

Física Quântica e Problemas de Equações Diferenciais: Equação de Schrödinger

Quantum Physics and Problems of Partial Differential Equations: Schrödinger Equation

RESUMO

Matheus Rosa Da Luz
matteorosacruz@gmail.com
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

André Fabiano Steklain Lisbõa
steklain@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Christian Manuel Surco Chuño
christiansurco1@hotmail.com
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, Paraná, Brasil

Este trabalho tem por meta proporcionar ao orientando formação em Matemática, através de problemas relacionados principalmente à Equação de Schrödinger. Partimos da formulação conceitual da física quântica. Estudamos as formulações da equação de Schrödinger de uma a três dimensões, até aqui, geralmente, com hamiltoniano independente do tempo, tratando o problema sob as diferentes perspectivas possíveis. Os casos mais relevantes estudados são o do pacote de onda gaussiano, de transmissão ou retardo por reflexão, do potencial periódico, e do oscilador harmônico simples.

PALAVRAS-CHAVE: Palavra um. Palavra dois. Palavra três.

ABSTRACT

This study has by goal to provide for the student qualification on Mathematics, through problems primarily related to Schrödinger Equation. First of all we consider the quantum physics conceptual development. We study the formulations of the Schrödinger equation, until now, from one to three dimensions, where the hamiltonian operator, generally, does not depend on time, dealing with the problem of possible different perspectives. The main studied problems are the gaussian wave packet, the transmission or retarded reflection, the periodic potential and the harmonic oscillator.

KEYWORDS: Quantum Physics. Differential Equations. Schrödinger Equation.

Recebido: 19 ago. 2020.

Aprovado: 01 out. 2020.

Direito autorial: Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



INTRODUÇÃO

A física quântica teve origem ainda no século XIX, quando Planck formulou a ideia da transferência de energia em pacotes mínimos denominados *quanta*, relacionando-os a uma constante universal que hoje leva o seu nome. Partimos de estudos teóricos sobre o desenvolvimento conceitual da física quântica até os modelos usados contemporaneamente. Segundo (HEISENBERG, WERNER, 1990), (HEISENBERG, WERNER, 1949), (JAMMER, MAX, 1966), (JAUCH, J. M, 1968) e (PESSOA JUNIOR, OSVALDO FROTA, 2006), suas implicações, no início do século XX, levaram cientistas como Schrödinger, Bohr, Heisenberg, De Broglie, Einstein, Minkowski, a redefinir as formas de descrever a realidade por meio das ciências, da matemática e da filosofia. Termos como causalidade, certeza/certitude, infinitude precisaram ser redefinidos, e até hoje não há uma teoria hegemônica fechada ou completa para todos os fenômenos que envolvem dualidade onda-partícula, ou complementaridade, embora alguns fenômenos possam ser estudados a ponto de garantir à humanidade alguns avanços tecnológicos, como aumento da velocidade e redução de custos de processadores de computador. De qualquer forma é possível descrever os sistemas quânticos de forma ampla com a teoria da mecânica quântica, que parte de alguns postulados, como o postulado da projeção, que afirma que propriedades físicas observáveis pertencem ao espectro real de um operador auto-adjunto, e resoluções temporárias sobre a física experimental, como a Interpretação de Copenhague.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Partimos do IV postulado da física quântica (LE BELLAC *et al.*, 2013) e (COHEN-TANNOUDJI, *et al* 1980), da equação de evolução temporal de um vetor de estado sob as interpretações de Schrödinger e Heisenberg:

Postulado IV: A evolução temporal do vetor de estado de um sistema quântico fechado é regido pela equação de evolução de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} = H(t)\varphi(t) \quad (1)$$

Postulado IV': O vetor de estado no tempo se deduz do vetor de estado no tempo inicial pela aplicação de um operador unitário, chamado operador de evolução

A primeira formulação é conhecida como diferencial, na qual o estado depende do tempo, mas os operadores só dependem do tempo quando há interação com um campo exterior variável; a segunda como formulação integral, na qual os estados são independentes do tempo mas os operadores dependem do tempo.

Munidos da teoria espectral de operadores hermitianos e

unitários, e do teorema de Stone, que associa ao operador unitário de evolução temporal um operador hermitiano T , chamado de gerador infinitesimal de U , estabelecemos a conexão entre álgebra e análise. O teorema de Wigner, que associa os dois estados ambíguos por uma transformação do sistema físico, como a de Galileu, por exemplo, por meio de um operador unitário ou anti-unitário, nos permite generalizar alguns resultados em relação à grupos de simetria, além de interpretar o sistema por meio da representação projetiva. Operador unitário com gerador infinitesimal hermitiano:

$$U(\alpha) = \exp(i.\alpha.T) \quad (2)$$

Outro é a regra de soma de Thomas-Reiche-Kuhn, para um conjunto enumerável de autovetores do operador hamiltoniano:

$$\sum_n \frac{2m|X_{n0}|}{\hbar^2} (E_n - E_0) = 1 \quad (3)$$

Mostramos que é possível separar o movimento de um sistema de partículas descrito pelo operador hamiltoniano no movimento do centro de massa e o movimento da partícula de massa reduzida, tal como no caso clássico.

$$H = \frac{1}{2\mu} P^2 + \frac{1}{2M} \bar{P}^2 + V(\bar{X}) \quad (4)$$

Discutimos também a necessidade das representações projetivas para a transformação de Galileu.

$$U(\vec{v}) = \exp(-i(\vec{v}.\vec{G})/\hbar) \quad (5)$$

Em seguida, estudamos a diagonalização dos operadores posição X , e momento P , em relação aos espaços das funções quadrado-somáveis de Lebesgue de $\mathbb{R}$, $L^2(\mathbb{R})$ sobre posição e momento, respectivamente, deduzindo a desigualdade de Heisenberg para posição e momento por meio da transformação de Fourier. Podemos então analisar a evolução de um pacote de ondas livre, ou seja, sem energia potencial, além de estudar casos padrão do hamiltoniano na equação de Schrödinger com potencial $V(X)$, ou $V(\vec{R})$, independente do tempo em $\mathbb{R}$ e $\mathbb{R}^3$, sob a hipótese de conservação de corrente de probabilidade. Estudamos então três casos, o da reflexão e transmissão por um passo potencial, o poço quadrado e cúbico, e a difusão por um potencial. Além disso, introduzimos os estudos em mecânica ondulatória por meio do teorema de Bloch(ou Floquet), para o caso de um potencial periódico. Analisamos também o caso da equação de Schrödinger independente do tempo em $\mathbb{R}^3$ deduzindo sua fórmula de conservação de corrente de probabilidade. Estudamos a dedução da regra de ouro de Fermi por meio do conceito de densidade de níveis energéticos.

Outros resultados interessantes podem ser discutidos. Deduzimos a desigualdade de Heisenberg para posição e momento usando a diagonalização dos respectivos operadores com a hipótese do espaço de estados estar contido no espaço

das funções quadrado-somáveis de Lebesgue, $L^2(\mathbb{R})$, sem a necessidade da transformação de Fourier. Através de relações de comutação canônicas entre os operadores de posição e momento deduzimos fórmulas para explicar o espalhamento de um pacote de ondas. Em seguida analisamos o caso de um pacote de ondas livre gaussiano, calculando a função de estado em função de um estado inicial, bem como sua fórmula exata, além de determinar sua dispersão em posição. Fórmula de um pacote de onda gaussiano:

$$A(k) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{(k - \bar{k})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (6)$$

No caso de um passo potencial calculamos os coeficientes de reflexão e transmissão, para explicar justamente o atraso por reflexão, sob a hipótese de conservação de corrente de probabilidade.

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2, \quad T = 1 - R = \frac{4kk'}{(k + k')^2}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (7)$$

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (8)$$

No mesmo problema discutimos o caso em que a partícula tem energia menor que a do passo potencial, calculando a variação da fase em relação à energia

$$\frac{d\phi}{dE} = \frac{1}{V_0 - E} \quad (9)$$

Ainda nesse problema calculamos os coeficientes de reflexão e transmissão supondo o pacote de ondas gaussiano

$$R = \left(\frac{\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int dk \cdot e^{-(k+\bar{k})\sigma^2} \left(\frac{k+\kappa}{k-\kappa}\right)^2 \quad (10)$$

$$T = \left(\frac{\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int dk \cdot e^{-(k+\bar{k})\sigma^2} \left(\frac{4k^2}{(k+\kappa)^2 \cdot \kappa}\right) \quad (11)$$

Calculamos ainda os níveis de energia para um poço cúbico infinito:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x + 1}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y + 1}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z + 1}{L_z}\right)^2 \right] \quad (12)$$

Bem como deduzimos a fórmula de conservação de corrente de probabilidade em três dimensões:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (13)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\frac{\hbar}{im} \varphi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, t) \right] \quad (14)$$

O primeiro resultado a citar é uma relação de equivalência

entre matrizes de rotação do grupo $SO(3)$ e o grupo $SU(2)$, a ideia é estudar grupos e álgebras de Lie, bem como algebroides de Courant, e representação de grupos, tanto conforma a abordagem de Heisenberg, de evolução unitária, como para o estudo dos espaços soluções de diferentes formulações da equação de Schrödinger.

Provamos também a equivalência entre as equações do movimento de uma partícula carregada, de carga q constante, dadas pelo operador lagrangiano e as equações de Euler-Lagrange, e as equações dadas pela lei de Lorentz não-relativista:

$$H_{cl} = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\bar{V} \quad (15)$$

$$m\ddot{x}_k = q(E_k + (v \times B)_k) \quad (16)$$

Isso para descrever casos do operador hamiltoniano, nesse caso específico o hamiltoniano em um campo magnético, para ilustrar e comparar as teorias clássica, "semi clássica" e quântica, entre outras.

Paralelamente, mas não de forma independente, estudamos análise e teoria de EDO's e EDP's, com principais referenciais teóricos sendo (PERKO, LAWRENCE, 2001) e (EVANS, LAWRENCE C, 2010), já temos estudos em andamento sobre sistemas dinâmicos quânticos caóticos limitados e independentes do tempo, que nos dá métodos que permitem descrever o regime do limite "semiclássico", conforme (OTT, EDWARD, 1993) .

O projeto também envolve estudar publicações recentes sobre o tema Equação de Schrödinger, dos pontos de vista analítico, como em (CONAY, KERAN, 2017), e numérico, tal como em (FOJÓN, O., GADELLA, M. LARA, L.P, 2010). Os selecionados para o evento envolvem a referida equação para um poço com paredes não inerciais. Além disso há um grupo de estudos de neutrinos de cooperação científica interinstitucional, visando, entre outros objetivos, a interpretação dos dados do experimento DUNE

REFERÊNCIAS

COHEN-TANNOUDJI. DIU, B. LALOË, F. **Mécanique quantique**, Hermann, Paris. 1980.

CONAY, KERAN.. **The infinite Potential Well With Moving Walls**. University College Cork, 2017.
<https://arxiv.org/abs/1703.05282>

EVANS, LAWRENCE C. **Partial Differential Equations**. Second Edition. Graduate Studies in Mathematics 19. American Mathematical Society, 2010.

FOJÓN, O., GADELLA, M. LARA, L.P. **The Quantum Square Well With Moving Boundaries: A Numerical Analysis**. Computers and Mathematics with Applications 59 (2010) pp. 964-976.
<https://arxiv.org/abs/1703.05282>

HEISENBERG, WERNER. **Physics and Philosophy**: The Revolution in Modern Science. Translation and preface by Paul Davies Penguin Books, 1990.

HEISENBERG, WERNER. **The Physical Principles of The Quantum Theory**, Translated by Paul Eckart and F. C. Hoyt. Dover Publications, Inc. New York, 1949.

JAMMER, MAX. **The Conceptual Development of quantum Mechanics**, International Series in Pure and Applied Physics. McGraw-Hill, Inc. New York, 1966.

JAUCH, J. M. **Foundations of Quantum Mechanics**, Addison Wesley, Reading, London, 1968.

LE BELLAC, MICHEL. COHEN-TANNOUDJI, CLAUDE. LALOË, FRANCK. **Physique Quantique**, Tomes I et II: Fondements, 3ème édition. SAVOIRS ACTUELS, EDP Sciences/CNRS Éditions, 2013, Paris.

OTT, EDWARD. **Chaos in Dynamical Systems**, Cambridge University Press, 1993.

PERKO, LAWRENCE. **Differential Equations and Dynamical Systems**. 3rd edition. Texts in Applied Mathematics 7. Springer 2001.

PESSOA JUNIOR, OSVALDO FROTA. **Conceitos de Física Quântica**, volumes I e II. Editora Livraria da Física, São Paulo 2006, 3 a edição.