Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 21 -

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

28/05/2014

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Teoria de Schrödinger

- Deve ser consistente com as hipóteses de de Broglie
- Deve reproduzir a conservação de energia
- Devemos ter uma equação de onda que governa o movimento de elétrons e outras partículas com massa de repouso diferente de zero

Função de onda de uma partícula livre

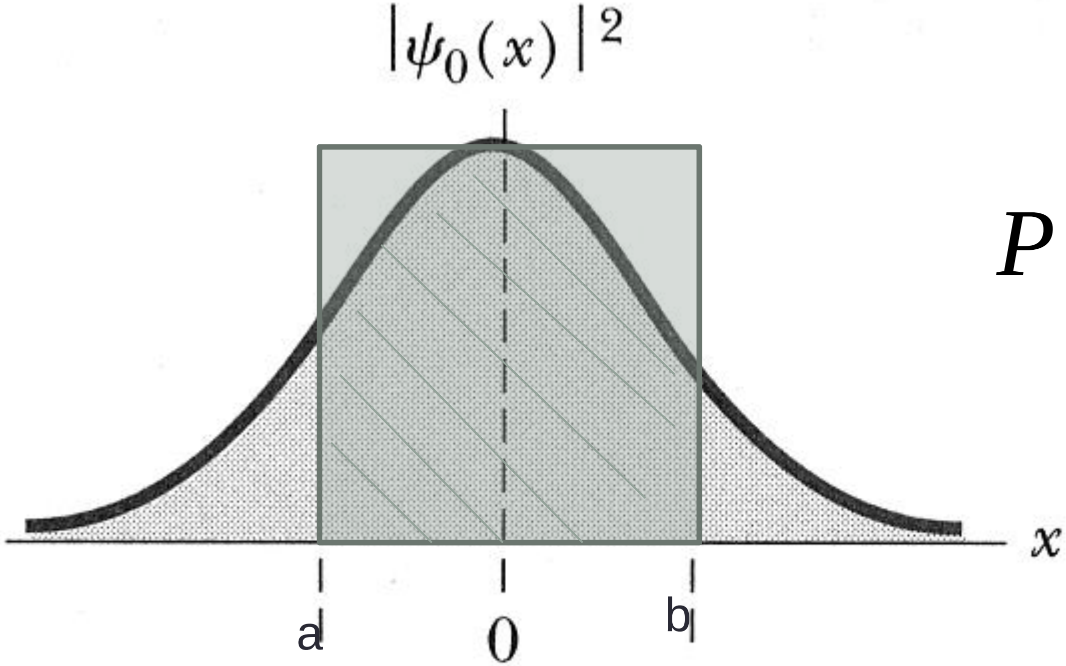
- A função de onda é uma função complexa, então não podemos medi-la diretamente
- Ela deve ser “lida” como um mecanismo para obter as grandezas mensuráveis de interesse (conhecemos como observáveis)

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.

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

Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

A probabilidade de uma partícula estar no intervalo a=<x<=b esta relacionado área embaixo da curva de a até b de uma função densidade de probabilidade $\left|\Psi(x,t)\right|^2$



$$P = \int_a^b \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx =$$

o área embaixo da curva entre a e b

Probabilidade

Em 1925-1926 Max Born propôs como relacionar a Ψ (função de onda) com o comportamento das partículas que ela descreve:

A probabilidade que a partícula seja encontrada no instante t em uma coordenada entre x e x+dx é :

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

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

Ψ não é uma quantidade mensurável, mas o seu módulo ao quadrado é mensurável e é justamente a probabilidade por unidade de comprimento ou densidade de probabilidade P(x) para encontrar a partícula no ponto x no tempo t.

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:

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

A forma mais geral da **equação de Schrödinger dependente do tempo** para uma partícula que se move em um potencial em uma dimensão:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

Nosso objetivo é resolver esta equação para diversas formas de V(x,t)

Inicialmente vamos pensar na partícula livre que não age nenhuma força

$$\psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}ou$$

$$\psi(x,t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

$$p=\frac{h}{\lambda}=\frac{\hbar 2\pi}{\lambda}=\hbar k$$

$$E=h\nu=\hbar 2\pi\nu=\hbar\omega$$

$$k=\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\left(\frac{i}{\hbar}p\right)\left(\frac{i}{\hbar}p\right)Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

Equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\psi(x,t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}EAe^{-\frac{i}{\hbar}(px-Et)}=-\frac{i}{\hbar}E\psi$$

Substituindo e usando V(x,t) = Vo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{p^2}{\hbar^2}\right)\psi(x,t)+V_0\psi(x,t)=i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\right)E\psi(x,t)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m}\right)\psi(x,t)+Vo\,\psi(x,t)=E\psi(x,t)$$

$$\left(\frac{p^2}{2m}\right)+Vo=E$$

Energia total da partícula se conserva

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

Geralmente estudaremos os casos que correspondem a situações de onda estacionária:

átomo de hidrogênio,

Partículas em uma caixa

Oscilador harmônico

Nestes casos o potencial V não depende explicitamente do tempo V(x,t)=V(x) – Utilizaremos neste caso a ideia de separação de variáveis:

$$\Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Cuja parte espacial, chamada de autofunção é obtida pela equação diferencial:

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

A densidade de probabilidade neste caso: :

$$\Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

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

$$P(x,t)dx = \psi^*(x)e^{+\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}dx$$

$$P(x,t)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$$

Ou seja não depende do tempo. Essas soluções são chamadas de estados estacionários

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

Para ter sentido físico, devemos impor várias condições

- As funções de onda e sua primeira derivada, para serem soluções aceitáveis precisam:
    - Ser finita (não podemos aceitar que $\psi(x) = \infty; x \to 0$ partícula tem que ter ser movimento em uma região do espaço
    - Ser unívoca (a função de onda não pode ter múltiplos valores)
    - Se contínua (pois se temos funções descontínuas as derivadas serão infinitas nos pontos de descontinuidade)
- Essas condições são necessárias para que as funções de onda representem os observáveis de maneira adequada

Agora vamos ver alguns casos e aplicações