

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

FÍSICA MODERNA I

AULA 20 - REVISÃO

**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>

Conteúdo P2

- **Panorama da Física no final do século XIX**
- **Natureza Ondulatória da Radiação eletromagnética**
 - **Radiação Térmica – Hipótese de Planck**
- **Dualidade onda – partícula: Radiação eletromagnética e as propriedades corpusculares**
 - **Efeito fotoelétrico**
 - **Efeito Compton**
 - **Produção e aniquilação de pares**
 - **Difração de raios-X**
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades corpusculares**
 - **Natureza atômica da matéria**
 - **Modelo de Thomson**
 - **Modelo de Rutherford**
 - **Modelo de Bohr**
 - **Modelo de Sommerfeld –FranckHertz**
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades ondulatórias**
 - **Postulado de de Broglie**
 - **Difração de elétrons,**
 - **Difração de Bragg**
 - **Princípios de incerteza**
- **Teoria de Schroedinger da Mecânica Quântica**
 - **Equação de Schroedinger – equação de onda para o elétron**
 - **Autofunções e autovalores**
 - **Valores esperados**
 - **Equação de Schroedinger Dependente e independente do tempo**
 - **Potenciais nulo, degrau e poço quadrado**
- **Átomo de Hidrogênio**

BIBLIOGRAFIA

1) Física Quântica, Eisberg e Resnick (ER);

Capítulo 3, 4 (4.8 até 4.12) , 5 , 6

2) Modern Physics for scientists and engineers, T. Thornton e Andrew Rex (TR);

Capítulo 4 (4.7), 5, 6

3) Modern Physics de Serway, Moses e Moyer (SMM);

Capítulo 4 (4.5), 5, 6,7

4) Física Moderna, Paul A. Tipler e Ralph A. Liewellyn (TL);

Capítulo 4 (4.5), 5 , 6

5) Notas de aula do Professor Roberto V. Ribas (RR)

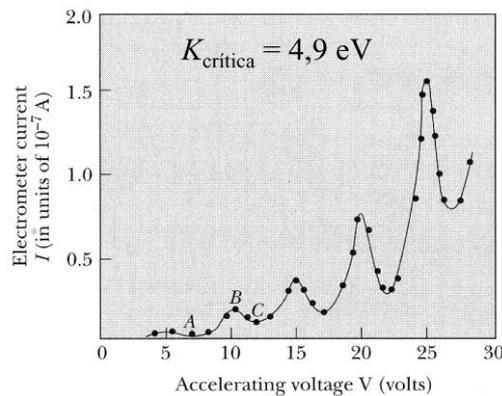
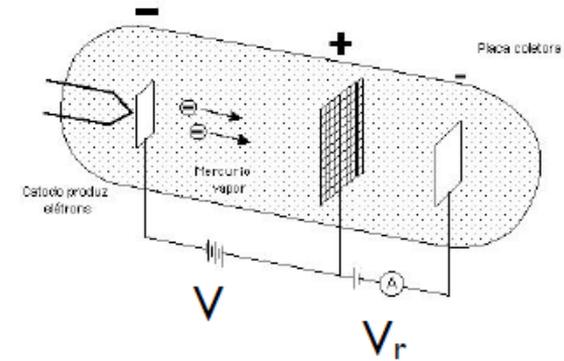
Capítulo 4 (4.4), 5, 6

6) Física Moderna, Francisco Caruso e Vitor Oguri (FV)

Capítulo 14, 15(até 15.3)

Experimento de Frank - Hertz

- Franck e Hertz em 1914 realizaram um experimento que confirmou a hipótese de Bohr que os estados de energia interna de um átomo são quantizados.
- Ampola de vidro com gás a baixa pressão (gás de átomos para investigar).
- Catodo aquecido que produz elétrons.
- Elétrons são acelerados por um potencial V e atraídos pela grade polarizada positiva.
- Os elétrons que passam pela grade só chegam a placa P se tiverem energia suficiente para vencer o potencial retardador V_r .



$eV = E_2 - E_1 = 4,9 eV$ (gráfico mostra primeiro pico).

- Se $eV \geq 4,9 eV$, o elétron incidente poderá transferir $4,9 eV$ ao elétron do gás (fazer o elétron ir para o estado excitado), o espalhamento é inelástico e o elétron perde toda a sua energia e não consegue vencer o potencia V_r e a corrente cai.

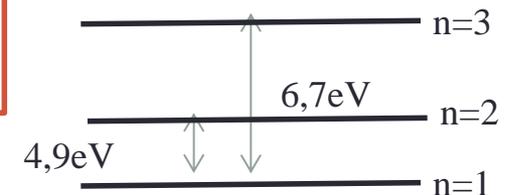
Experimento de Franck - Hertz

- O primeiro estado excitado do Hg (mercúrio) tem energia 4,9 eV acima do estado fundamental

$$\frac{hc}{\lambda} = 4,9 \quad \lambda = 2536\text{\AA} = 253,6\text{nm}$$

- Experimentalmente temos uma linha espectral do mercúrio com este comprimento de onda
- E Excitações múltiplas causadas pelo mesmo elétron $2 \times 4,9 = 9,8\text{V}$ (metade do caminho até a grade)

- Na configuração usual apenas as excitações múltiplas para o primeiro estado excitado são observadas, de modo que as quedas de corrente acontecem a cada 4,9V



Hipóteses de de Broglie

- A hipótese de de Broglie em sua tese de doutorado de 1924, era que o comportamento dual (onda-partícula) da radiação eletromagnética poderia ser aplicado a matéria
- Vimos que podemos associar a um fóton uma frequência de uma onda luminosa que governa seu movimento $E = h\nu$
- E um momento do fóton é relacionado ao comprimento de onda

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

- Então segundo de Broglie se ondas de luz tem propriedades de partículas, partículas devem ter propriedades de onda. E propôs que ambas as relações cima são validas também para partículas.
- Deste modo, o comprimento de onda (não relativístico) associado a partícula d emassa m e velocidade v é:

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

Difração de RX

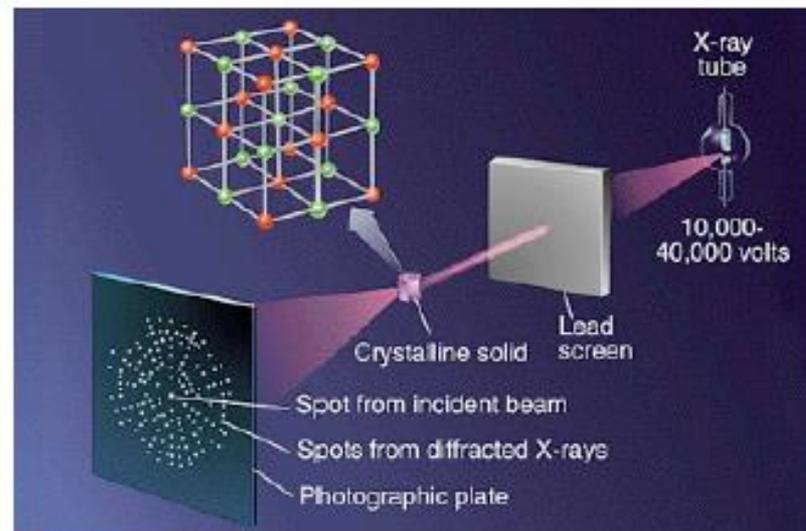
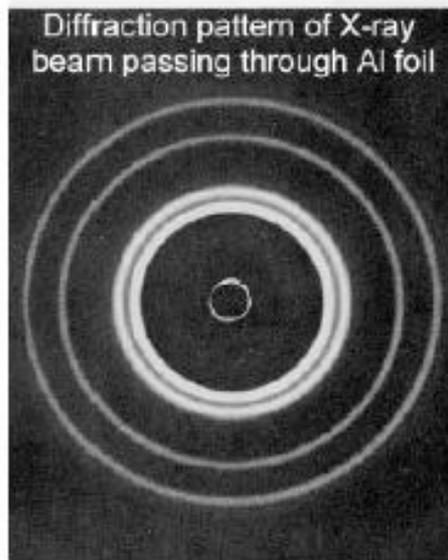
7

- O pequeno alargamento sofrido por um feixe de raios X ao passar por uma fenda de alguns milésimos de milímetros de largura indicava que

$$\lambda \sim 10^{-10} m = 0,1nm$$

- Bragg em 1912 estudou a difração de raios X em várias famílias de planos paralelos de átomos
- As ondas difratadas com o mesmo ângulo por átomos situados em planos diferentes estarão em fase (interferência construtiva) se a diferença entre os dois percursos foi igual ao um numero inteiro de comprimento de onda

$$2d \sin \theta = n\lambda$$



Difração de elétrons

Temos que :

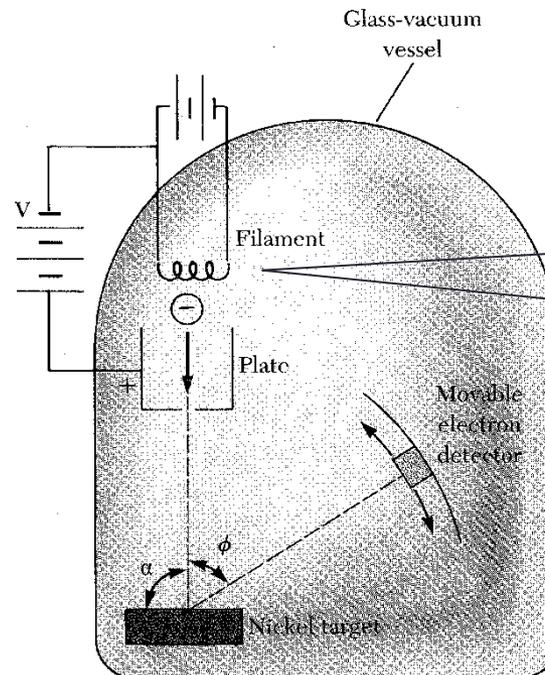
Elétron para este caso podemos associar um comprimento de onda (por exemplo para energia cinética de 100 eV) – De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2E}} = \frac{1,24keVnm}{\sqrt{2.5 \cdot 10^5 \cdot 100(eV)^2}} = 1,2 \times 10^{-10} m$$

Testes experimentais da hipótese de de Broglie

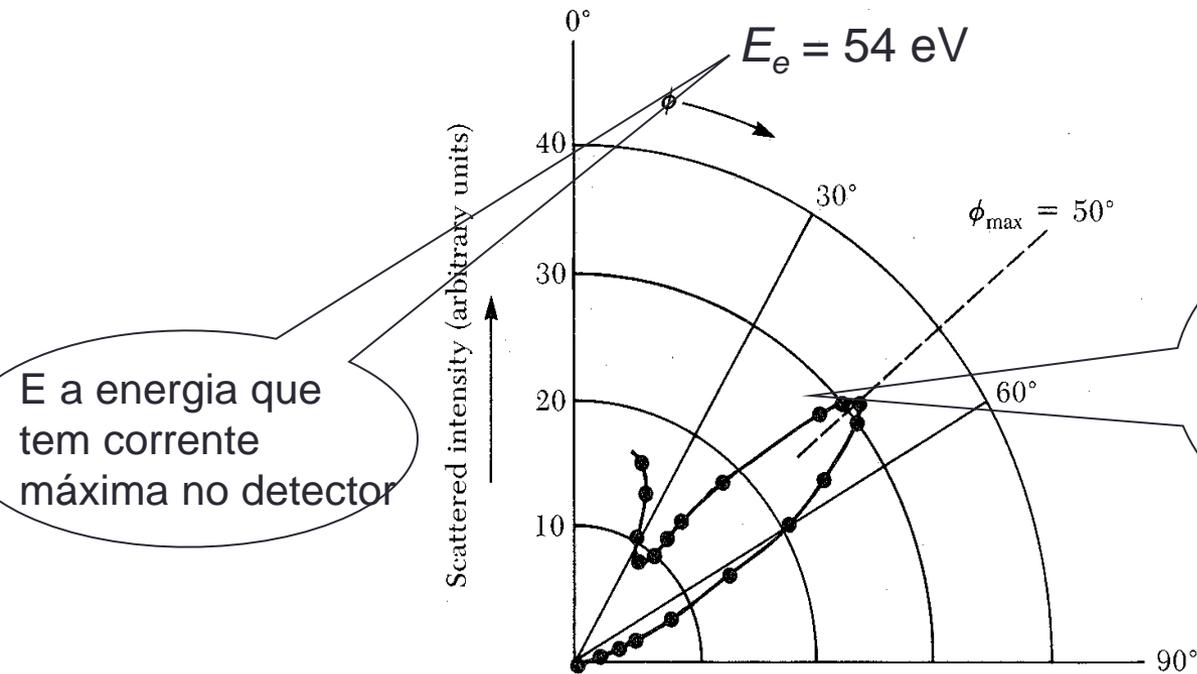
1927 Davisson e Germer (USA) e G. Thomson (Escócia):

- Estudaram a quantidade de elétrons que eram espalhados em uma superfície de Ni em função do ângulo de espalhamento



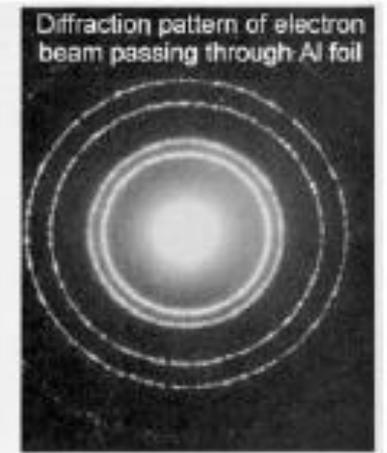
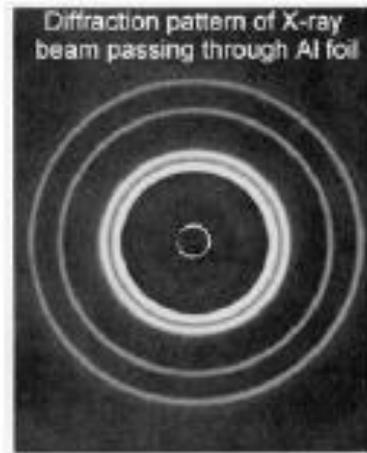
Potencial faz com que os e⁻ sejam emitidos com E (eV)

Difração de elétrons

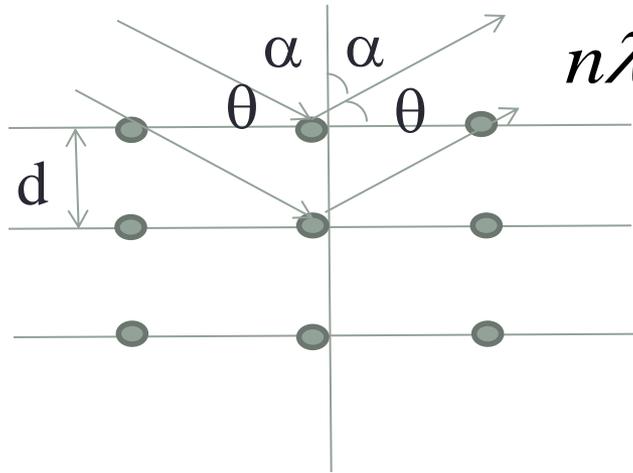


E a energia que tem corrente máxima no detector

A existência deste pico em 50° mostra qualitativamente o postulado de de Broglie pois só pode ser explicado com uma interferência construtiva de ondas espalhadas



Difração de elétrons

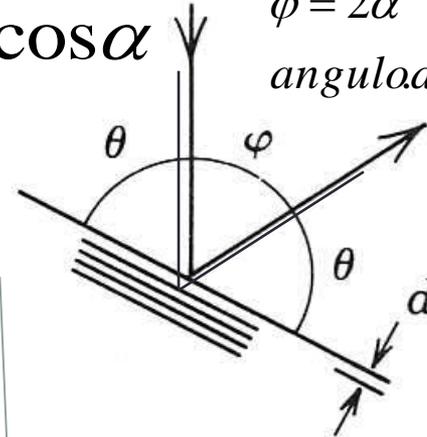


$$n\lambda = 2d \sin\theta = 2d \cos\alpha$$

Máximo \Rightarrow

$$\varphi = 2\alpha$$

angulo de espalhamento



d é a distância entre os planos de Bragg esta relacionada a distância interatômica D através da relação: $d = D \sin\alpha$

$$n\lambda = 2D \sin\alpha \cos\alpha$$

$$n\lambda = D \sin 2\alpha = D \sin\phi$$

Medidas de difração de RX revelaram que $D=0,215\text{nm}$ para o Ni.
O comprimento de onda então calculado para $n=1$

$$\lambda = 0,215 \sin 50 = 0,165 \text{ nm}$$

Ou usando a distância Interplanar:

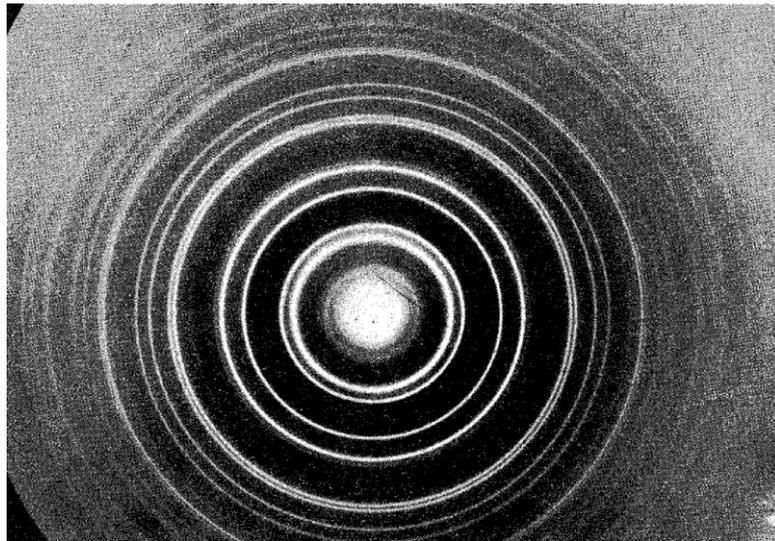
Medidas com raios-X $\Rightarrow d = 0,091 \text{ nm}$

Máximo em $\varphi = 50^\circ \Rightarrow \lambda = 2d \cos \varphi / 2 = 2 \times 0,091 \times 0,906 = 0,165 \text{ nm}$

Calculado por De Broglie para elétrons de 54eV e⁻:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2 E}} = \frac{1,24 \text{ keV nm}}{\sqrt{2.5.10^5.54(eV)^2}} \approx 0,168 \text{ nm}$$

G.P. Thomson Nobel em 1937



Difração de feixe de elétrons

Semelhantes experimentos com feixes de prótons, nêutrons e mesmo átomos apresentam o mesmo fenômeno de difração mostrando que as relações de De Broglie são universais.

O pai G. Thomson ganhou o Nobel por ter descoberto e⁻ e ter caracterizando-o como partícula. E o filho ganhou o Nobel por mostrar que o e⁻ é uma onda

Caso relativístico

- Para se determinar uma expressão equivalente que se aplique tanto as partículas relativísticas como não-relativísticas:

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2 \quad mc^2 = E_0$$

Energia de repouso da partícula

Energia total

$$(E_0 + E_K)^2 = (pc)^2 + (E_0)^2$$

$$E = E_0 + E_K \quad p = \frac{(2E_0E_K + E_K^2)^{1/2}}{c}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{(2E_0E_K + E_K^2)^{1/2}}$$

Aplicável a qualquer partícula com qualquer energia

Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Em 1916, Wilson e Sommerfeld enunciaram um conjunto de regra de quantização:
- “Para qualquer sistema físico no qual as coordenadas são funções periódicas do tempo existe uma condição quântica para cada coordenada”

$$\oint P_q dq = n_q h$$

q é uma coordenada, p_q é o momento associado a esta coordenada e , n_q é o número quântico que toma apenas valores inteiros.

\oint significa que a integração é tomada sobre um período da coordenada q .

Exemplo:

No caso do átomo de H o elétron se movendo em uma órbita de raio r tem momento angular constante $L = mvr$.

A coordenada θ é uma função periódica do tempo
(0 a 2π)

$$\oint L d\theta = nh$$

$$L \int_0^{2\pi} d\theta = nh$$

$$L2\pi = nh \Rightarrow L = n\hbar$$

Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Uma interpretação física da regra de quantização de Bohr foi dada em 1924 por de Broglie

$$L = mvr = n\hbar$$

$$pr = \frac{nh}{2\pi}$$

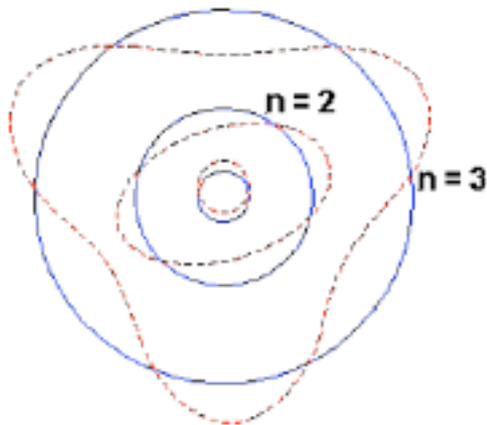
$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$\frac{h}{\lambda} r = \frac{nh}{2\pi}$$

$$2\pi r = n\lambda$$

Momento do elétron em uma órbita possível de raio r ,

As órbitas possíveis são aquelas nas quais as circunferências podem conter exatamente um número inteiro de comprimentos de onda de de Broglie



Sommerfeld trabalhou com órbitas elípticas para o átomo de H e também levou em conta as correções relativísticas para a energia do elétron. Usou isto como tentativa de explicar a estrutura fina do hidrogênio (**Estrutura fina é uma separação das linhas espectrais em várias componentes diferentes**).

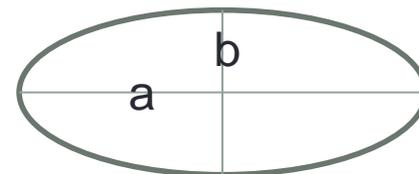
Órbitas elípticas de Sommerfeld

Usou coordenadas polares

$$\oint L d\theta = n_{\theta} h$$

$$\oint P_r dr = n_r h$$

Número quântico
azimutal



As várias órbitas caracterizadas por um mesmo valor de n são ditas degeneradas

1) A primeira condição dá a mesma restrição para o momento angular orbital

$$L = n_{\theta} \hbar \quad n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots$$

Que era obtida para a teoria da órbita circular

2) A segunda condição (que não era aplicável a órbita puramente circular)

$$L(a/b - 1) = n_r \hbar \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Que era obtida para a teoria da órbita circular

Órbitas elípticas de Sommerfeld

Sommerfeld calculou os valores dos semi-eixos maior (a) e menor (b) que dão a forma e o tamanho das órbitas elípticas e a energia total E do elétron nessa órbita

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2}$$

$$b = a \frac{n_\theta}{n}$$

$$E = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2}$$

μ é a massa reduzida

n é o número quântico:

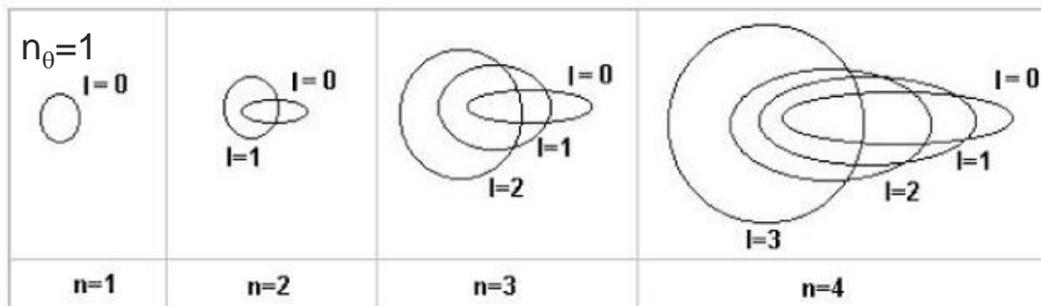
$$n_\theta = 1, 2, 3, \dots$$

$$n \equiv n_\theta + n_r$$

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

As energias são degeneradas



$$E = E_1$$

$$E = E_2$$

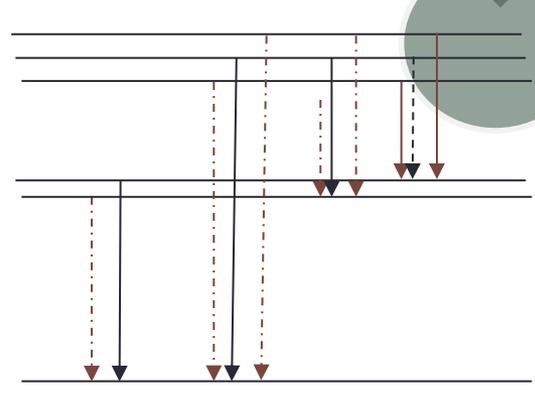
$$E = E_3$$

$$E = E_4$$

$n=3, n_\theta=3$
 $n=3, n_\theta=2$
 $n=3, n_\theta=1$

$n=2, n_\theta=2$
 $n=2, n_\theta=1$

$n=1, n_\theta=1$



Órbitas elípticas de Sommerfeld tratadas relativisticamente

O tamanho real da correção depende da velocidade média do elétron que por sua vez depende da excentricidade da órbita, correções da ordem de v^2/c^2 , era provável que a maior correção fosse na órbita muito excêntrica, porque v aumenta à medida que o elétron se aproxima do núcleo

$$v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{\hbar}{mr} \quad (n=1)$$

$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{mke^2}$$

$$v = \frac{\hbar}{mr_1} = \frac{\hbar}{m\left(\frac{\hbar^2}{mke^2}\right)} = \frac{ke^2}{\hbar}$$

$$\frac{v}{c} = \frac{ke^2}{\hbar c} = \frac{1,44\text{ev.nm}}{197,3\text{ev.nm}}$$

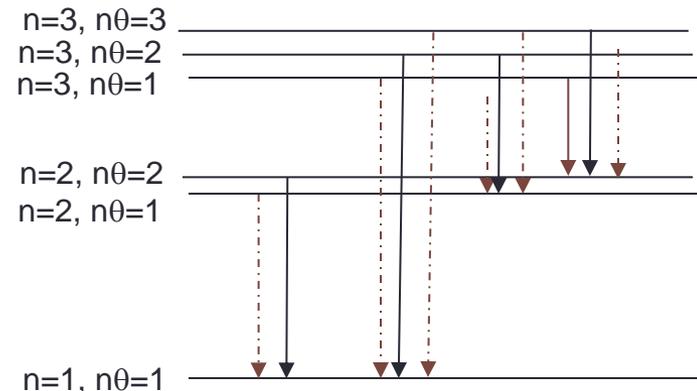
$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{n_\theta} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

α é chamada de “constante de estrutura fina”

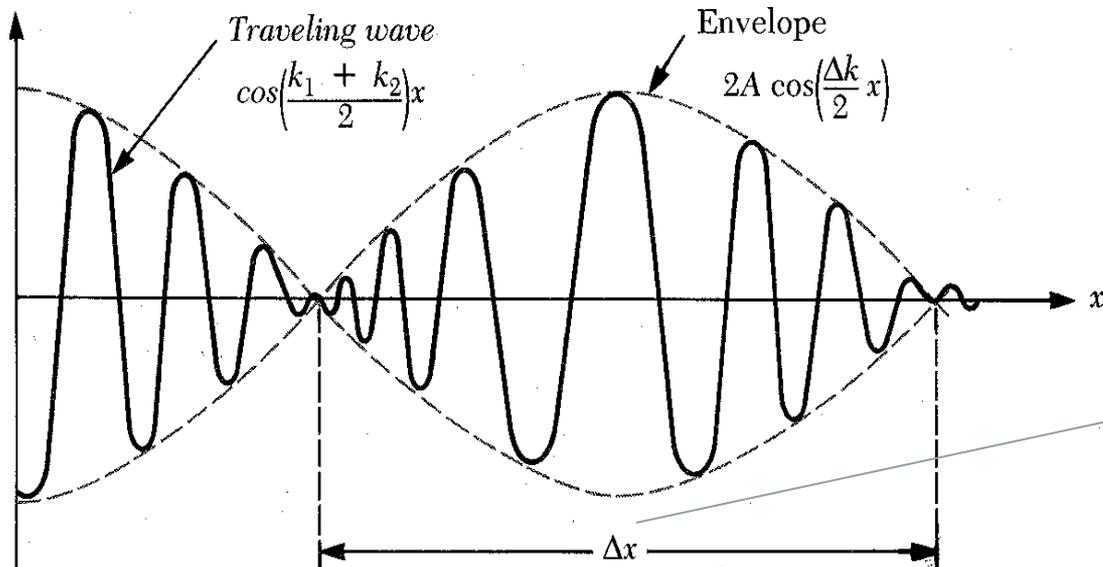
$$\alpha = \frac{ke^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$$

As linhas tracejadas não foram observadas nos espectros e estas transições não ocorrem (regras de seleção):

$$n_{\theta_i} - n_{\theta_f} = \pm 1$$



Superposição de duas Ondas



Podemos interpretar a onda soma como sendo um envelope que modula lentamente uma onda com k e w médios

Δx é a largura do envoltório e é inversamente proporcional ao número de onda

$$\Psi(x, t) = \Psi_1 + \Psi_2 = 2A \cos \frac{1}{2} (\Delta k x - \Delta \omega t) \cos(\bar{k} x - \bar{\omega} t)$$

amplitude
(envelope)

A velocidade de propagação das ondas individuais $v_f = w/k$

$$\frac{1}{2} (\Delta k x - \Delta \omega t) = \frac{1}{2} \Delta k \left(x - \frac{\Delta \omega}{\Delta k} t \right) = \frac{1}{2} \Delta k (x - v_g t)$$

velocidade de grupo

A velocidade de propagação do grupo (que é a velocidade do envoltório)

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Em contraste com o pulso a combinação de ondas não é localizada no espaço

Ondas harmônicas que compõem um pacote de ondas. A velocidade é dada por:

$$v_f = \lambda f \qquad \lambda = \frac{2\pi}{k} \qquad \omega = 2\pi f$$

Velocidade de fase

$$v_f = \left(\frac{2\pi}{k} \right) \left(\frac{\omega}{2\pi} \right)$$

$$v_f = \left(\frac{\omega}{k} \right)$$

$$v_f \cdot k = \omega$$

A velocidade de grupo esta relacionada a velocidade de fase por:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} (kv_f) = v_f + k \frac{dv_f}{dk}$$

- A velocidade v_g pode ser $>$ ou $<$ que v_f

- Para o postulado de de Broglie

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar} \frac{\hbar}{p} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

- A velocidade de fase não corresponde a velocidade da partícula

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

- O pacote de onda se propaga com velocidade do elétron

Princípio de incerteza de Heisenberg, diz:

que é impossível determinar (fazer medidas) simultaneamente da posição e momento de uma partícula) (x e p_x , por exemplo) apresentam uma relação entre suas incertezas dada por

$$\Delta k \Delta x \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

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

Quanto mais bem definida a posição de uma partícula (pacote de onda mais estreito), menos definido será o momento dessa partícula (uma combinação maior de comprimentos de onda, e portanto de momentos será necessário)

O princípio de incerteza também pode ser enunciado em termos da energia e do tempo:

Das propriedades do pacote de onda, tem-se que:

$$\Delta \omega \cdot \Delta t \geq \frac{1}{2}$$

$$E = h\nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar \omega$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

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 :

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

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

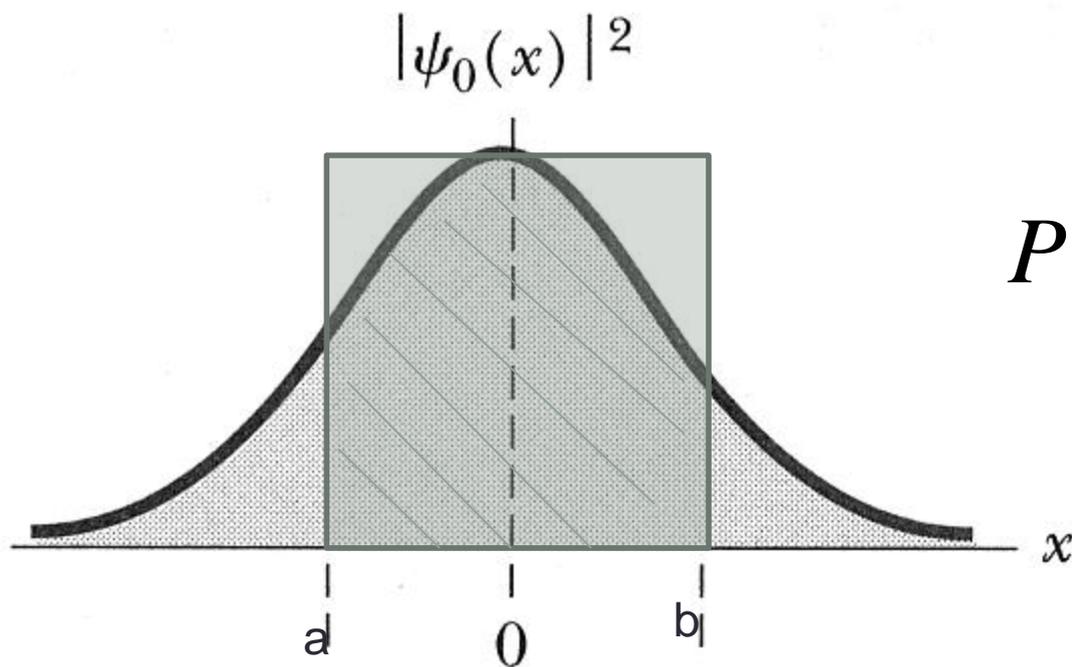
Ψ não é uma quantidade mensurável, mas o seu módulo ao quadrado é mensurável e é justamente a probabilidade por unidade de comprimento ou densidade de probabilidade $P(x)$ para encontrar a partícula no ponto x no tempo t .

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.

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

Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

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



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

o área embaixo da curva entre a e b

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

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

Valores esperados

Conteúdo básico:

1. Valor médio de uma função de x :

$$\bar{f}(x) = \langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{f}(x) \psi(x) dx$$

2. Desvio padrão de uma variável:

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \Delta x$$

3. Momento da partícula: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

4. Energia: $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Condição de normalização: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$

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:

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

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

3 - no caso da energia, operador é dado por:

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

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

OBSERVÁVEIS - VALOR ESPERADO

Temos então que o valor esperado de qualquer grandeza que depende da posição, do momento, da energia pode ser determinado 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 que tenha uma alta probabilidade seja igual ao valor esperado.

Equação de Schrödinger

Conteúdo básico:

- É consistente com de Broglie-Einstein;
- Consistente com $E = p^2/2m + V$ (portanto não-relativística);
- Linear em Ψ , de tal forma que, se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções $\Rightarrow \Rightarrow \Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ também é solução (combinação linear). Interferência é possível.

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

A equação de Schrödinger independente do tempo

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

Método da separação de variáveis transforma uma eq. diferencial parcial em um conjunto de eqs. diferenciais ordinárias. Solução deve ser produto de funções: $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$

Caso o potencial $V(x,t)$ não dependa do tempo, seja apenas $V(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Propriedades das autofunções

Por representarem propriedades de um sistema físico, as autofunções devem apresentar características que reflitam isso.

Assim:

$\psi(x)$ deve ser finita (1) $d\psi(x)/dx$ deve ser finita (4)

$\psi(x)$ deve ser unívoca (2) $d\psi(x)/dx$ deve ser unívoca (5)

$\psi(x)$ deve ser contínua (3) $d\psi(x)/dx$ deve ser contínua (6)

$P(x)$ finita e unívoca \Rightarrow (1) & (2)

Valores esperados finitos e unívocos \Rightarrow (4) & (5)

(4) \Rightarrow (3)

$V(x)$, E e $\psi(x)$ finitos $\Rightarrow d^2\psi/dx^2$ finita \Rightarrow (6)

Partícula livre

O potencial nulo: $V(x) = 0, \forall x$.

Partícula livre, pois $F(x) = -dV(x)/dx = 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x); \text{ e } \Psi(x,t) = \psi(x)e^{\frac{iE}{\hbar}t}$$

válido para qualquer valor de $E \geq 0$.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x)$$

$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ deve ser a solução geral

Momento da partícula:

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

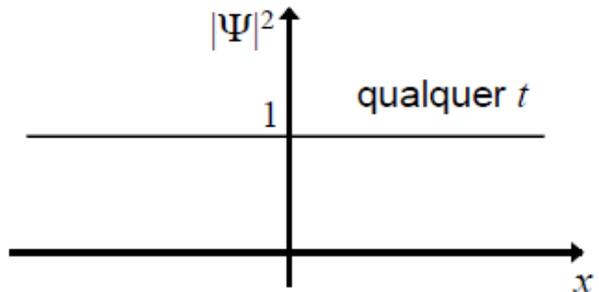
Mas $-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar ik\psi(x) = \hbar k\psi(x) = +\sqrt{2mE}\psi(x)$

Portanto, $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \sqrt{2mE} \psi(x) dx = \sqrt{2mE} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \sqrt{2mE}$

No outro caso, $\Psi(x,t) = e^{-i(kx+\omega t)}$, teremos: $\langle p \rangle = -\sqrt{2mE}$

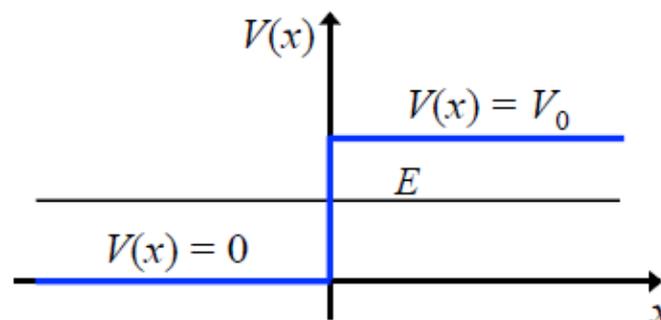
Posição da partícula: $\Psi^*\Psi = A^* e^{-i(kx-\omega t)} Ae^{i(kx-\omega t)} = A^* A$

Nesse caso, $\Delta x = \infty$. Mas $\Delta p = 0$.



O potencial degrau I – $E < V_0$

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se } x > 0 \\ 0, & \text{se } x \leq 0 \end{cases}$$



$$x < 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi; \quad x > 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

Região $x \leq 0$: solução para a partícula livre: $\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

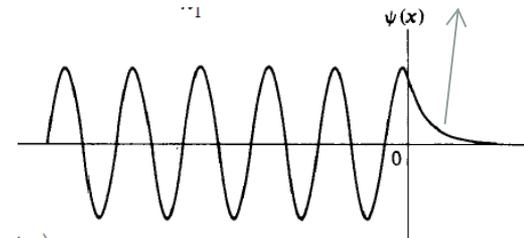
$$\text{com: } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Penetração da
barreira

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Solução geral, para $x > 0$: $\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$

Determinar as constantes A, B, C e D , que satisfaçam os requisitos para ψ e $d\psi/dx$: finitas, unívocas e contínuas.

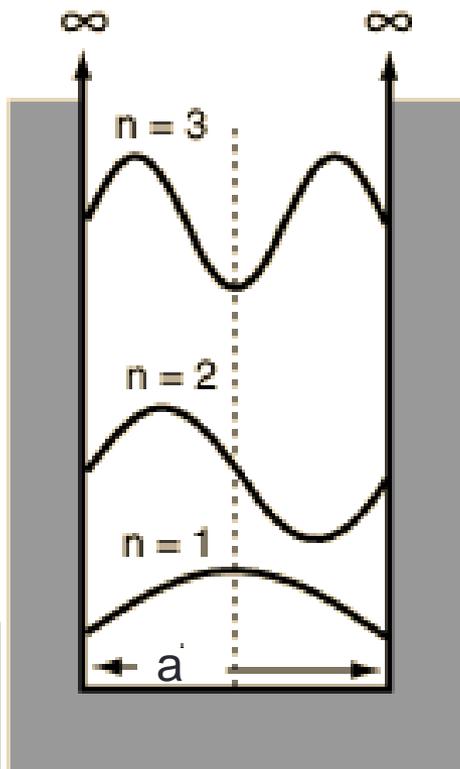


$$\psi(x) \text{ finita } \forall x \Rightarrow C = 0.$$

$$\text{Continuidade no ponto } x = 0 \quad \psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x}, & x \leq 0 \\ De^{-k_2x}, & x \geq 0 \end{cases}$$

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 cossenoidal)



$x = 0$ at left wall of box.

Função de onda

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

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

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

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

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

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

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

Onda fixa nas ponta separada por uma distância a , terá $\lambda/2$ comprimentos de onda: $a = \frac{n\lambda}{2}$

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

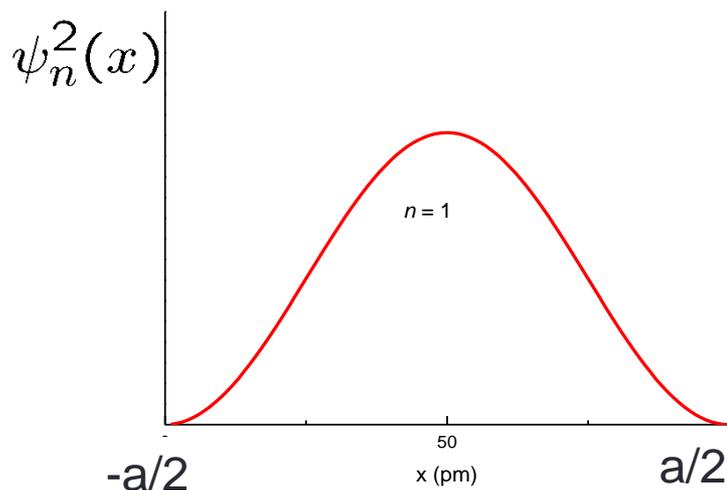
No nosso caso:

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

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

Mudança de variável

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



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

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

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

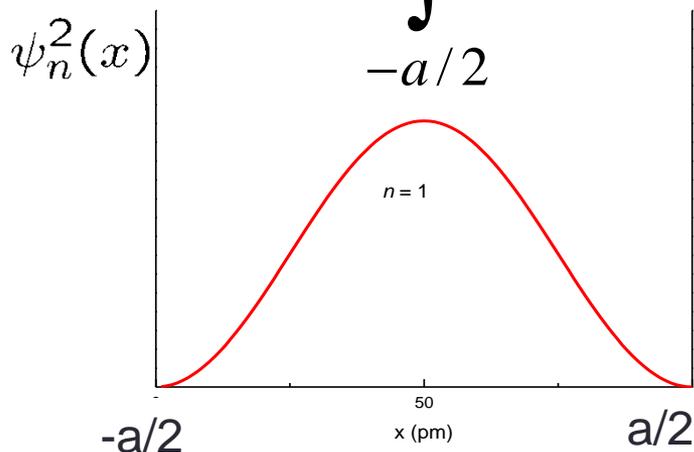
Constante de normalização

Qual o valor médio do momento para a função de onda do estado fundamental da partícula dentro desta caixa:

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

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

$$\bar{x} = \int_{-a/2}^{+a/2} x P(x, t) dx = \int_{-a/2}^{+a/2} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx$$



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

Diagram illustrating the integrand $x \cos^2\left(\frac{\pi}{a} x\right)$. The term x is circled in pink and labeled "Função ímpar". The term $\cos^2\left(\frac{\pi}{a} x\right)$ is circled in grey and labeled "Função par".

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

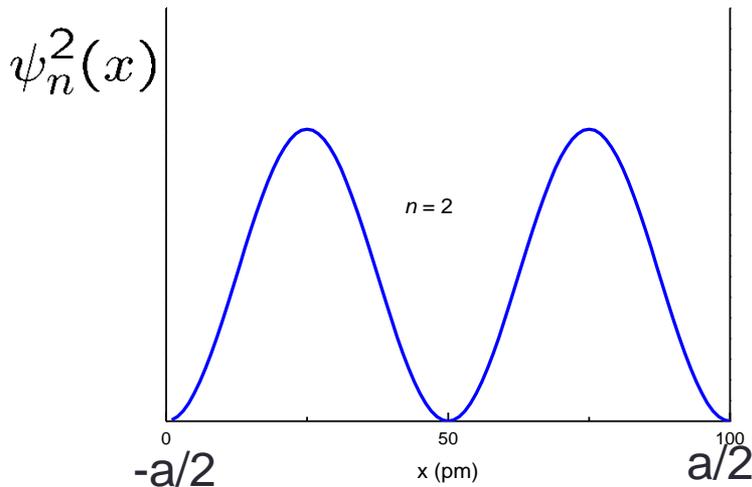
$$\boxed{\bar{x} = \langle x \rangle = 0}$$

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

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

Elétron em uma caixa

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



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

Função ímpar
Função par

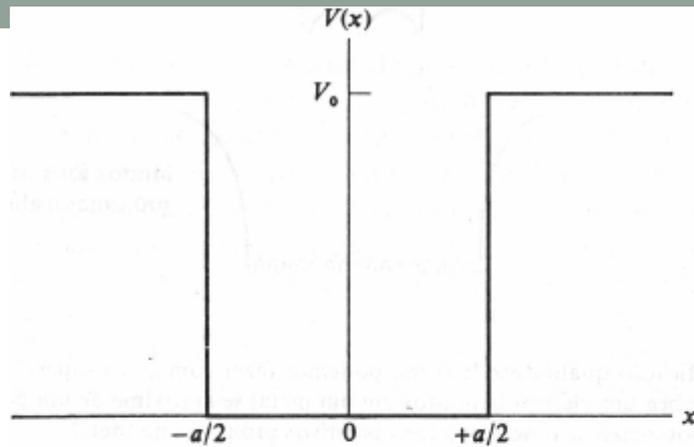
Como a integral é sobre um valor ímpar em uma região simétrica a integral é nula

$$x_{mp} = -\frac{a}{4} e \frac{a}{4}$$

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

O valor médio da posição do elétron na caixa no estado $n=2$ é em $x=0$

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



Poços de potencial: $E < V_0$

Dentro, $-a/2 < x < a/2$:

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\text{com: } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar}$$

Ondas com a mesma amplitude nos 2 sentidos.

$$A = B \Rightarrow \psi(x) = B' \cos k_1 x \Rightarrow \Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

A autofunção terá nós fixos nos pontos onde $\cos k_1 x = 0$.

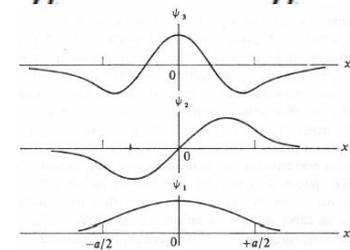
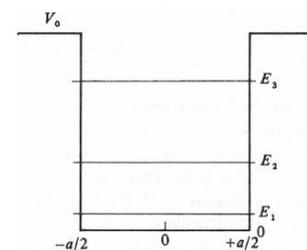
$$A = -B \Rightarrow \psi(x) = A' \sin k_1 x \Rightarrow \Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

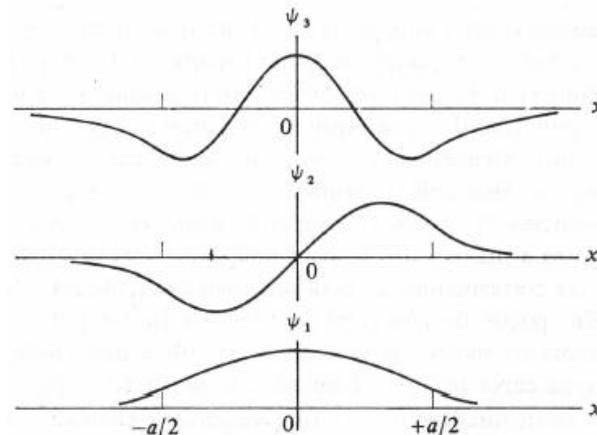
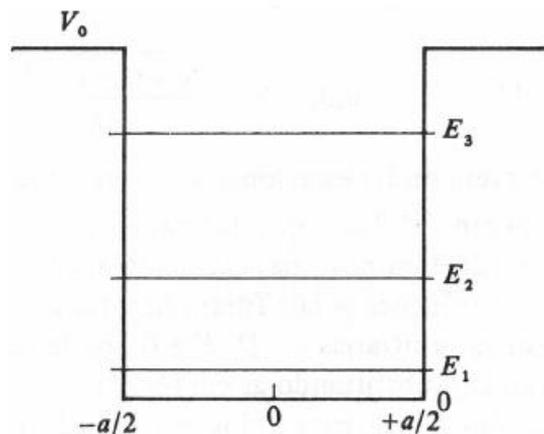
Se ambas são soluções \Rightarrow solução geral será uma combinação linear: $\psi(x) = A' \sin k_1 x + B' \cos k_1 x$

Regiões fora do poço:

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{para } x < -a/2. \quad \text{Com: } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar}$$

$$\psi(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x} \quad \text{para } x > a/2$$





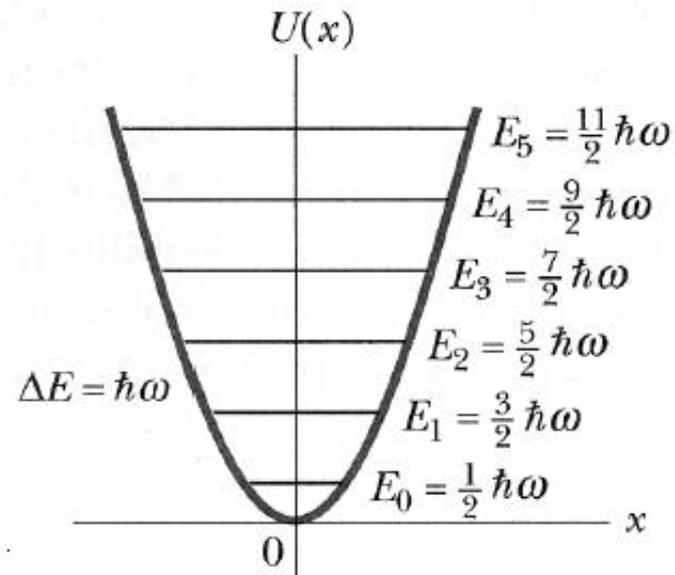
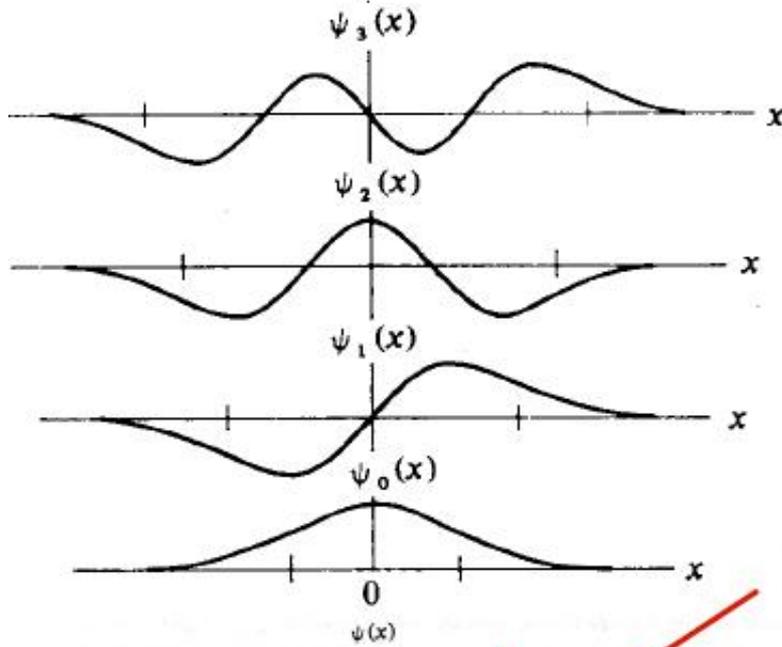
5) Normalização: neste caso, o limite de integração reduz-se ao intervalo $[-a/2, a/2]$, única região em que as funções de onda são não nulas.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n|^2 dx = \int_{-a/2}^{a/2} \frac{2}{a} \cos^2 \frac{n\pi x}{a} dx =$$

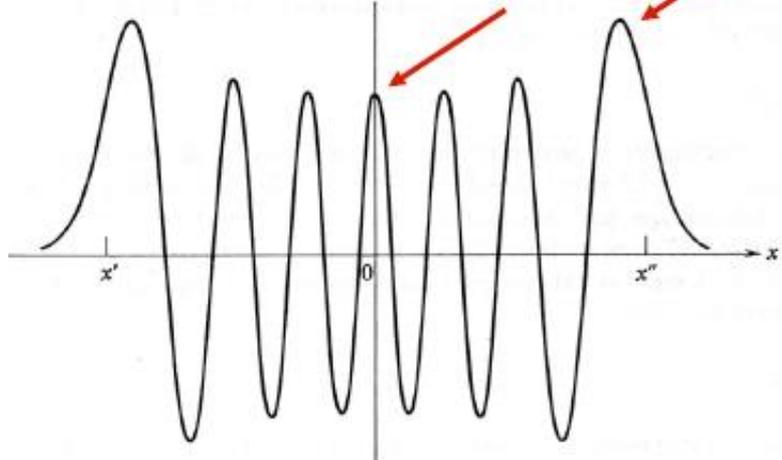
$$= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx = \frac{1}{a} \left(x + \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a} \right) \Big|_{-a/2}^{a/2} = 1$$

Revisão

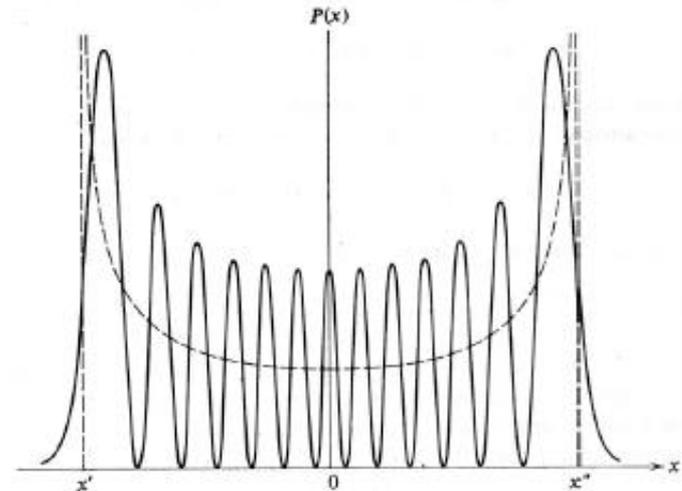
Voltando ao oscilador harmônico



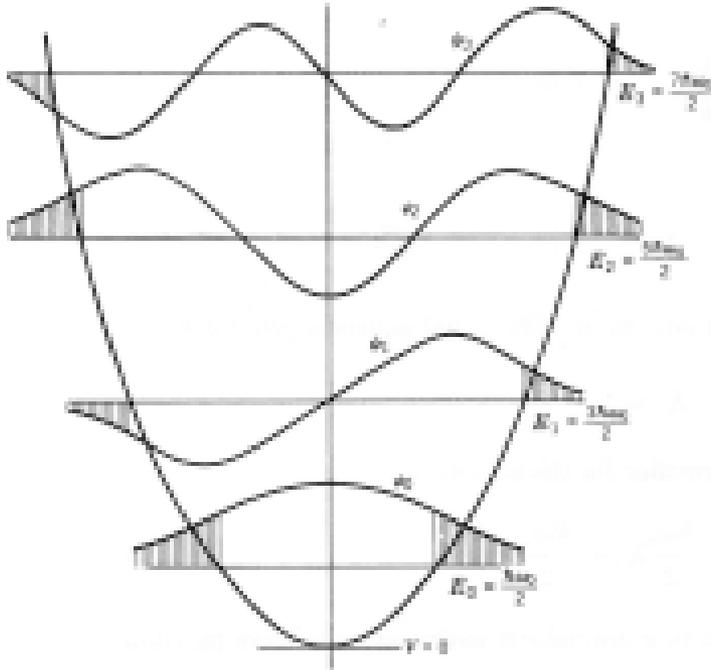
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi$$



$$|\psi|^2 \rightarrow$$



Revisão



$$E_n = (n + 1/2)h\nu \quad n=0,1,2,3,\dots$$

Podemos escrever a solução da função de onda como:

$$\psi_n(x) = H_n[u(x)]e^{-\frac{u(x)^2}{2}}$$

$$u(x) = \left[\frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} \right] x$$

Onde H_n são polinômios de ordem n , com $n \geq 0$

As funções H_n são relacionadas aos polinômios de Hermite que são tabelados tabulado

$$H_0[u(x)] = 1$$

$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$

$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$

$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$

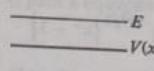
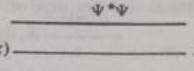
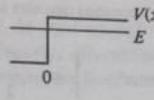
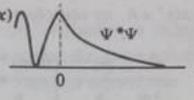
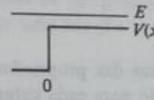
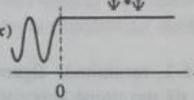
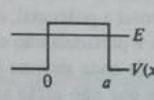
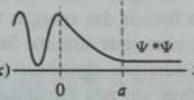
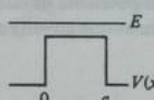
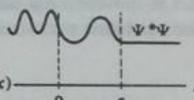
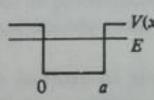
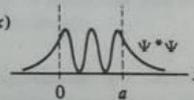
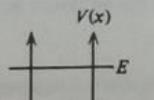
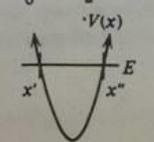
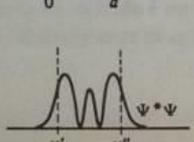
$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_2 = A_2 (1 - 2u^2) e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_1 = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_3 = A_3 (3u - 2u^3) e^{-\frac{u^2}{2}}$$

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

Nome do Sistema	Exemplo Físico	Energias Total e Potencial	Densidade de Probabilidade	Característica Significativa
Potencial nulo	Próton em um feixe de um cíclotron			Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal			Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo			Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula alpha tentando escapar de barreira coulombiana			Efeito túnel
Barreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados			Nenhuma reflexão em certas energias
Poço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo			Quantização da energia
Poço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa			Aproximação para um poço de potencial finito
Potencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando			Energia de ponto zero