

**Universidade de São Paulo  
Instituto de Física**

# **FÍSICA MODERNA I**

---

## **AULA 14**

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

**2o. Semestre de 2018  
Monitor: Felipe Prado**

<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=64495>

## Função de Onda e Probabilidade

<b>Caso</b>	<b>Função de onda</b>	<b>Contagens/min. na tela</b>
Elétron é medido passando pela fenda 1 ou 2	$\Psi_1$ ou $\Psi_2$	$ \Psi_1 ^2 +  \Psi_2 ^2$
Sem determinar a passagem do elétron	$\Psi_1 + \Psi_2$	$ \Psi_1 ^2 +  \Psi_2 ^2 + 2 \Psi_1  \Psi_2 \cos\phi$

# Probabilidade

Em 1925-1926 Max Born propôs como relacionar a  $\Psi$  (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 :

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

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

$\Psi$  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  $t$ .

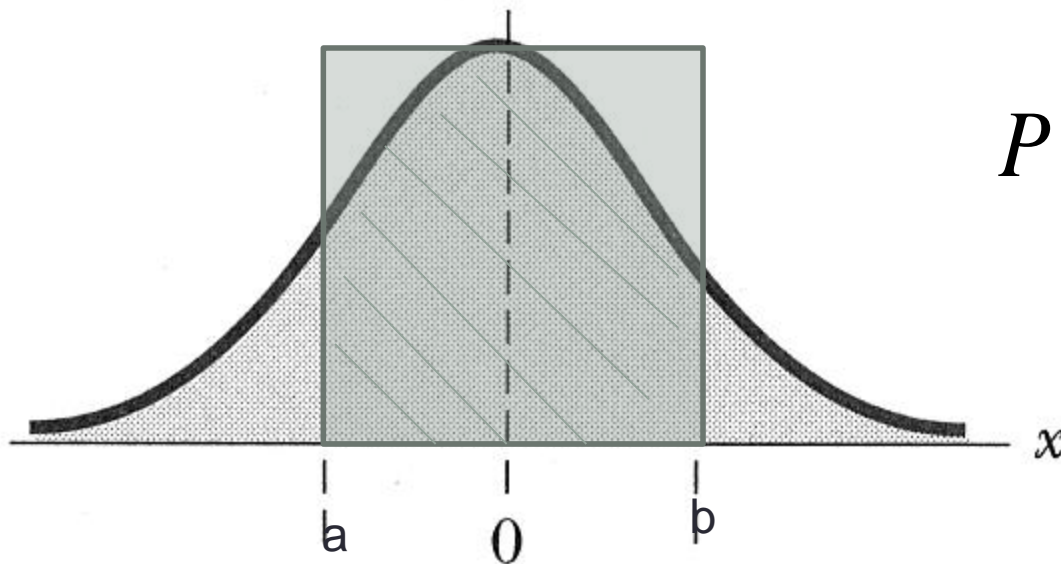
Já que a partícula deve ser encontrada em algum lugar ao longo do eixo x, a soma das probabilidade sobre todos os valores de x deve ser 1.

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

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

$$|\psi_0(x)|^2$$



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

o área embaixo da curva entre a e b

## OBSERVÁVEIS:

$\Psi$  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

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

# 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

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

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

$$p = \hbar k$$

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

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

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

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

ANALOGAMENTE:

$$E = \hbar \omega$$

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

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

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

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

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

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:

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

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

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 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  $a \sim 1 \text{ \AA}$  (angstrom)  $\sim 1 \times 10^{-10} \text{ m} \sim 0,1 \text{ nm}$ , paredes rígidas e  $V(x,t)=0$  (partícula livre)

O elétron quando faz este movimento

pela teoria de Wilson-Sommerfeld:  $\oint p_x dx = nh$

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

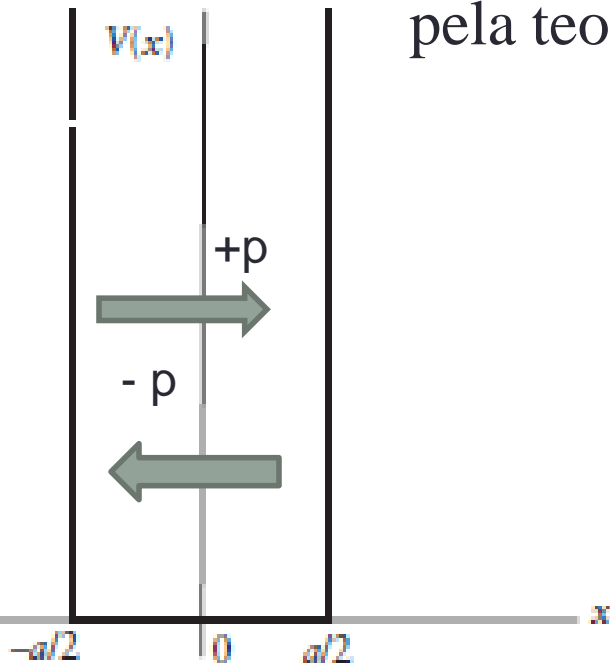
$$\int_{-a/2}^{a/2} p dx + \int_{-a/2}^{a/2} (p) dx = nh$$

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

$$p = \frac{nh}{2a}$$

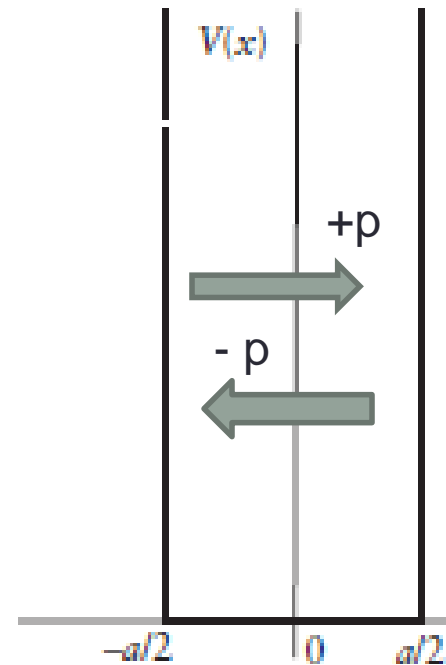
$$E = \frac{p^2}{2m}$$

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



## Elétron em uma caixa

Vamos pensar que um elétron se move em uma caixa unidimensional de tamanho  $a \sim 1 \text{ \AA}$  (angstrom)  $\sim 1 \times 10^{-10} \text{ m} \sim 0,1 \text{ nm}$



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

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

$$E = \frac{n^2 (hc)^2}{8mc^2 a^2} = \frac{n^2 (1240 \text{ eV} \cdot \text{nm})^2}{8 \times 0,511 \times 10^6 \text{ eV} \cdot (10^{-1} \text{ nm})^2}$$

$$E = n^2 3,76 \times 10^5 \times 10^{-6} \times 10^2 \text{ eV}$$

$$E = n^2 3,76 \times 10^1 \text{ eV} = n^2 37,6 \text{ eV}$$

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

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

# Elétron em uma caixa

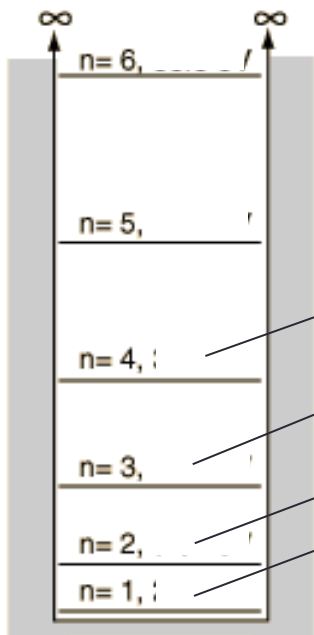
## Cálculo das energias quantizadas

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 )

$$a = \frac{n\lambda}{2} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

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



- 3o. Estado excitado
- 2o. Estado excitado
- 1o. Estado excitado
- Estado fundamental

$a=0.1 \text{ nm}$

Poço de potencial infinito

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

$$E = \frac{n^2 (1240 \text{ eV} \cdot \text{nm})^2}{8 \times 0,511 \times 10^6 \text{ eV} \cdot (10^{-1} \text{ nm})^2}$$

$$E = n^2 3,76 \times 10^5 \times 10^{-6} \times 10^2 \text{ eV}$$

$$E = n^2 3,76 \times 10^1 \text{ eV} = n^2 37,6 \text{ eV}$$

## Elétron em uma caixa

Vamos pensar que um elétron se move em uma caixa unidimensional de tamanho  $a \sim 1 \text{ \AA}$  (angstrom)  $\sim 1 \times 10^{-10} \text{ m} \sim 0,1 \text{ nm}$

Pelo Princípio de Incerteza

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

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

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

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

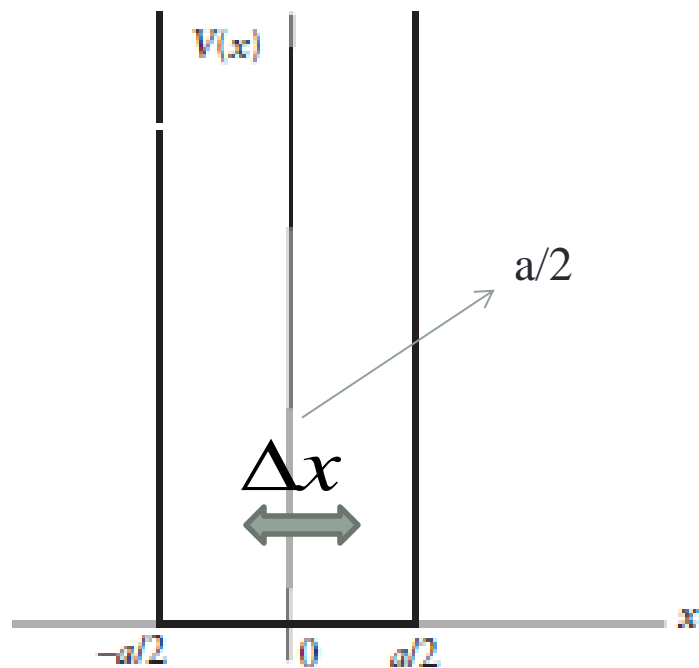
Por Sommerfield  $E = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$

A diferença é um fator

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

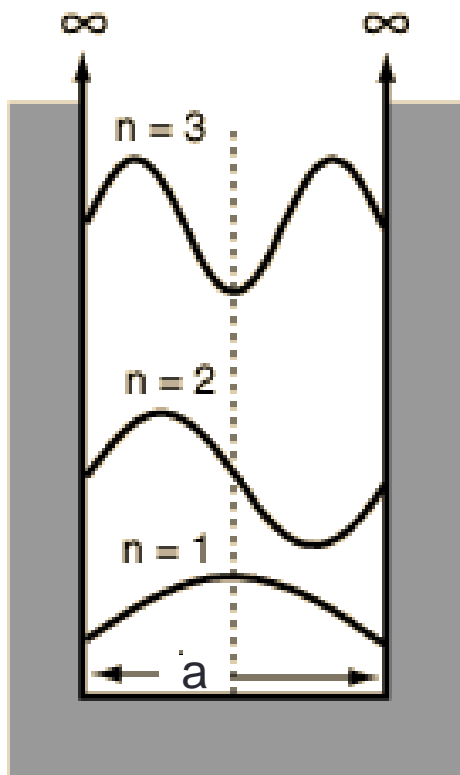
Valor dividido por  $\sim 10$

$$E_1 \cong 3,85 \text{ eV}$$



## 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



$x = 0$  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:

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

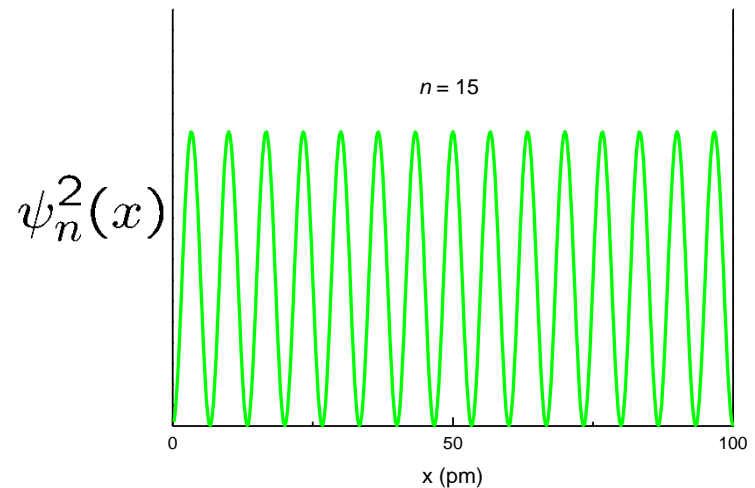
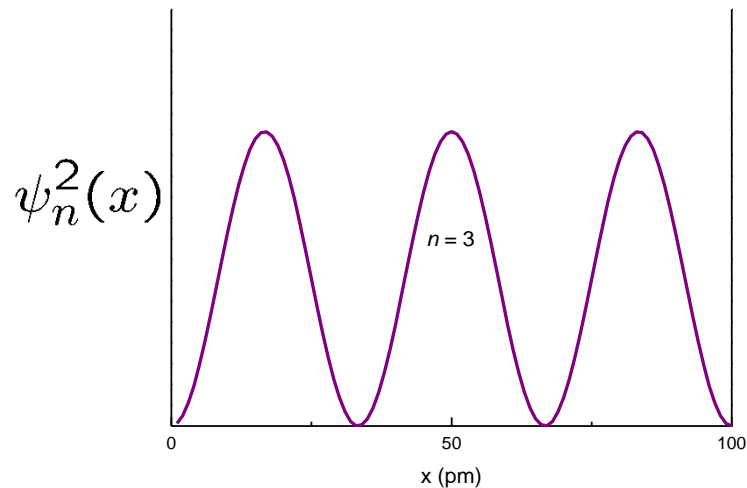
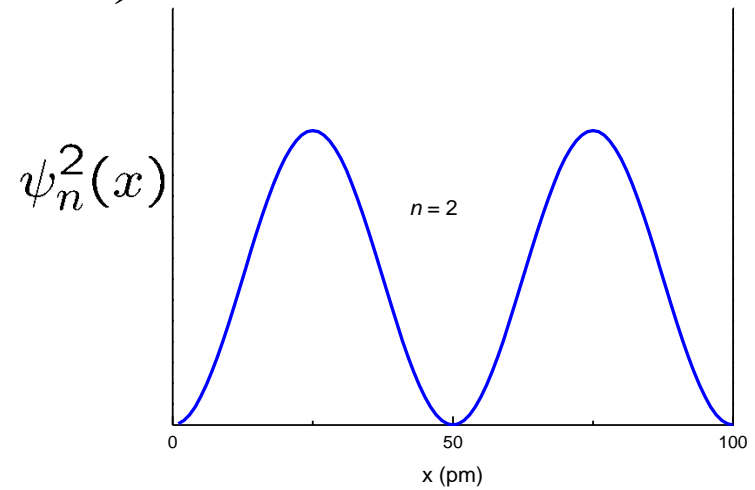
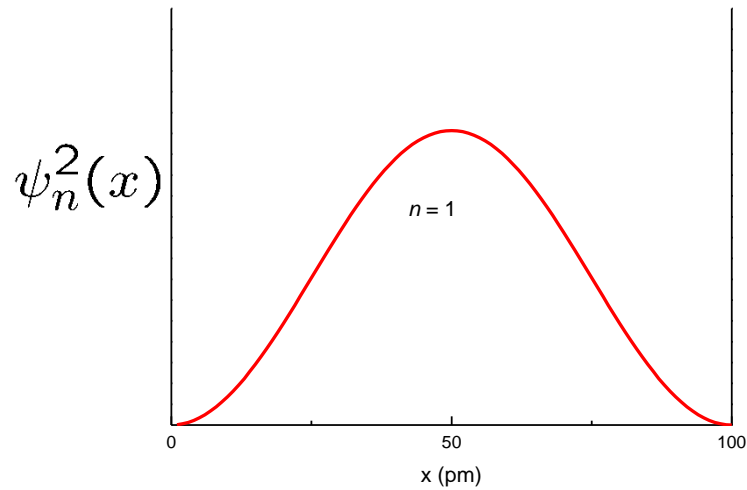
$$P(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)dx$$

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

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

# Elétron em uma caixa

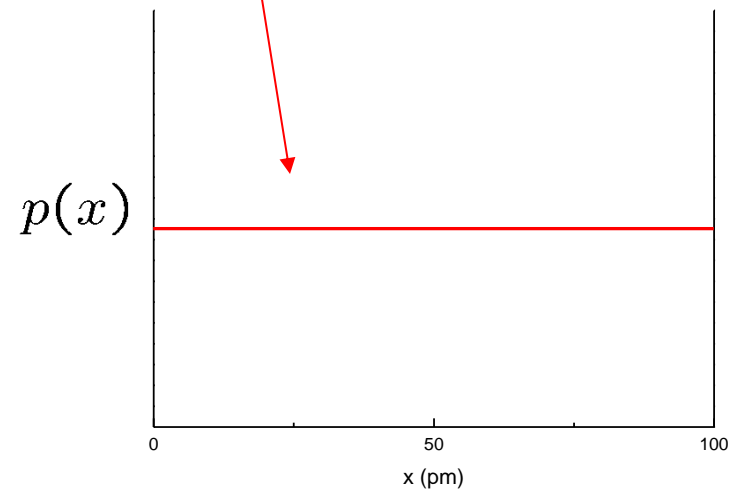
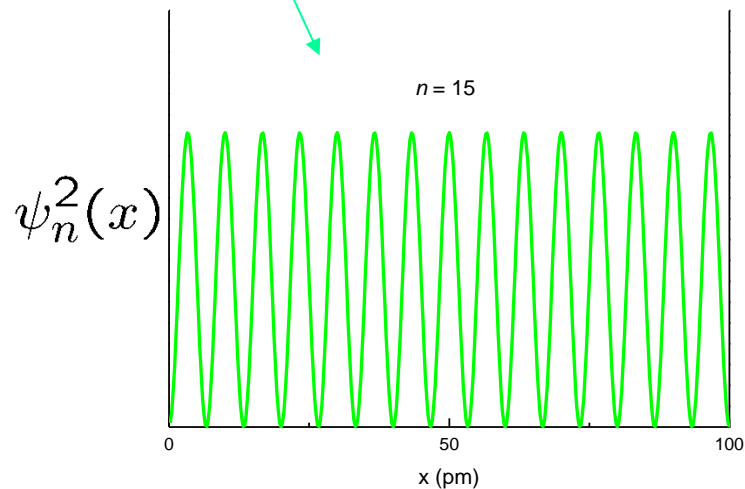
$$\Psi_n^2(x) = A^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right), n = 1, 2, 3, \dots$$





# Princípio da correspondência

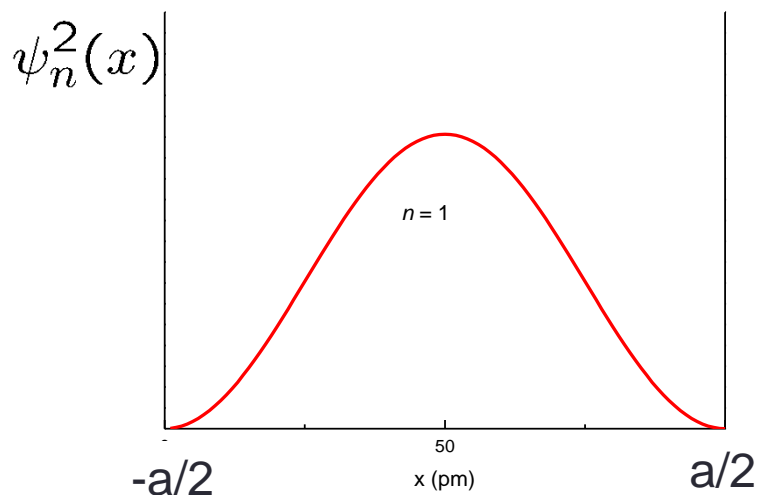
“Para grandes valores dos números quânticos, os resultados da física quântica tendem para os resultados da física clássica.”



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.

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

No nosso caso:



Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

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

Mudança de variável

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

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

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

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

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

Constante de normalização

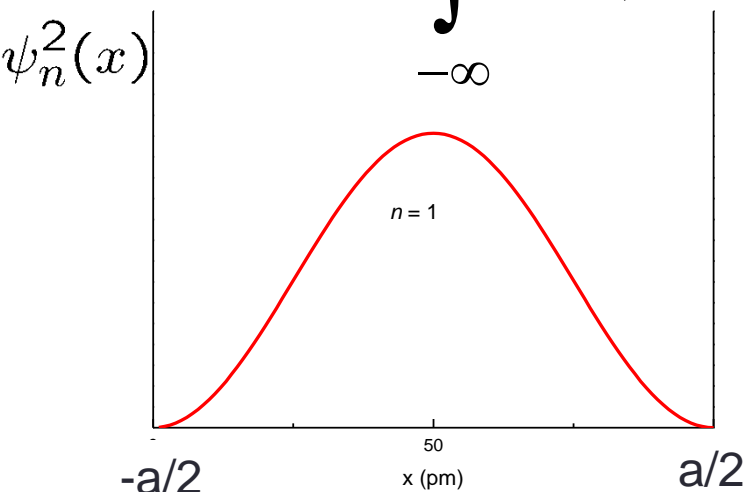
Qual o valor médio da posição da partícula dentro desta caixa:

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

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

Vimos que :

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



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

Função ímpar      Função par

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

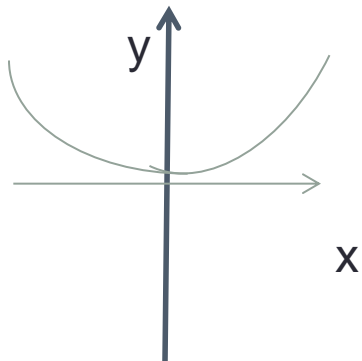
$$\bar{x} = \langle x \rangle = 0$$

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

# Funções Pares e Ímpares

## Função Par

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

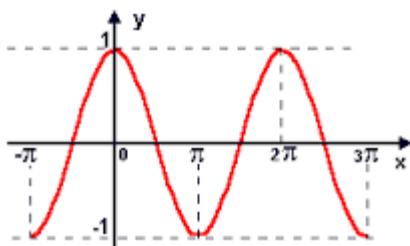


$$f(x) = x^2$$

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

$$4 = 4$$

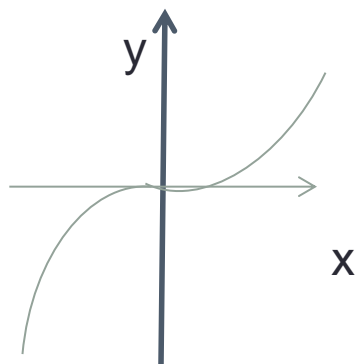
Simetria de um lado e outro (eixo y "espelho")



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

# Funções Pares e Ímpares

## Função Ímpar



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

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

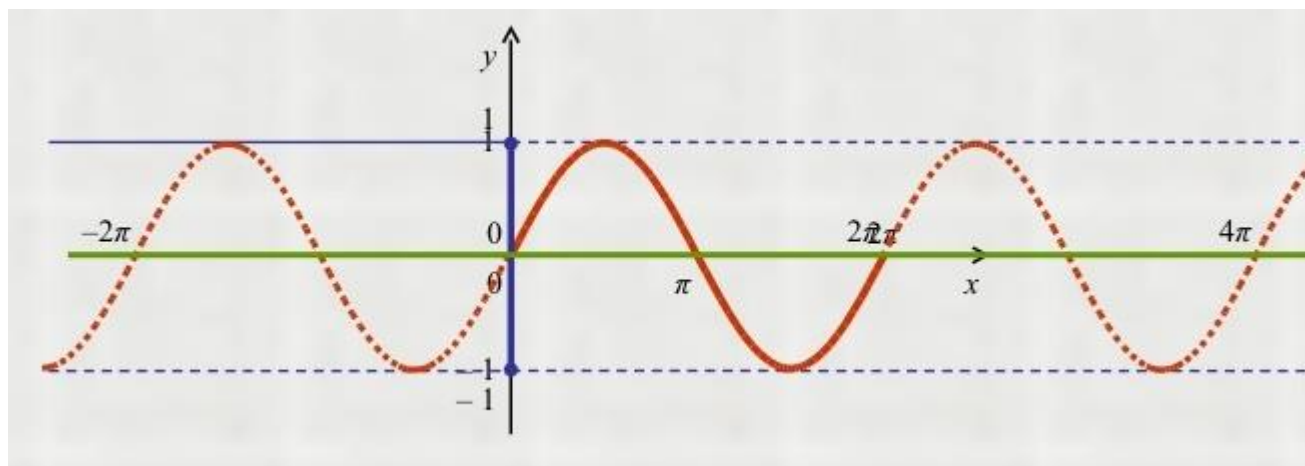
$$f(x) = x^3$$

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

$$8 \neq -8$$

Função ímpar tem  
simetria inversa

$$f(x) = \text{sen}x$$

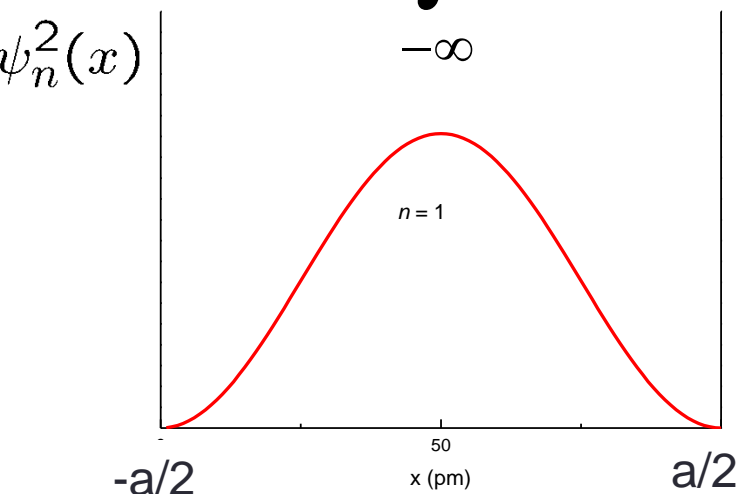


Qual o valor médio do momento da partícula dentro desta caixa:

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

Vimos que :

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} p P(x, t) dx = \int_{-a/2}^{+a/2} \Psi^*(x, t) p \Psi(x, t) dx \quad -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, n = 1, 2, 3 \dots$$



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

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

Função par

Função ímpar

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

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:

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

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

Sabemos que:

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

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

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

vale 1

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

O momento médio quadrático:

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

Que é uma medida das flutuações em torno da média, pois a partícula pode ser encontrada com momento

$$p = +\sqrt{2mE}$$

ou

$$p = -\sqrt{2mE}$$