Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 19

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 114
rizzutto@if.usp.br

1o. Semestre de 2014
Monitor: Gabriel M. de Souza Santos

Página do curso:
http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=2905

14/05/2014

OPERADORES – OBSERVÁVEIS RESUMIDAMENTE

1- no caso da posição o operador é o próprio valor da posição:

$$\hat{x} \Leftrightarrow x$$

2 - no caso do momento, operador é dado por:

$$\hat{p} \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\overline{p} =< p >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t) dx$$

3 - no caso da energia, operador é dado por:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\overline{E} =< E >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x,t) dx$$

OBSERVÁVEIS - VALOR ESPERADO

Temos então que o valor esperado de qualquer grandeza que depende da posição, do momento, da energia pode ser determinado através de:

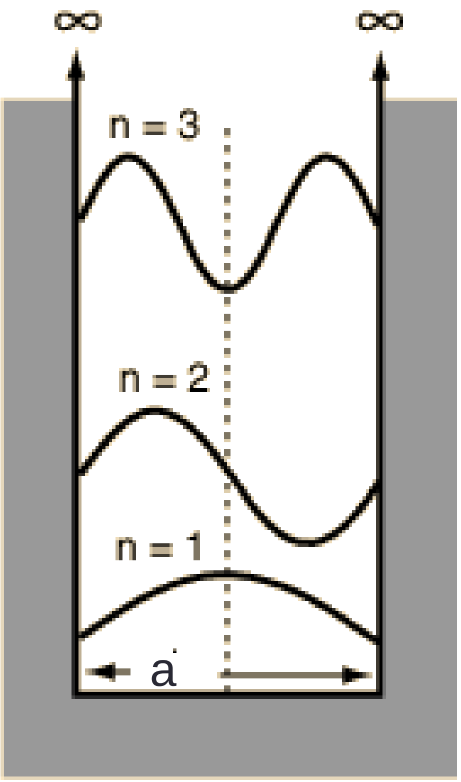
$$\bar{f}(x, p, E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\, \hat{f}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(x,t)\,dx$$

O valor médio de uma grandeza em mecânica quântica é normalmente chamado de valor esperado, que é o valor que se espera obter de uma medida daquela grandeza.

Observe que não esperamos necessariamente que o valor de uma medida que tenha uma alta probabilidade seja igual ao valor esperado.

Elétron em uma caixa

Podemos associar a probabilidade de localizar a partícula em um estado com menor energia usando uma função de onda para o elétron (associar ao elétron uma onda cossenoidal)



Função de onda

$$\Psi(x) = A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, n = 1,2,3\ldots$$

A probabilidade que a partícula seja encontrada em um ponto na coordenada x entre –a/2 e a/2 é :

$$P(x) = \left|\Psi(x)\right|^2 dx$$

$$P(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)dx$$

$$\Psi_n^2(x) = A^2\cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

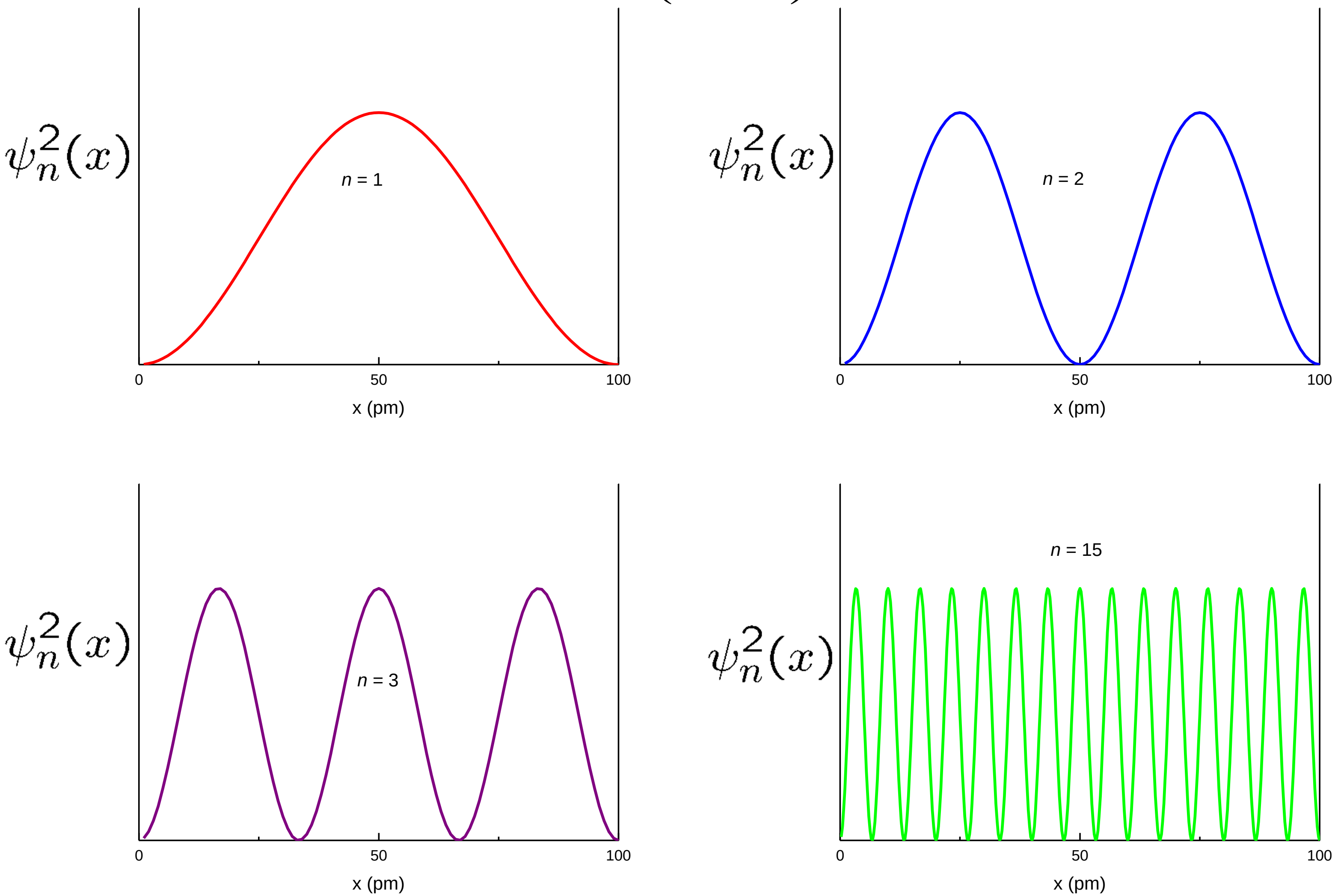
$$P(x) = \int_{-a/2}^{+a/2} A^2\cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

Onda fixa nas ponta separada por uma distância a, terá λ/2 comprimentos de onda:

$$a = \frac{n\lambda}{2}$$

Elétron em uma caixa

$$\Psi_n^2(x) = A^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right), n = 1,2,3...$$



Já que a partícula deve ser encontrada em algum lugar ao longo do eixo x, a soma das probabilidade sobre todos os valores de x deve ser 1.

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

Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

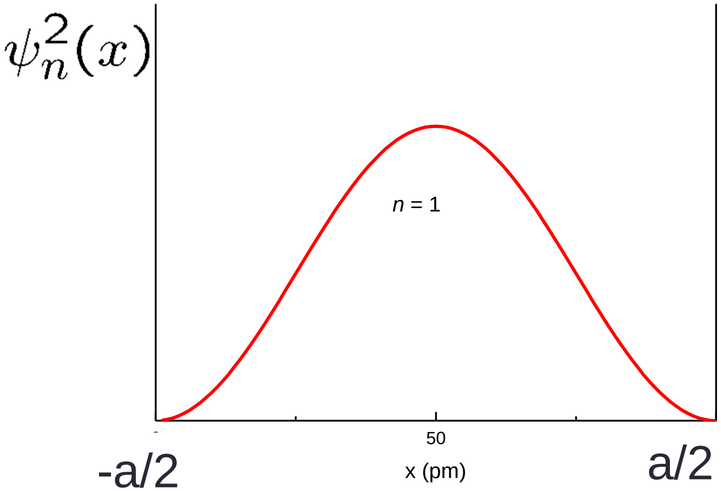
No nosso caso:

$$P(x) = \int_{-a/2}^{+a/2} A^2 \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = 1$$

Mudança de variável

$$\theta = \frac{\pi}{a}x$$

$$d\theta = \frac{\pi}{a}dx$$



$$P(x) = A^2 \frac{a}{\pi} \int_{-a/2}^{+a/2} \cos^2\theta\, d\theta = 1$$

$$\frac{\pi}{2}$$

$$A^2 \frac{a}{\pi}\frac{\pi}{2} = 1$$

$$\boxed{A = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

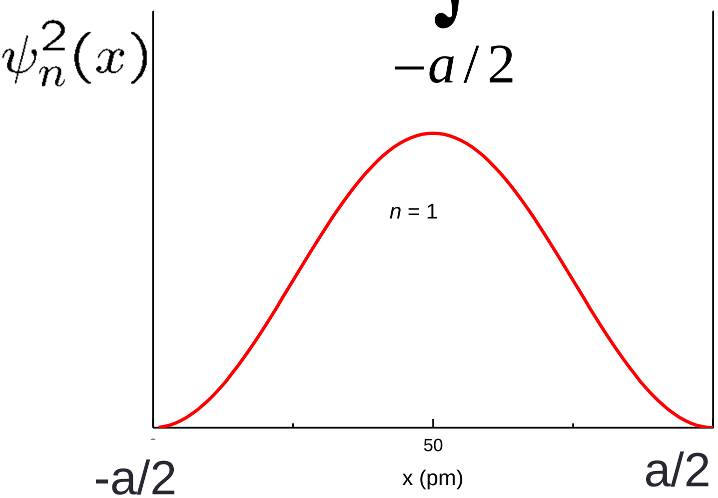
Constante de normalização

Qual o valor médio do momento para a função de onda do estado fundamental da partícula dentro desta caixa:

$$\Psi(x) = A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, n = 1,2,3\ldots$$

$$\bar{x} = \int_{-a/2}^{+a/2} xP(x,t)dx = \int_{-a/2}^{+a/2} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$$



$$\bar{x} = \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} x\cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx$$

Função ímpar Função par

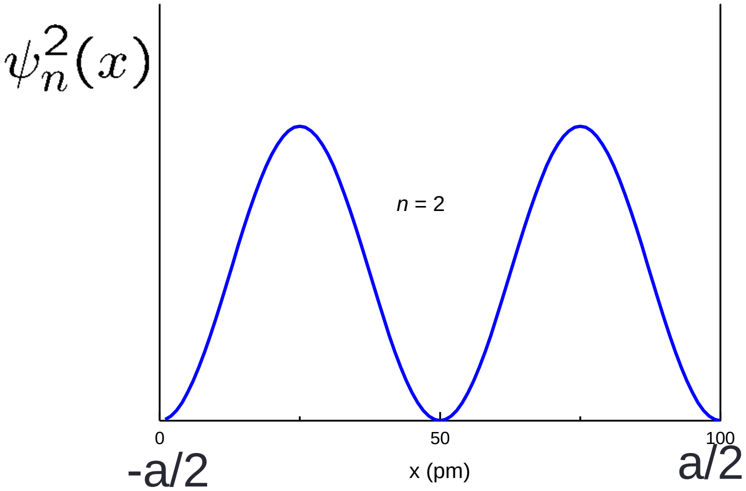
Como a integral é sobre um valor ímpar em uma região simétrica a integral é nula

$$\boxed{\bar{x} = \langle x \rangle = 0}$$

O valor médio da posição do elétron na caixa no estado n=1 é em x=0

Elétron em uma caixa

$$\Psi_n^2(x) = A^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right), n = 1,2,3...$$



$$\bar{x} = A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} x \cos^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) dx$$

Função ímpar

Função par

Como a integral é sobre um valor ímpar em uma região simétrica a integral é nula

$$\bar{x} = \langle x \rangle = 0$$

O valor médio da posição do elétron na caixa no estado n=2 é em x=0

Observe que não esperamos necessariamente que o valor de uma medida que tenha uma alta probabilidade seja igual ao valor esperado.

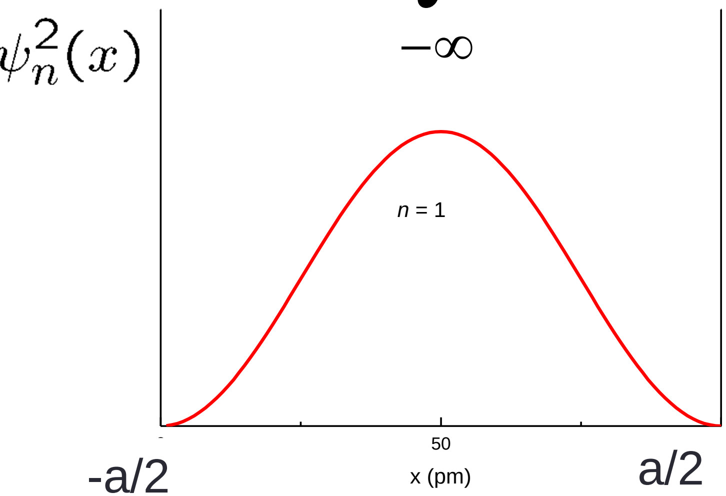
Qual o valor médio do momento da partícula dentro desta caixa:

$$\Psi(x) = A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, n = 1,2,3...$$

Vimos que :

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} pP(x,t)dx = \int_{-a/2}^{+a/2} \Psi^*(x,t)\, p\Psi(x,t)dx$$



$$\overline{p} = \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\cos\frac{\pi}{a}x)\right)dx$$

$$\overline{p} = (-i\hbar)\frac{2}{a}\frac{\pi}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\left(-sen\frac{\pi}{a}x\right)dx$$

Função par

Função impar

$$\boxed{\overline{p} = < p > = 0}$$

Como a probabilidade da partícula estar se movendo no sentid positivo do eixo x é igual a probabilidade de estar se movendo no sentido oposto, o momento médio é nulo.

Qual o valor médio do momento ao quadrado da posição da partícula dentro desta caixa:

$$\Psi(x) = A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$-\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}, n = 1,2,3...$$

Sabemos que:

$$\hat{p} \Leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{p}^2 \Leftrightarrow \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\hbar^2\left(-\frac{\pi^2}{a^2}\right)\psi$$

$$\left\langle p^2\right\rangle = \hbar^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\int_{-a/2}^{+a/2}\psi^*\psi dx$$

vale 1

$$\boxed{\left\langle p^2\right\rangle = \hbar^2\frac{\pi^2}{a^2}}$$

O momento médio quadrático:

$$\boxed{\sqrt{< p^2 >} = \frac{\hbar\pi}{a}}$$

Que é uma medida das flutuações em torno da média, pois a partícula pode ser encontrada com momento

$$p = +\sqrt{2mE}$$

ou

$$p = -\sqrt{2mE}$$

Qual o valor da energia cinética média?

Vimos que:

$$\boxed{\left\langle p^2 \right\rangle = \hbar^2 \frac{\pi^2}{a^2}}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{\pi^2}{a^2} = \frac{h^2}{8ma^2}$$

que é o valor que havíamos determinado anteriormente por Sommerfeld

O mesmo vale para o $<x^2>$?

$$\boxed{< x^2 > = \frac{a^2}{2\pi^2}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) = 0.033a^2}$$

Que não é zero embora $<x> = 0$.

$$\sqrt{< x^2 >} = 0.18a$$

Posição média quadrática, considerada como uma medida das flutuações em torno da média.

As flutuações existem porque a partícula não é sempre encontrada na mesma posição mas em várias posições.

$$\Delta p \Delta x = \sqrt{< p^2 >}\sqrt{< x^2 >} = 0.18a\frac{\hbar\pi}{a}$$

consistente com o limite de $\frac{\hbar}{2}$ ← $\Delta p \Delta x = 0.57\hbar$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

A mecânica clássica não pode ser utilizada em sistemas nos quais as características de onda das partículas são manifestadas. Para entender as trajetórias destas partículas que mostram propriedades ondulatórias necessitamos de uma nova mecânica (chamada mecânica quântica)

Da segunda lei de Newton:

$$F = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

A solução desta equação é consistente com os experimentos em várias situações físicas

No lugar das equações de movimento da mecânica clássica da qual a posição exata da partícula no espaço a cada momento pode ser calculada, usaremos a mecânica quântica que fornece funções de onda que contem tudo que pode ser conhecido sobre a partícula de acordo com o principio de incerteza

As funções de onda da mecânica quântica podem ser derivada de equação diferencial fundamental conhecida como Equação de Schrödinger, que possui o mesmo status da equação da mecânica clássica de Newton. É um postulado que não tem descrição "*a priori*", somente é consistente as solução desta e o experimento.

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Esperamos que a Equação de Schrödinger incorpore os seguintes princípios fundamentais:

- A conservação de energia: este principio é tão básico que sua exclusão é impensável.
- A hipótese de de Broglie: mecânica quântica esta especificamente relacionada a partículas que mostram distintas propriedades de ondas.

O princípio de conservação de energia é definido pela equação:

$$E = E_c + E_p \qquad E_c = \frac{p^2}{2m}$$

Substituindo a equação de de Broglie:

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad E_c = \frac{h^2}{2\lambda^2 m}$$

Vamos assumir, por simplicidade, que a parte da função de onda da partícula independente do tempo, em uma dimensão, pode ser escrita como:

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

$$\psi = Asenkx \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

A derivada segunda desta equação é:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A\sin kx = -k^2\psi$$

$$E_c = \frac{h^2}{2\lambda^2 m} = E - E_p$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi$$

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2(E - E_p)m}$$

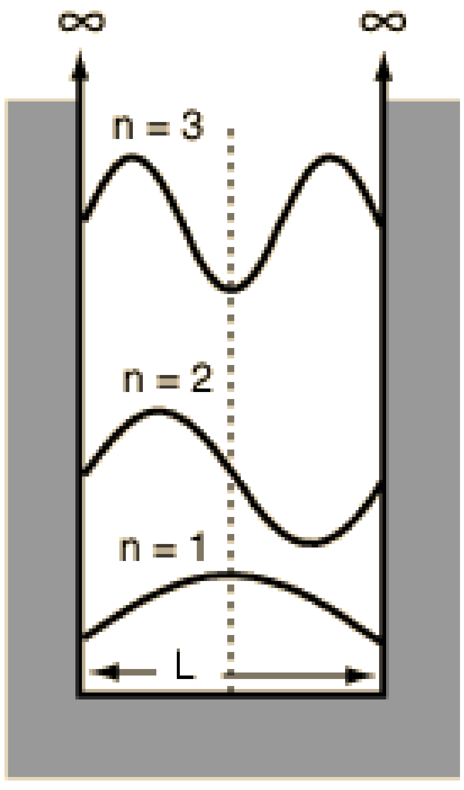
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -4\pi^2 \frac{2(E - E_p)m}{h^2}\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_p)\psi$$

Esta equação é a forma unidimensional da **equação de Schrödinger** independente do tempo

Exercício: Partícula dentro de uma caixa

Uma partícula se encontra no estado fundamental dentro de um poço quadrado infinito de comprimento L. Calcule a probabilidade que esta partícula seja encontrada entre X=L/4 e x=3L/4



x = 0 at left wall of box.

A densidade de probabilidade é dado por: $\left|\Psi_n^2(x)\right|$

$$\Psi_n(x) = A sen\left(\frac{n\pi}{L}x\right), 0 \leq x \leq L,$$

Normalização:

$$1 = \int_0^L |\psi_n|^2 dx = \int_0^L A^2 sen^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx$$

$$\boxed{2sen^2\theta = 1 - \cos 2\theta}$$

$$1 = \frac{A^2}{2}\int_0^L 1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)dx$$

$$1 = \frac{A^2 L}{2}$$

$$\boxed{A = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

O seno se anula para os extremos da integral:

Exercício: Partícula dentro de uma caixa

Uma partícula se encontra no estado fundamental dentro de um poço quadrado infinito de comprimento L. Calcule a probabilidade que esta partícula seja encontrada entre X=L/4 e x=3L/4

A função de onda do estado fundamental é dada por: $\Psi_1(x) = Asen\left(\frac{\pi}{L}x\right), 0 \le x \le L,$

$$P(x) = \int_{L/4}^{3L/4} |\psi_1|^2 dx = \int_{L/4}^{3L/4} A^2 sen^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx$$

$$P(x) = \frac{2}{L}\frac{1}{2}\int_{L/4}^{3L/4} 1 - \cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)dx$$

$$P(x) = \frac{1}{L}\left[x - \frac{L}{2\pi} sen\frac{2\pi}{L}x\right]_{L/4}^{3L/4}$$

$$P(x) = \frac{1}{L}\left[\left(\frac{3L}{4} - \frac{L}{4}\right) - \frac{L}{2\pi}\left(sen\frac{2\pi}{L}\frac{3L}{4} - sen\frac{2\pi}{L}\frac{L}{4}\right)\right]$$

$$P(x) = \frac{1}{L}\left[\left(\frac{2L}{4}\right) - \frac{L}{2\pi}(-1-1)\right]$$

$$P(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} = 0.818$$

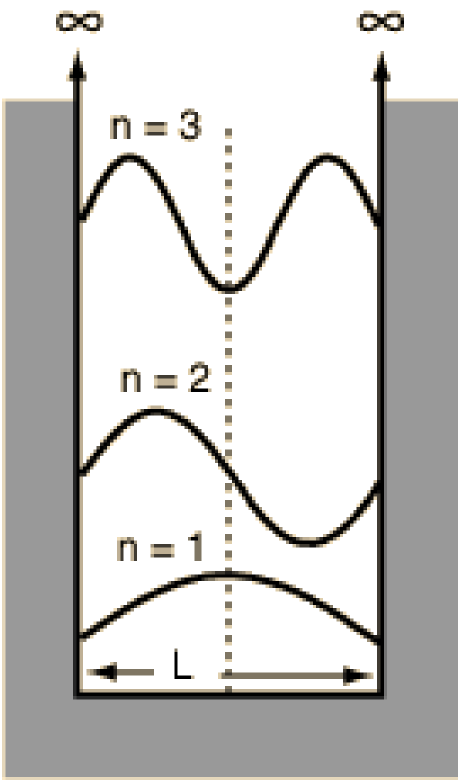
É maior que ½ o qual é esperado para uma partícula clássica que gasta tempos iguais em todas as partes dentro da caixa

Exercício:

Uma partícula dentro da caixa
De tamanho L

$$\Psi_n(x) = A sen\left(\frac{n\pi}{L}x\right), 0 \le x \le L,$$

A densidade de probabilidade é dado por: $P(x) = \left|\Psi_n^2(x)\right|$

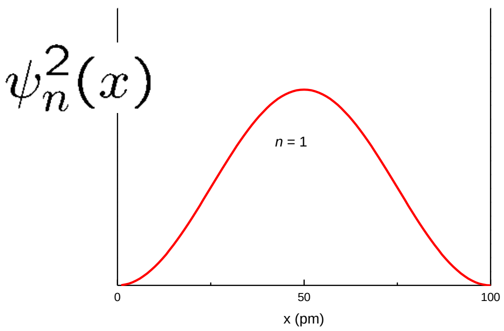


x = 0 at left wall of box.

Normalização:

Primeiro estado:

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$



$$\Psi_1^2(x) = \frac{2}{L} sen^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

O valor mais provável de x, é dado pelo valor de x onde P(x) é máxima:

$$x_{mp} = \frac{L}{2}$$

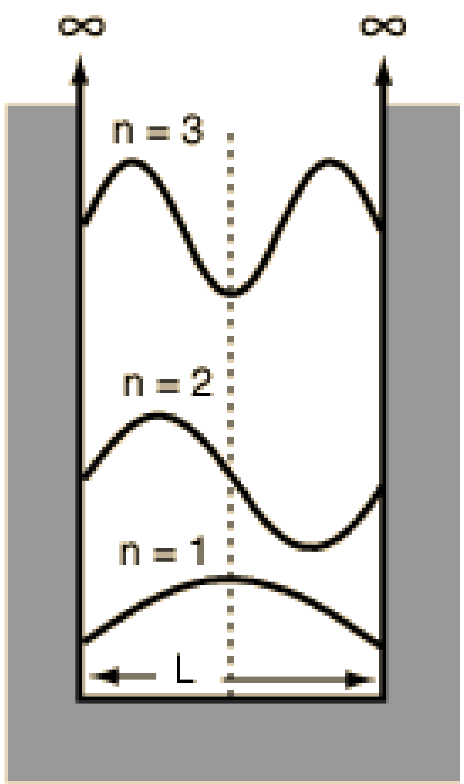
$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx$$

Exercício:

Uma partícula dentro da caixa
De tamanho L (estado fundamental)

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, sen\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

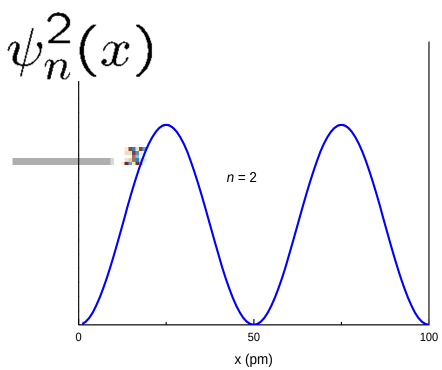
Qual o valor médio da posição: <x>



x = 0 at left wall of box.

$$\bar{x} = \frac{2}{L}\int_0^L x\, sen^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)dx \qquad \bar{x} = \langle x \rangle = \frac{L}{2}$$

Segundo estado excitado $\quad \Psi_2^2(x) = \frac{2}{L}\, sen^2\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$



O valor mais provável de x, é dado pelo valor de x onde P(x) é máxima:

$$x_{mp} = \frac{L}{4}\, e\, \frac{3L}{4} \qquad \bar{x} = \langle x \rangle = \frac{L}{2}$$