante B é determinada pela normalização da função de onda $\psi(x)$ como sendo $\sqrt{\frac{2}{L}}$, dada pelo produto interno (COHEN-TANNOUDJI, 1977).

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int \langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle\, dx = \int \psi^*(x)\psi(x)\, dx = 1 \qquad (5)$$

Obtemos como solução da equação (3) normalizada (SAKURAI, 1994).

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad (6)$$

O comportamento da função de onda e da densidade de probabilidades para diferentes n's pode ser visto na figura (1):

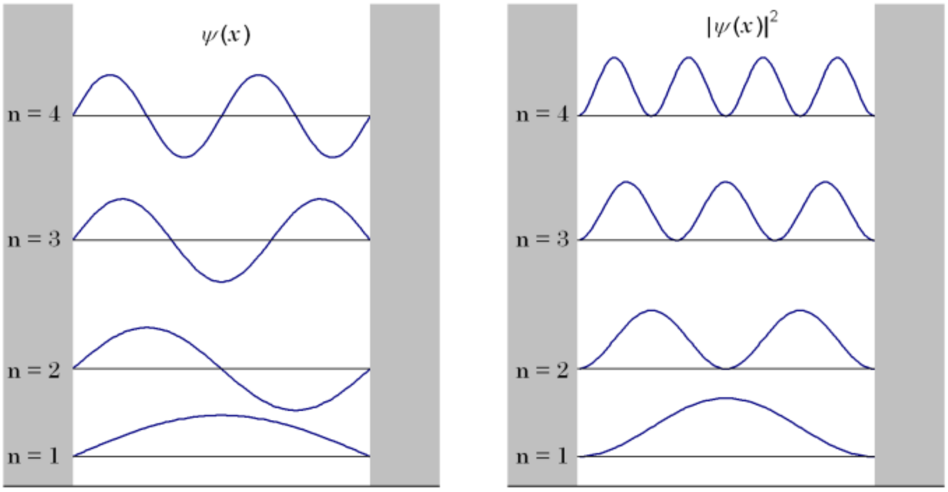

Figura 1: Função de Onda (esquerda), Densidade de probabilidade (direita)

Fonte: http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com.br/2009/08/interpretacion-probabilista-de.html

Os valores esperados para a posição são dados por:

$$\langle x\rangle = \int_0^L x\psi^*(x)\psi(x)dx = \int_0^L x\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\, sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right]^2 dx = \frac{L}{2} \qquad (7)$$

Facilmente podemos obter o valor esperado ao quadrado como sendo $\langle x\rangle^2 = \frac{L^2}{4}$ e o valor quadrático esperado como:

$$\langle x^2\rangle = \int_0^L x^2\psi^*(x)\psi(x)dx = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2} \qquad (8)$$

O mesmo se faz com o momento, com:

$$\langle P\rangle = \int_0^L \psi^*(-i\hbar)\frac{d\psi(x)}{dx}dx = 0 \qquad (9)$$

Consequentemente $\langle P\rangle^2 = 0$ e

$$\langle P^2\rangle = \int_0^L \psi^*(-i\hbar)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx = \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 \qquad (10)$$

Em posse desses resultados, podemos obter o desvio padrão da forma:

$$\Delta P = \sqrt{\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2} = \frac{n\pi\hbar}{L} \tag{11}$$

E para a posição:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{L^2}{12} - \frac{L^2}{2n^2\pi^2} \tag{12}$$

O princípio de incerteza de Heisenberg nos diz que não existe precisão na posição e no momento, ou velocidade, de uma partícula ao mesmo tempo. Isso é expresso pela relação de desigualdade:

$$\Delta x \Delta P \geq 0{,}5\hbar \tag{13}$$

Comparando os resultados para os quatro primeiros valores de n, temos:

$$n = 1 \qquad \Delta x \Delta P = 0{,}56786\hbar \tag{14}$$
$$n = 2 \qquad \Delta x \Delta P = 1{,}67028\hbar \tag{15}$$
$$n = 3 \qquad \Delta x \Delta P = 2{,}62720\hbar \tag{16}$$
$$n = 4 \qquad \Delta x \Delta P = 3{,}55801\hbar \tag{17}$$

Esses resultados nos dizem que o princípio de incerteza foi respeitado.

DUAS PARTÍCULAS IDÊNTICAS NÃO INTERAGENTES NUM BILHAR UNIDIMENSIONAL

Considerando duas partículas idênticas confinadas num bilhar delimitado por potenciais infinitos, com potencial definido pela equação (1). As partículas não interagem e suas massas são iguais e definidas como $m_1 = m_2 = m$.

O estado do sistema agora é definido como $|\psi\rangle = |\psi_1\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ e, para ficar mais claro como se chega nas soluções esperadas, partimos da equação de autovalor independente do tempo.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle = H|\psi_1\rangle\, |\otimes|\, |\psi_2\rangle = E|\psi_1\rangle\, |\otimes||\psi_2\rangle \tag{18}$$

Onde o sinal ($\otimes$) indica o produto tensorial no espaço vetorial de Hilbert (SAKURAI, 1994). Aplicando a base de x_1 e x_2 temos a equação de Schrödinger independente do tempo para duas partículas.

$$-\frac{\hbar^2 \psi_2(x_2)}{2m}\frac{\partial^2 \psi_1(x_1)}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2 \psi_1(x_1)}{2m}\frac{\partial^2 \psi_2(x_2)}{\partial x_2^2} = E\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \tag{19}$$

A função de onda agora é escrita como $\psi = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)$. Resolvendo a equação diferencial pelo método da separação de variáveis para Equações Diferenciais Parciais (COHEN-TANNOUDJI, 1977) obtemos os seguintes resultados para solução geral:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{2}{L} sen\left(\frac{n\pi x_1}{L}\right) sen\left(\frac{n\pi x_2}{L}\right) \tag{20}$$

Os valores esperados para a posição e momento seguem a mesma sequência anterior, mas com as peculiaridades da matemáticas de duas partículas. Os valores esperados para uma das partículas são dados por:

$$\langle x_1 \rangle = \int_0^L x_1 \psi_1{}^*(x_1)\psi_1(x_1)dx_1 \int_0^L |\psi_2(x_2)|^2 dx_2 = \frac{L}{2} \tag{21}$$

Como as partículas são independentes podemos fazer a seguinte consideração:

Os valores esperados para $\langle x_1\rangle$, $\langle x_2\rangle$, $\langle x_1\rangle^2$, $\langle x_2\rangle^2$, $\langle x_1{}^2\rangle$, $\langle x_2{}^2\rangle$, $\langle P_1\rangle$, $\langle P_2\rangle$, $\langle P_1\rangle^2$, $\langle P_2\rangle^2$, $\langle P_1{}^2\rangle$ e

$$
\begin{aligned}
\langle P_1\rangle &= \langle \psi_2\psi_1|\widehat{P_1}|\psi_1\psi_2\rangle = \\
&= \int_0^L\int_0^L \langle \psi_2\psi_1|x_1x_2\rangle\langle x_2x_1|\widehat{P_1}|\psi_1\psi_2\rangle dx_1dx_2 = \\
&= \int_0^L dx_2\int_0^L \psi_1{}^*(x_1)\,\psi_2{}^*(x_2)(-i\hbar)\frac{d[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)]}{dx_1}dx_1 = \\
&= -i\hbar\int_0^L \psi_2{}^*(x_2)\psi_2(x_2)dx_2\int_0^L \psi_1{}^*(x_1)\frac{d\psi_1(x_1)}{dx_1}dx_1 = 0
\end{aligned} \tag{22}
$$

S
a
S
a
Sabendo dessas igualdades, são gerados os mesmos resultados para o desvio.

Assim, o princípio de incerteza de Heisenberg continua sendo respeitado.

CONCLUSÃO

Dois sistemas quânticos foram estudados, um com uma partícula confinada num potencial infinito e outro com duas partículas idênticas no mesmo potencial. As soluções para as equações de Schrödinger são obtidas para uma e para duas partículas não interagentes. Os resultados mostraram que o princípio de incerteza de Heisenberg é respeitado, pois as dinâmicas das duas partículas são independentes- no caso em que não há interação entre elas. O próximo passo a ser realizado é inserir interação entre as partículas e substituí-las por elétrons.

Two electrons in a billiard with soft walls

ABSTRACT

OBJECTIVE: The knowledge of billiard dynamics is applied directly on quantum dots studies. In general classical systems are studied, but the real systems belong to quantum mechanics. In this way, seeks out understand that happened on two interacting electrons dynamics' with spin in a billiard with soft walls. It's needed to know how is the behavior of simpler systems. In this sense, it is studied one particle inside of a infinity potential, called simple quantum billiard. The characteristics of the system are observed when the billiard has two particles without interacting. Through the method of solution of ordinary and partial differential equations, we found the solutions of the time independent Schrödinger equation. We have shown that the expected values for position and momentum are different from zero. The results agree with the literature. The solutions are little known and they show the dynamics of particles are independents. We show that the principle of uncertainty of Heisenberg is sustained for one and two particles in a one-dimensional billiard.

KEYWORDS: Interacting electrons, Quantum billiard, Quantum dynamics.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Fundação Araucária e à Universidade Tecnologia Federal do Paraná, pelo espaço cedido e pelo suporte financeiro. Pedro agradece ao professor orientador, pela escolha do tema tratado nesse trabalho e disponibilidade em agregar conhecendo.

REFERÊNCIAS

COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**. New York: John-wiley, v. 1, 1977.

Liu, X; Braun, G. B.; Qin, M.; Ruoslahti, E.; Sugahara, K. N. **In vivo cation exchange in quantum dots for tumor-specific imaging**, Nat. Commun. 8, 343, 2017.

OLIVEIRA, H. A.; MANCHEIN, C.; BEIMS, M. W. **Soft wall effects on interacting particles in billiards**, Phys. Rev. E, 78, 046208, 2008.

SAKURAI, J. J.; TUAN, S. F. **Modern Quantum Mechanics**. New York: Addison – Wesley, 1994.

Recebido: 31 ago. 2017.
Aprovado: 02 out. 2017.
Como citar:
CHEBENSKI JR., P. et al. Dois Elétrons num bilhar com paredes suaves. In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UTFPR, 22., 2017, Londrina. **Anais eletrônicos...** Londrina: UTFPR, 2017. Disponível em: <https://eventos.utfpr.edu.br//sicite/sicite2017/index. Acesso em: XXX.
Correspondência:
Pedro Chebenski Junior
Rua Doutor Chafic Cury, número 310, Bairro Jardim Carvalho, Ponta Grossa, Paraná, Brasil.