Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 15

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br

2o. Semestre de 2017

Página do curso:
https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=53869

02/10/2017

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 :

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

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

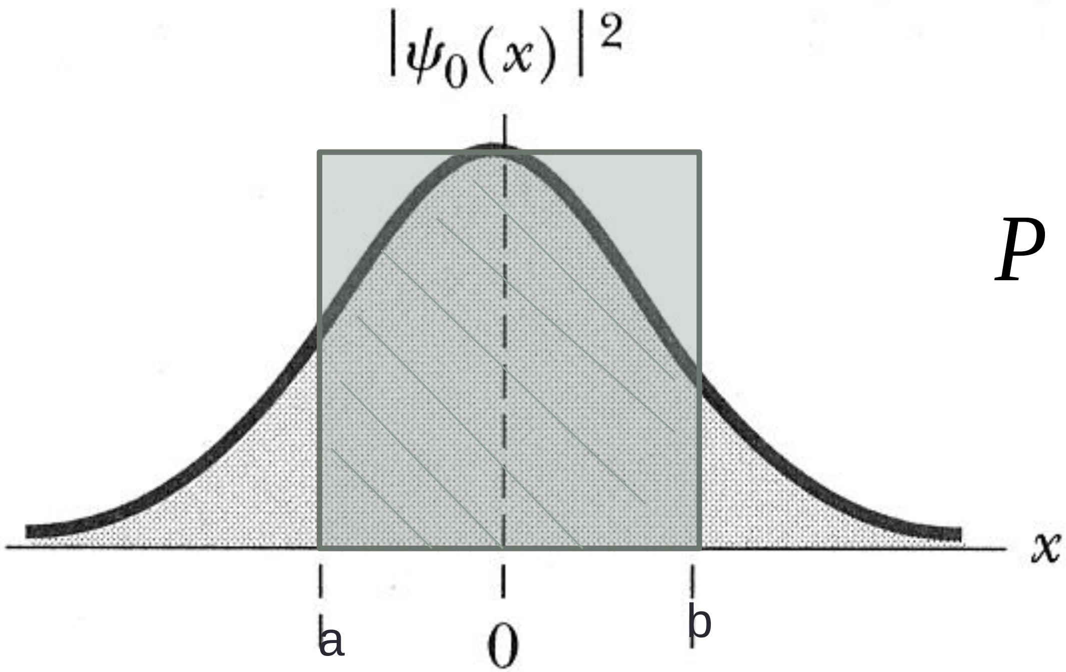
Ψ não é uma quantidade mensurável, mas o seu módulo ao quadrado é mensurável e é justamente a probabilidade por unidade de comprimento ou densidade de probabilidade P(x) para encontrar a partícula no ponto x no tempo t.

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

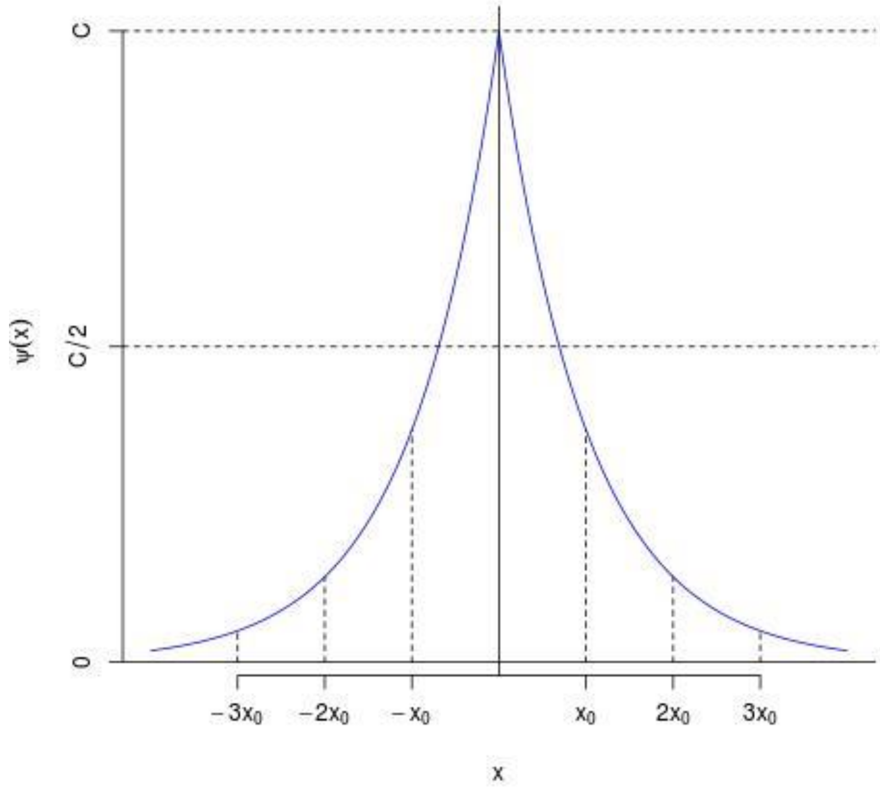
Exercício:

2) A função de onda inicial de uma partícula é dada por:

$$\Psi(x,0) = Ce^{-|x|/x_0}$$

onde C e x_0 são constantes

a) Desenhe esta função



Exercício:

2) A função de onda inicial de uma partícula é dada por:

$$\Psi(x,0) = Ce^{-|x|/x_0}$$ onde C e x_0 são constantes.

b) Encontre C em termos de x_0 temos que :

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C^2 e^{-2|x|/x_0} dx = 1$$

$$2C^2 \int_{0}^{+\infty} e^{-2|x|/x_0} dx = 2C^2 \left. \frac{e^{-2|x|/x_0}}{-2/x_0} \right|_0^{\infty}$$

$$-C^2 x_0 (0-1) = C^2 x_0 = 1$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{x_0}}$$

Exercício:

2) A função de onda inicial de uma partícula é dada por:

$$\Psi(x,0) = Ce^{-|x|/x_0}$$

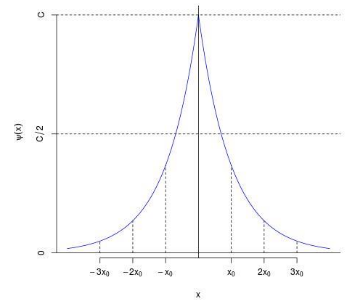
onde C e x_0 são constantes.

c)Calcule a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $-x_0 =< x <= x_0$.

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

$$C = \frac{1}{\sqrt{x_0}}$$

$$P = \int_{-x_0}^{+x_0} C^2 e^{-2|x|/x_0} dx =$$



$$2C^2 \int_0^{+x_0} e^{-2|x|/x_0} dx = 2C^2 \left. \frac{e^{-2|x|/x_0}}{-2/x_0} \right|_0^{x_0}$$

$$-C^2 x_0 (e^{-2} - 1) = \frac{1}{x_0} x_0 (1 - e^{-2})$$

$$\boxed{P = (1 - e^{-2}) = 0.8647 = 86{,}5\%}$$

OBSERVÁVEIS:

Ψ não é uma quantidade mensurável

MAS como podemos relacionar a função de onda com grandezas observáveis????

COMO podemos obter a posição, o momento ou a energia de uma partícula a partir da função de onda (de maneira exata no mundo quântico)?????

VALORES ESPERADOS:

USANDO a interpretação probabilística de Bohr, podemos obter apenas os valores médios ou valores esperados das grandezas

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

OBSERVÁVEIS: VALORES ESPERADOS:

Generalizando qualquer grandeza que depende da posição x:

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

E o valor esperado para o momento ou energia da partícula??

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

Dúvida: p(x)???

pelo princípio de incerteza não há como determinar precisamente (simultaneamente) as duas quantidades

OBSERVÁVEIS: VALORES ESPERADOS:

NA FÍSICA QUÂNTICA, QUALQUER GRANDEZA É OBTIDA A PARTIR DE UM OPERADOR QUÂNTICO APLICADO A FUNÇÃO DE ONDA

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

p é constante

$$p = \hbar k$$

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

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ikAe^{i(kx-\omega t)} = ik\Psi = \frac{ip}{\hbar}\Psi$$

$$-i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x} = p\Psi$$

É CHAMADO OPERADOR QUÂNTICO DIFERENCIAL

Tem o mesmo efeito que ao ser aplicado a uma função de onda – de se multiplicar a mesma função de onda pelo momento linear p.

OPERADORES

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

OPERADOR MOMENTO LINEAR

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

ANALOGAMENTE:

$$E = \hbar\omega$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

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

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega A e^{i(kx-\omega t)} = -i\omega\Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\Psi = \frac{E}{i\hbar}\Psi$$

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

OPERADOR QUÂNTICO DE ENERGIA TOTAL

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 posso determinar através de:

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

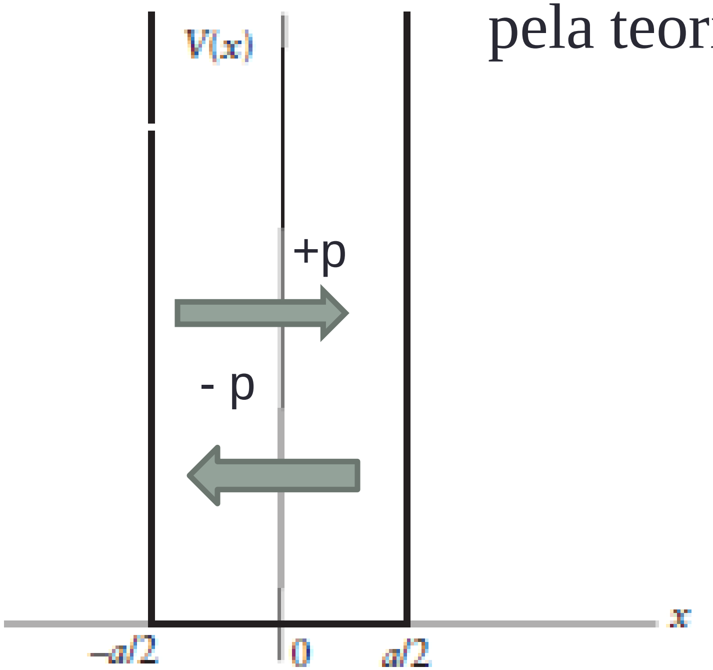
O valor médio de uma grandeza em mecânica quântica é normalmente chamado de valor esperado, que é o valor que se espera obter de uma medida daquela grandeza.

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

Elétron em uma caixa

Vamos pensar que um elétron se move em uma caixa unidimensional de tamanho a~1A (angstrom) ~1x10^{-10}m ~0,1nm, paredes rígidas e V(x,t)=0 (partícula livre)

O elétron quando faz este movimento pela teoria de Wilson-Sommerfield: $$\oint p_x dx = nh$$



$$\int_{-a/2}^{a/2} p dx + \int_{+a/2}^{-a/2} (-p) dx = nh$$

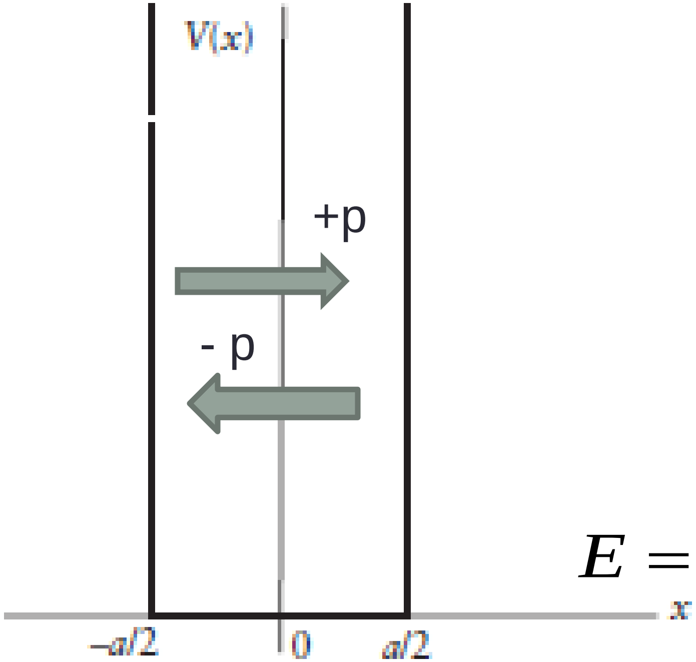
$$\int_{-a/2}^{a/2} p dx + \int_{-a/2}^{a/2} (p) dx = nh$$

$$2\int_{-a/2}^{a/2} p dx = nh \quad \left\{ \begin{aligned} & 2p(a/2 - (-a/2)) = nh \\ & 2pa = nh \end{aligned} \right.$$

$$p = \frac{nh}{2a} \qquad E = \frac{p^2}{2m} \qquad \boxed{E = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}}$$

Elétron em uma caixa

Vamos pensar que um elétron se move em uma caixa unidimensional de tamanho a~1A (angstrom) ~1x10^{-10}m ~0,1nm



O elétron quando faz este movimento pela teoria de Wilson-Sommerfield:

$$\boxed{E = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}}$$

$$E = \frac{n^2 (hc)^2}{8mc^2 a^2} = \frac{n^2 (1240 eV.nm)^2}{8x0{,}511x10^6 ev.(10^{-1} nm)^2}$$

$$E = n^2 3{,}76x10^5 x10^{-6} x10^2 eV$$

$$E = n^2 3{,}76x10^1 eV = \boxed{n^2 37{,}6 eV}$$

$$E_1 = 37{,}6 eV$$

$$E_2 = 150{,}4 eV$$

Elétron em uma caixa

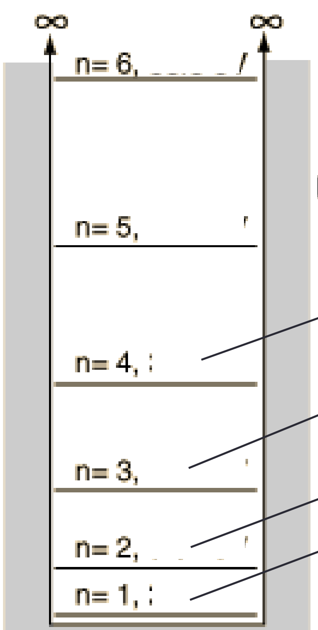
Cálculo das energias quantizadas

De Broglie
(onda de matéria)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \Rightarrow E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

A condição de onda estacionária para ondas clássicas em uma corda de comprimento ***a*** fixa nas suas extremidade, é que a corda contenha um número inteiro de meio comprimento de onda)

$$\boxed{a = \frac{n\lambda}{2} \Longrightarrow E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \quad n = 1,2,3....}$$



3o. Estado excitado

2o. Estado excitado

1o. Estado excitado

Estado fundamental

a=0.1 nm

Poço de potencial infinito

$$E = \frac{n^2 (hc)^2}{8mc^2 a^2} =$$

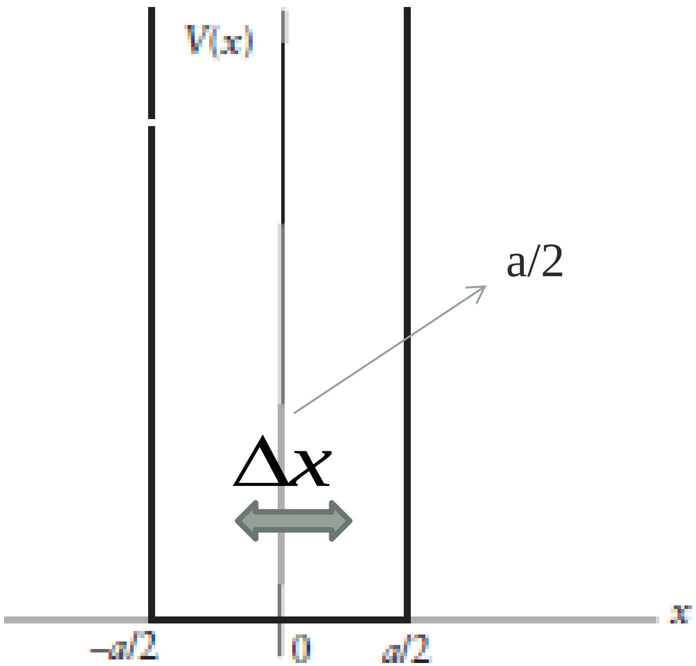
$$E = \frac{n^2 (1240 eV.nm)^2}{8x0,511x10^6 ev.(10^{-1} nm)^2}$$

$$E = n^2 3,76x10^5 x10^{-6} x10^2 eV$$

$$E = n^2 3,76x10^1 eV = n^2 37,6 eV$$

Elétron em uma caixa

Vamos pensar que um elétron se move em uma caixa unidimensional de tamanho a~1A (angstrom) ~1x10^{-10}m ~0,1nm



Pelo Princípio de Incerteza

$$\boxed{\begin{aligned}\Delta p \Delta x &\geq \frac{\hbar}{2}\\ \Delta p &\geq \frac{\hbar}{2\Delta x}\end{aligned}}$$

$$\Delta p \geq \frac{h}{2\pi .2.(a/2)} \geq \frac{h}{2\pi .a}$$

$$E_{\min} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2}$$

Por Sommerfield $E = \dfrac{n^2 h^2}{8ma^2}$

A diferença é um fator

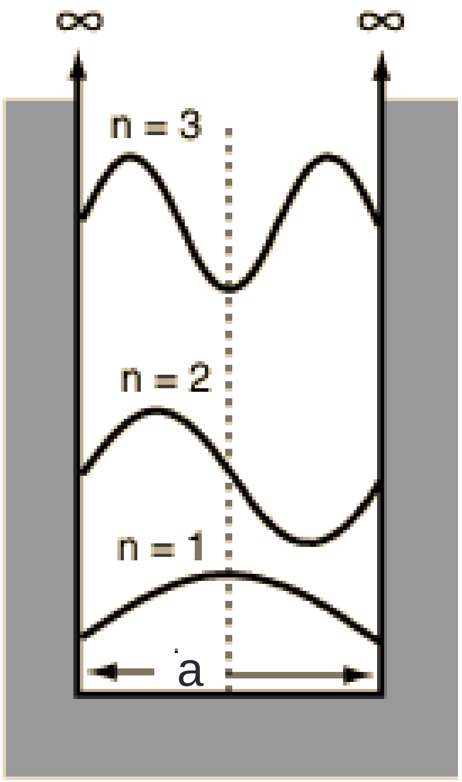
$$\frac{1}{\pi^2}$$

Valor dividido por ~10

$$\boxed{E_1 \simeq 3{,}85eV}$$

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 cossenoide



Função de onda

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

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

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

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

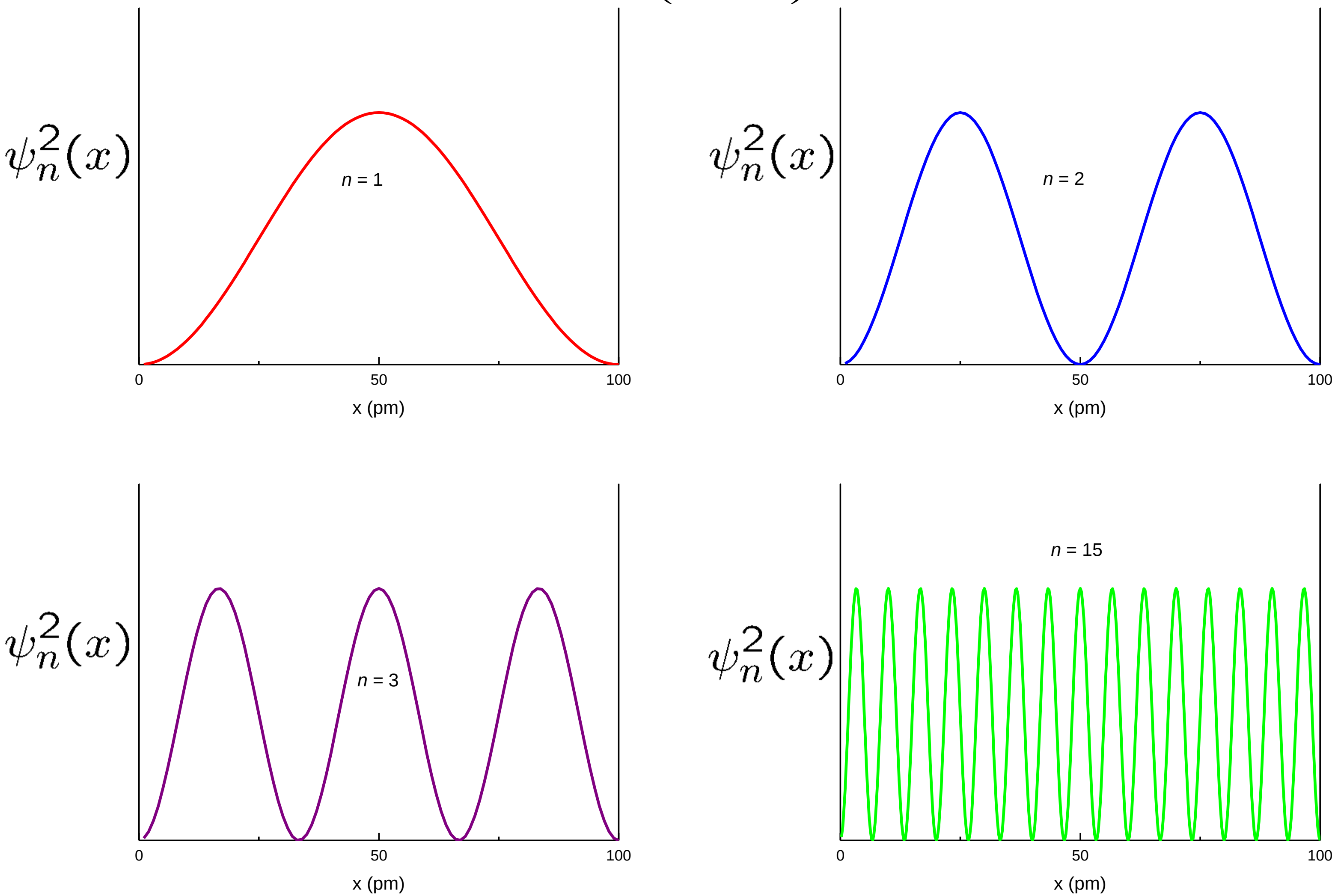
$$P(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)dx$$

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

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

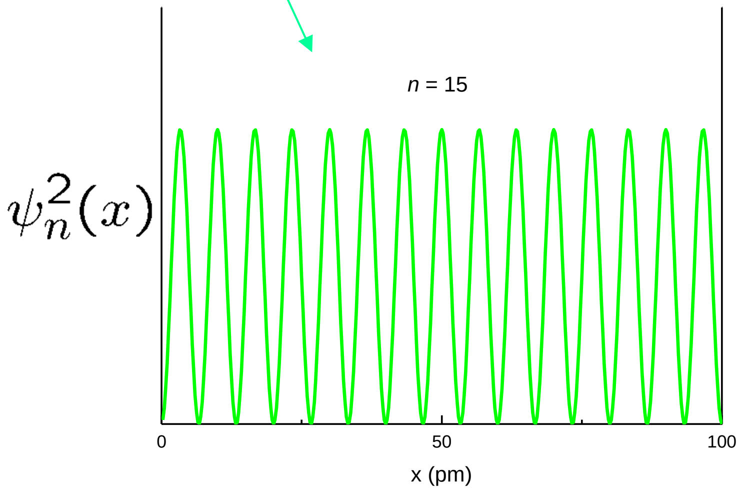
Elétron em uma caixa

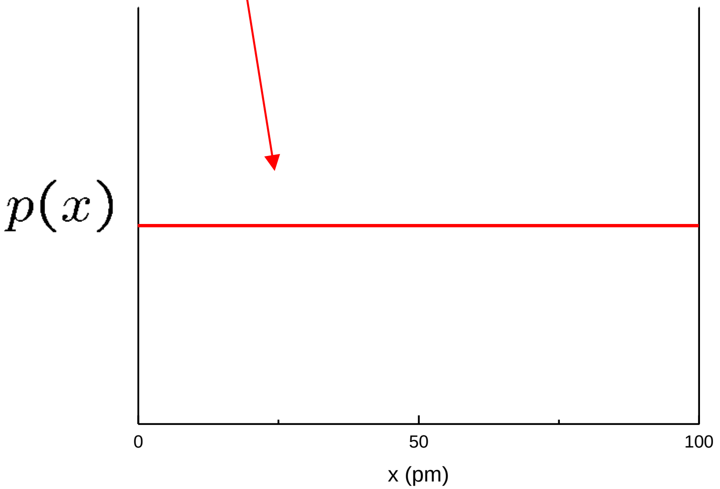
$$\Psi_n^2(x) = A^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right), n = 1,2,3...$$



Princípio da correspondência

“Para grandes valores dos números quânticos, os resultados da física quântica tendem para os resultados da física clássica.”





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

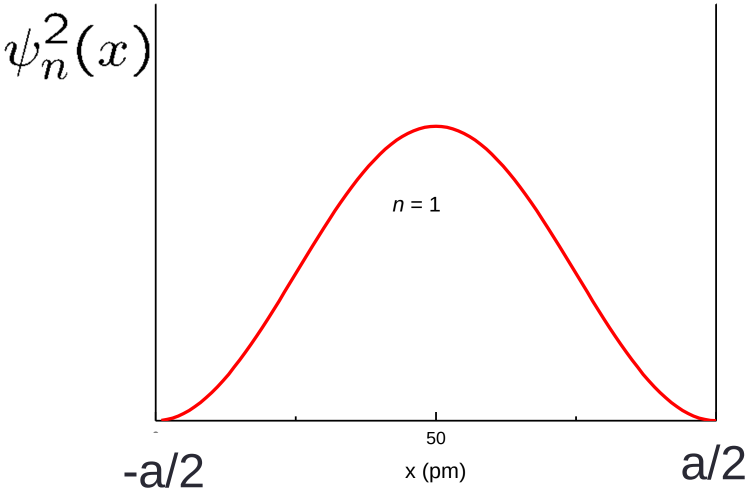
No nosso caso:

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

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

Mudança de variável

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



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

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

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

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

Constante de normalização

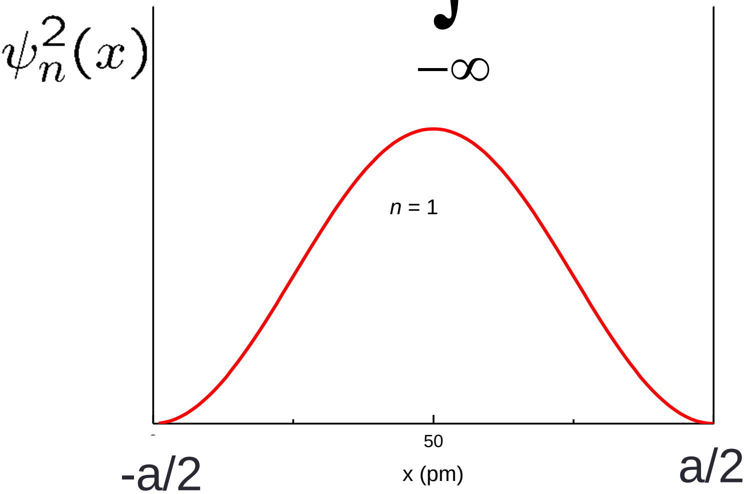
Qual o valor médio da posição da partícula dentro desta caixa:

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

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

Vimos que :

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



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

Função ímpar   Função par

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

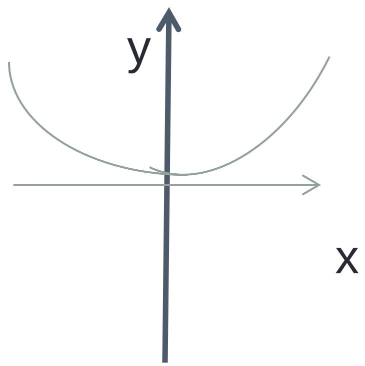
$$\boxed{\bar{x} = <x> = 0}$$

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

Funções Pares e Ímpares

Função Par

$$f(x) = f(-x)$$

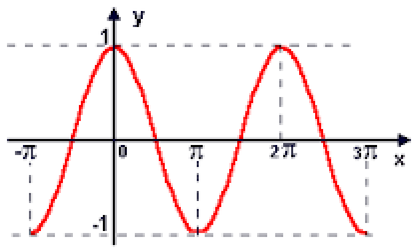


$$f(x) = x^2$$

$$f(2) = f(-2)$$

$$4 = 4$$

Simetria de um lado e outro (eixo y ¨espelho¨)



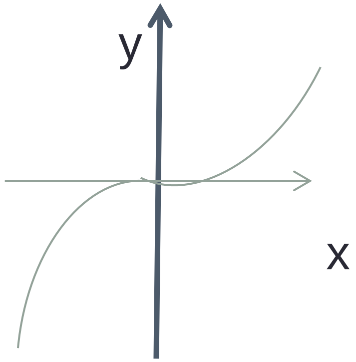
$$f(x) = \cos x$$

Funções Pares e Ímpares

Função Ímpar

$$f(x) = -f(-x)$$

$$-f(x) = f(-x)$$



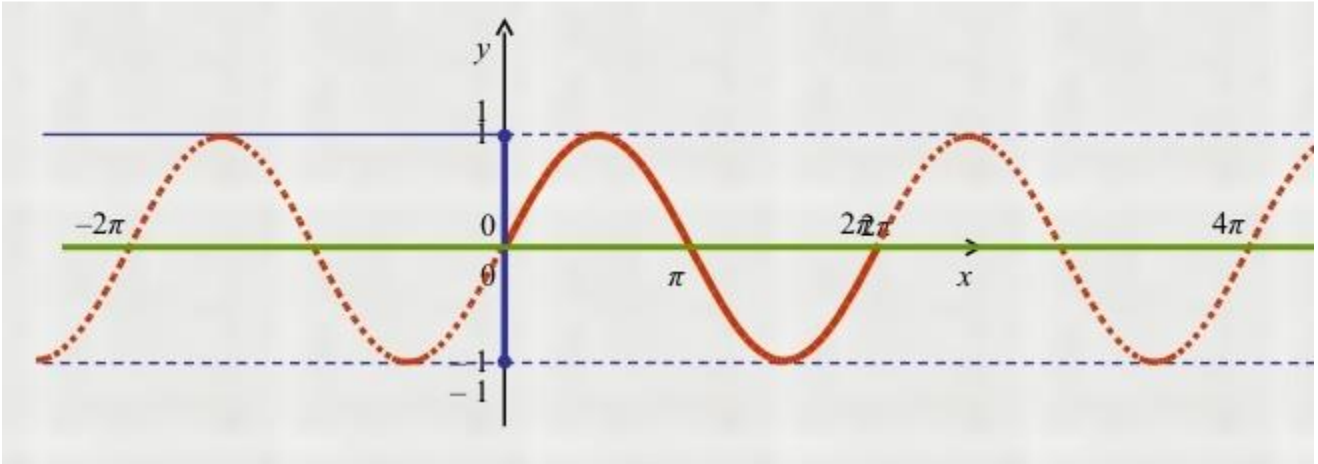
$$f(x) = x^3$$

$$f(2) \neq f(-2)$$

$$8 = -8$$

Função ímpar tem simetria inversa

$$f(x) = senx$$



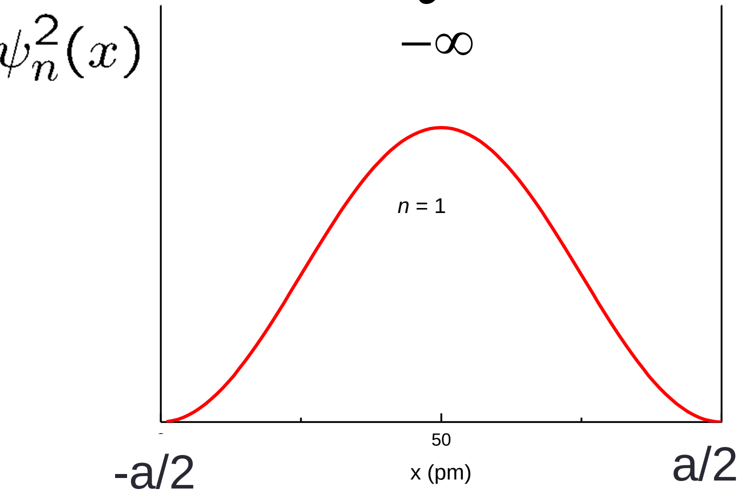
Qual o valor médio do momento da partícula dentro desta caixa:

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

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

Vimos que :

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



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

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

Função par

Função impar

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

Como a probabilidade da partícula estar se movendo no sentido 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:

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

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

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

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

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?

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

Vimos que: $\sqrt{< p^2 >} = \frac{\hbar\pi}{a}$

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

que é o valor que havíamos determinado anteriormente por Sommerfeld

O mesmo vale para o <x^2>?

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

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 $\frac{\hbar}{2}$

$$\Delta p \Delta x = 0.57\hbar$$