Física Moderna I Aula 12

Marcelo G Munhoz Edifício HEPIC, sala 202, ramal 916940 <u>munhoz@if.usp.br</u>

Limitações da "Antiga" Teoria Quântica

- A teoria só trata de sistemas periódicos (regra de quantização de Wilson-Sommerfeld)
- Não é capaz de prever a taxa de transição entre estados quânticos
- É bem sucedida na descrição de átomos de um único elétron
- Apresenta "lacunas conceituais"

Limitações da "Antiga" Teoria Quântica

- A hipótese de de Broglie associa propriedades ondulatórias com a matéria mas não diz como essas propriedades evoluem no tempo e espaço, ou seja, não determina de maneira exata a função de onda
- Ela também não diz como tratar sistemas em que o comprimento de onda não é constante, ou seja, quando forças estão presentes no sistema físico em estudo
- E não fornece uma relação quantitativa entre todas as propriedades ondulatórias (função de onda) e as propriedades corpusculares (observáveis) das partículas

Teoria de Schroedinger



- Em 1925, Erwin Schroedinger desenvolve uma teoria para descrever o comportamento das funções de onda
- Ele propõe uma equação que permite obter a forma matemática da função de onda.
- Essa equação depende do potencial, isto é, das forças presentes no problema em questão
- Essa equação não pode ser deduzida, mas podemos dar um "palpite bem fundamentado" e verificar se ele descreve bem a natureza

Teoria de Schroedinger

- Essa equação deve ser consistente com as hipóteses de Einstein e de Broglie
- Ela deve reproduzir a conservação de energia
- Deve ser linear, para contemplar o princípio da superposição
- Vamos considerar o caso da partícula livre inicialmente

 Portanto, a equação de Schroedinger unidimensional para a partícula livre é dada por:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x,t) + V_0 \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t)$$

• E a sua solução pode ser escrita como:

$$\Psi(x,t) = A \left[\cos(kx - \omega t) + i \cdot \sin(kx - \omega t) \right] = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

- A função de onda é uma função matemática complexa, portanto não pode ser medida diretamente
- Ela deve ser interpretada mais como um "guia" para se obter as grandezas realmente mensuráveis, chamadas de observáveis
- Como podemos agora relacionar essa função de onda com grandezas observáveis?

Funções de onda segundo Born



- Em 1926, Max Born propõe uma forma de relacionar as funções de onda com o comportamento das partículas que elas descrevem
- Segundo Born, o módulo da função de onda ao quadrado

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$

fornece a probabilidade da partícula ser encontrada no instante t em uma coordenada entre x e x + dx

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

Normalização da Função de Onda

 A constante A que aparece multiplicando a função de onda

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

permite a **normalização** da mesma, isto é, seu valor deve ser tal que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = 1$$

 A partir dessa interpretação, nota-se que a função de onda da partícula livre não pode ser normalizada dessa maneira, pois

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(kx-wt)} \cdot e^{i(kx-wt)} dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = 1$$

que leva a $A \rightarrow 0$

- Essa expressão nos diz o valor exato do momento e energia da partícula, porém sua posição em um certo instante de tempo é totalmente desconhecida
- Lembrando que a equação de Schroedinger é linear, podemos escrever uma solução dada por

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cdot e^{i(kx - wt)} dk$$

que é o pacote de onda que vimos anteriormente, sendo que A(k) pode ser obtida a partir das técnicas de Fourier e impondo a normalização da função de onda

Observáveis

- Como podemos agora relacionar essa função de onda com grandezas observáveis?
 - A interpretação probabilística de Born é o caminho para isso
- Mas, afinal como podemos obter a posição, o momento ou a energia de uma partícula a partir da função de onda, que é o que podemos determinar de maneira exata no mundo quântico?