Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I
AULA 16

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

04/10/2017

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.

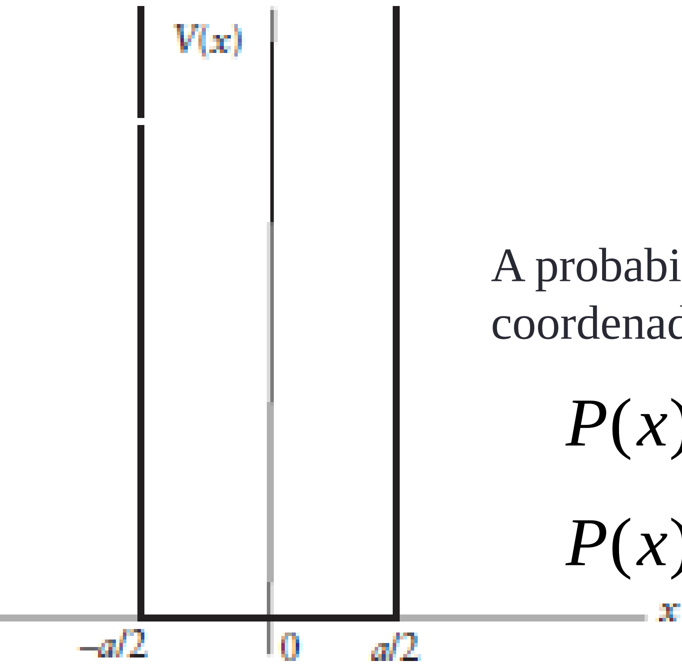
Elétron em uma caixa

Função de onda para o elétron (associar ao elétron uma onda cossenoide

Função de onda

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

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



a

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

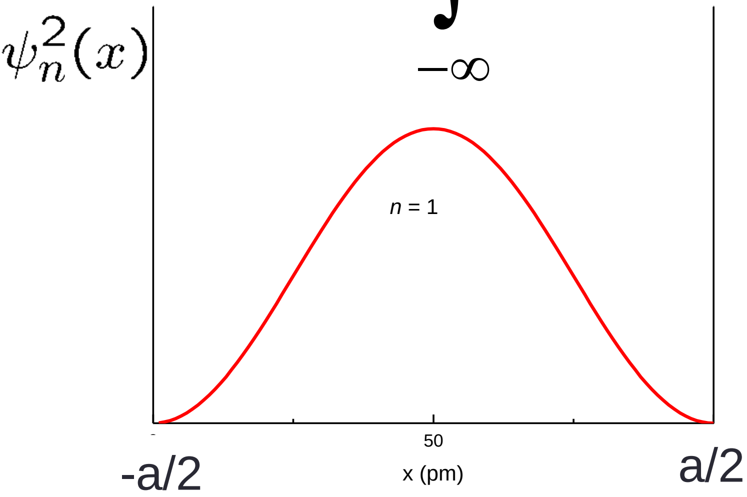
Qual o valor médio da posição da partícula dentro desta caixa:

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

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

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

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

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

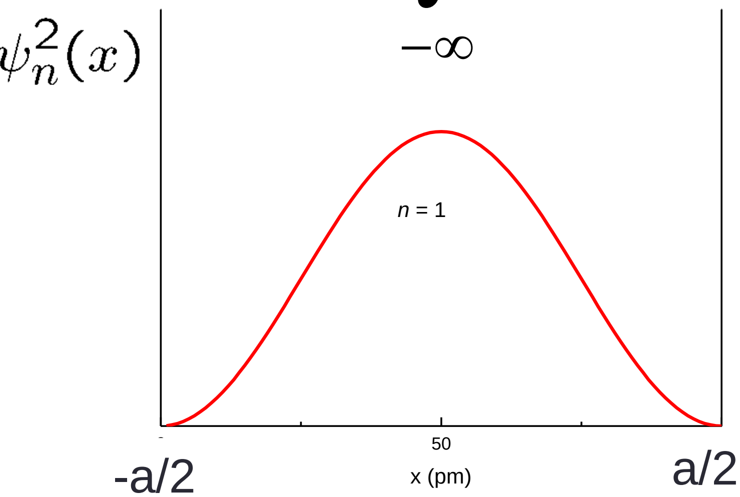
Qual o valor médio do momento da partícula dentro desta caixa:

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

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

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 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:

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

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

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

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

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

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

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.

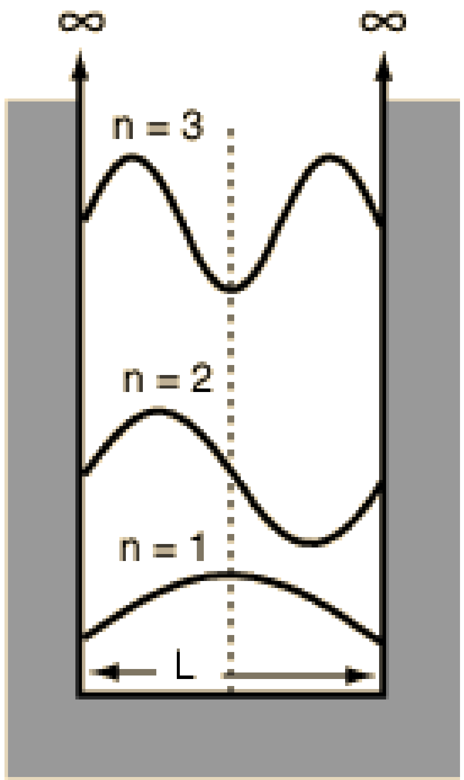
$$\Delta p \Delta x = \sqrt{< p^2 >}\sqrt{< x^2 >} = 0.18a\frac{\hbar\pi}{a}$$

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

consistente com o limite de $\frac{\hbar}{2}$

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

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

Normalização:

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

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

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

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

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

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: $\Psi_1(x) = Asen\left(\frac{\pi}{L}x\right), 0 \le x \le L,$

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

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

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

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

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

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

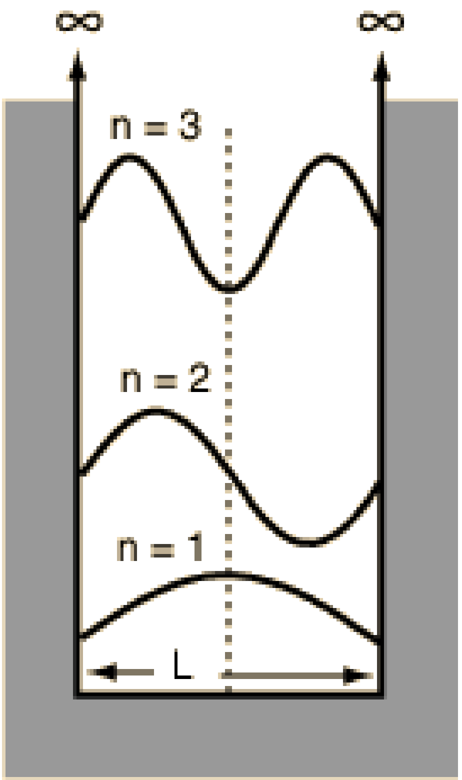
É maior que ½ o qual é esperado para uma partícula clássica que gasta tempos iguais em todas as partes dentro da caixa

Exercício:

Uma partícula dentro da caixa
De tamanho L

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

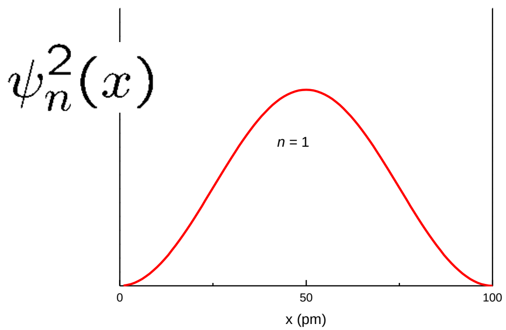
A densidade de probabilidade é dado por: $P(x) = \left|\Psi_n^2(x)\right|$



x = 0 at left wall of box.

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

Primeiro estado:



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

O valor mais provável de x, é dado pelo valor de x onde P(x) é máxima: $x_{mp} = \frac{L}{2}$

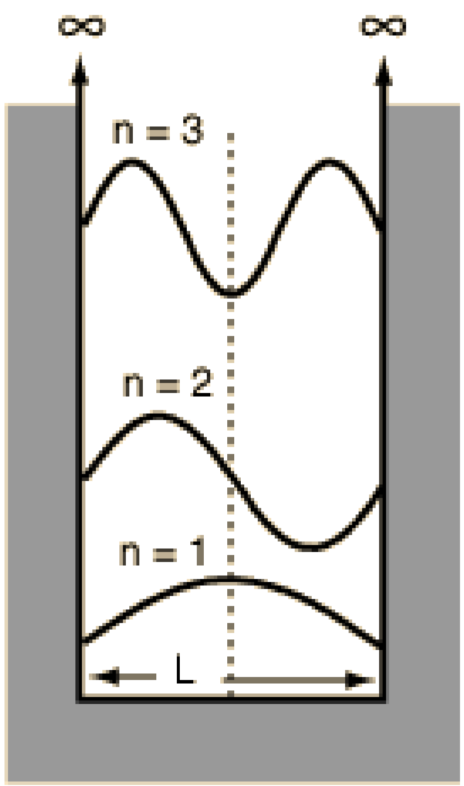
$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx$$

Exercício:

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

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

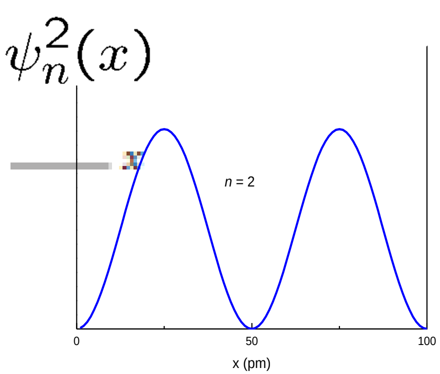
Qual o valor médio da posição: <x>



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



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

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

Função de onda – interpretação:

Função de onda da partícula:

- Ao contrário de ondas mecânicas em uma corda, ou de ondas sonoras no ar, a função de onda de uma partícula **NÃO** é uma onda mecânica que necessita de um meio para se propagar.
- A função de onda descreve a partícula, porém, não podemos relacionar esta função de onda com os materiais nos quais a onda se propaga, como acontece para a onda mecânica
- Podemos apenas relacioná-la com os efeitos fisicamente observáveis.

A função de onda descreve a distribuição de probabilidade de uma partícula no espaço, do mesmo modo que uma onda eletromagnética descreve a distribuição dos campos elétricos e magnéticos.

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

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

E usamos isto porque a função de onda não é necessariamente uma grandeza real, pode ser uma grandeza complexa com uma parte real e imaginária.

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 a solução desta e o experimento.

Equação de Schrödinger

Diferença importante entre a equação de Schrödinger e a equação da onda clássica está no fato de um número imaginário $i = \sqrt{-1}$ aparecer explicitamente na Eq. de Schrödinger.

As funções de onda que satisfazem a Ed. de Schrödinger não são necessariamente reais, como vimos no caso da função de onda da partícula livre

Isto significa que a função de onda $\Psi(x,t)$ que satisfaz a equação de Schrödinger não é uma função diretamente mensurável como a função de onda clássica, já que os resultados de medições são necessariamente número reais. Entretanto estamos interessados em obter as probabilidade (por exemplo: encontrarmos o elétron em uma posição). E esta interpretação probabilística da função de onda foi proposta por Max Born e reconhecida, apesar dos protestos de Einstein e Schrödinger.

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:

$$E = E_c + E_p$$

$$E_c = \frac{p^2}{2m}$$

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

Acabamos de ver que: $E_c = \dfrac{h^2}{2\lambda^2 m}$ então : $E_c = \dfrac{h^2}{2\lambda^2 m} = E - E_p$

A equação:

$$\psi = Asenkx$$

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

A derivada segunda desta equação é:

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

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

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

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

Esta equação é a forma unidimensional da **equação de Schrödinger**

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Vimos que :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

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

Vamos re-escrever:

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

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p\psi = E\psi$$

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

Para uma função de onda dependente de x e t

$$\psi(x,t)$$

Equação de Schrödinger dependente do tempo

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

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 em que não age nenhuma força sobre esta

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

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

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

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

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

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

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

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