Instituto de Física USP

Física Moderna Aula 23

Professora: Mazé Bechara

Aula 23 – Bases da Mecânica quântica e equações de Schroedinger: para todos os estados e para estados estacionários. Aplicação e interpretações.

1. Mais sobre as bases da Mecânica Quântica: postulados com base na interpretação de Copenhague: valores esperados de grandezas físicas, equações de auto-valores com operadores que representam grandezas físicas, o significado da normalização das funções de onda . A equação geral da mecânica quântica não relativística no formalismo de Schroedinger.

2. Estados estacionários na mecânica de Schroedinger – um conjunto de soluções possíveis para os potenciais conservativos na física clássica. Ou a equações de Schroedinger independente do tempo; ou os auto-estados de energia ; ou os estados de energia constante.

Mecânica Ondulatória para a partícula:
A Interpretação Estatística de Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

cópia do capítulo na Xerox

Postulado 01: o estado dinâmico de uma partícula pode ser descrito por uma **função de onda espaço-temporal** $\Psi(\vec{r},t)$ que permite extrair (todas) **informações** sobre a dinâmica da partícula.

Postulado 02: O que tem siginificado físico direto não são as funções de onda espaço-temporais $\Psi(\vec{r},t)$, que podem até ser funções imaginárias. **O significado físico está na grandeza** $|\Psi(\vec{r},t)|^2$.

O módulo ao quadrado da função de onda se relaciona com a **densidade de probabilidade,** ou seja**,** no caso de movimentos vale a relação**:**

$$\rho(x,y,z,t) = \frac{dP(\vec{r},t)}{dV} = |\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

dP($\vec{r}$,t) é a probabilidade de **uma única** partícula estar na posição $\vec{r}$, dentro do volume dV =dxdydz (em coordenadas cartesianas), no instante t, por unidade de dV.

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Analogamente, para os movimentos **bidimensional e unidimensional** a relação do módulo ao quadrado da função de onda é com a densidade superficial e a densidade linear de probabilidade, **respectivamente**:

$$\sigma(x,y,t) = \frac{dP(\vec{r},t)}{dA} = |\Psi(\vec{r},t)\,|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

$$\lambda(x,t) = \frac{dP(x,t)}{dx} = |\Psi(x,t)\,|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$

Postulado 3. Há uma outra função de onda que também define **o estado dinâmico** da partícula e a função de onda momento linear-temporal $\Phi(\vec{p},t)$ que **analogamente tem seu quadrado do módulo definido por:**

$$\rho(p_x,p_y,p_z,t) = \frac{dP(\vec{p},t)}{d\vec{p}} = |\Phi(\vec{p},t)|^2 = \Phi^*(\vec{p},t)\Phi(\vec{p},t)$$

probabilidade da partícula ter momento linear $\vec{p}$, dentro do volume $d\vec{p} = dp_x dp_y dp_z$, por unidade de $d\vec{p}$

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 3. As funções de onda $\Psi(\vec{r},t)$e $\Phi(\vec{p},t)$ **são a transformada de Fourier uma da outra,** ou seja, ao se conhecer uma a outra pode ser determinada pela transformada de Fourier. **O vínculo entre as duas funções de onda vem das relações de incerteza,** que relaciona a indeterminação de cada coordenada com o momento linear naquela direção.

Postulado 4. Quando se descreve a dinâmica da partícula pelas funções de onda espaço real $\Psi(\vec{r},t)$ **as grandezas físicas que dependem somente da posição são representadas pelas mesmas funções que na Física clássica.**

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 5. As grandezas que dependem da velocidade, **quando utilizadas as funções espaço-temporais, devem ser representadas por operadores diferenciais,** construídos **a partir das expressões clássicas que definem a grandeza física, substituindo o momento linear pelo operador diferencial:**

Vetorialmente: $$\hat{\vec{p}} = \hat{p}_x\vec{i} + \hat{p}_y\vec{j} + \hat{p}_z\vec{k} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} - i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\vec{j} - i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$$

Em Componentes: $$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Razão do Postulado 5: O **valor esperado ou valor médio** de uma grandeza física $\vec{f}(\vec{p})$ que depende do momento linear pode ser determinado com uso da função de onda do **espaço real-tempo** da seguinte forma:

$$\langle \vec{f}(\vec{p}) \rangle = \int |\Phi(\vec{p},t)|^2 \vec{f}(\vec{p}) d\vec{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\vec{r},t)\, \hat{\vec{f}}(\hat{\vec{p}}) \Psi(\vec{r},t)\, dV$$

Observe que:

1. *o operador $\vec{f}(\vec{p})$ é obtido substituindo-se na expressão clássica da grandeza física $\vec{f}(\hat{\vec{p}})$ o momento linear pelo operador $\hat{\vec{p}}$.*

Interpretação física: a média é o resultado que a teoria prevê para várias medidas da grandeza física $\vec{f}(\vec{p})$ no mesmo estado quântico.

Valem relação e interpretação similares de f para grandeza escalar.

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 6. Se a grandeza física depender da posição e do momento linear, como por exemplo, o momento angular, vale a mesma regra de construção de operador da grandeza física, com a "complicação" que o operador dependerá de posição e de operadores diferenciais de posição.

Obs. ***nessa disciplina só usaremos a função de onda no espaço real*** $\Psi(\mathbf{r},t)$ *já que trabalharemos com a mecânica quântica no formalismo de Schroedinger.*

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 7: Quando uma grandeza física (F) obedece a equação do tipo:

$$\hat{F}(\vec{r},\vec{p})\Psi(\vec{r},t) = f_0\Psi(\vec{r},t)$$

Que é conhecida em matemática como **equação de auto-valores**, então $\Psi(\vec{r},t)$ é chamada de auto–função da grandeza física F e a constante f_o o auto-valor:

Se (e só se**) o auto-valor f_o for real**, se interpreta que a grandeza física F na dinâmica quântica descrita pela função de onda Ψ é **uma constante de movimento,** ou seja, **F não muda de valor, e este valor (constante) é f_o em qualquer medida**. Essa definição vale da mesma forma para grandezas vetoriais.

Obs. Esta equação é a equação da autovalor e a função é chamada de auto-função da matemática. Mas na matemática o autovalor pode ser imaginário.

A equação básica da Mecânica Quântica no formalismo de Scroedinger

Postulado 8.

$$\widehat{H}\Psi(\vec{r},t) \equiv [\hat{E}_c + U(\vec{r},t)]\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)$$

•Usando o postulado 5 para determinar o operador energia cinética:

$$\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r},t)\}\Psi(\vec{r},t) = \{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\}\Psi(\vec{r},t)$$

No caso de movimento unidimensional:

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

A equação de Schroedinger é compatível com o princípio de incerteza ou de indeterminação de Heisenberg e as relações de de Broglie.

A equação de Schroedinger para todas as partículas em movimento não relativístico

$$\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r},t)\}\Psi(\vec{r},t) = \{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\}\Psi(\vec{r},t)$$

Propriedades das funções de onda decorrentes da interpretação probabilística

1. As **<u>funções de onda</u>** devem ser: **<u>unívocas,</u>** porque a probabilidade (módulo ao quadrado das funções) em cada ponto tem que ter valor único; **<u>contínuas,</u>** porque as probabilidades não podem ter valores indefinidos em algum ponto do espaço; **<u>finitas em todos os pontos</u>** do espaço, porque probabilidades são finitas.

2. As **funções de onda de estados ligados** (que descrevem partículas que ocupam região finita do espaço) devem ser **normalizadas**, ou seja , a probabilidade de estar em ponto de todo o espaço deve ser 1:

$$\iiint |\Psi(\vec{r},t)\ |^2 dV = 1 \Rightarrow \Psi(\pm\infty,t) = 0$$

Para que seja possível a normalização acima, é obrigatório que a função de ondaa tenda a zero quando as coordenadas tendem a infinito.

Propriedades das funções de onda decorrentes da interpretação probabilística

2. Observação importante:

No caso de **estados não ligados**, nos quais a partícula têm probabilidade não nula de ir a posições no infinito (infinitamente longe da origem do potencial de interação), **a função de onda deve ser finita em qualquer ponto. Porém a possibilidade de ocupar um espaço infinito torna a função de onda não normalizável**.

O que se impõe, nestas situações físicas, é **a conservação da partícula, ou seja, que ela esteja em algum lugar do espaço infinito – não desapareça! (a ser discutido como se faz posteriormente)**

A equação de Schroedinger independente do tempo e os estados estacionários

$$\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r})\}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

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

$$\{ih\frac{d}{dt}\}T(t) = ET(t)$$

$$\frac{dT}{T} = -i\frac{E}{\hbar}dt \rightarrow \int_{T_o}^{T}\frac{dT}{T} = \int_0^t - i\frac{E}{\hbar}dt \rightarrow T(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$