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 2018

Página do curso:
https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=64495

03/10/2018

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:

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

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

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:

$$E = E_c + E_p \qquad E_c = \frac{p^2}{2m}$$

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: $E_c = \frac{h^2}{2\lambda^2 m}$ então : $E_c = \frac{h^2}{2\lambda^2 m} = E - E_p$

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

$$\Psi(x,t) = \psi(x).\phi(t)$$

$$\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\Psi(x,t) = \psi(x).\phi(t)$$

Cuja parte espacial, chamada de autofunção é obtida pela equação diferencial:

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

As derivadas agora são ordinárias e não mais parciais

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cancel{\phi(t)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\cancel{\psi(x)}\cancel{\phi(t)} = i\hbar\cancel{\psi(x)}\frac{d\phi(t)}{dt} \qquad x\,\frac{1}{\psi(x).\phi(t)}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cancel{\phi(t)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\cancel{\psi(x)}\cancel{\phi(t)}=i\hbar\cancel{\psi(x)}\frac{d\phi(t)}{dt} \qquad x\,\frac{1}{\psi(x).\phi(t)}$$

Só depende de x

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)=i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}$$

Só depende de t

São iguais uma constante C (constante de separação)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)=C$$

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}=C$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt}=\frac{C}{i\hbar}\phi(t)=-\frac{iC}{\hbar}\phi(t)$$

$$\phi(t)=e^{-\frac{iCt}{\hbar}}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Temos:

$$\phi(t) = e^{-\frac{iCt}{\hbar}}$$

$$\phi(t) = \cos\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) - isen\left(\frac{Ct}{\hbar}\right)$$

$$\phi(t) = \cos\left(2\pi\frac{Ct}{h}\right) - isen\left(2\pi\frac{Ct}{h}\right)$$

Temos uma função oscilatória de frequência f=C/h, mas segundo de Broglie :

$$E = h\nu$$

$$\nu = \frac{E}{h}$$

$$\boxed{C = E}$$

$$\phi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = C$$

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

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = C$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

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

Para ter sentido físico, devemos impor algumas 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

Partícula sujeita a V(x) = Vo

Postular a equação de Schrödinger para uma partícula de massa m livre V(x,t)=Vo
Primeiro podemos pensar em uma função de onda do tipo cos(kx-wt), no entanto esta não satisfaz a solução da Eq. De Schrödinger (primeira derivada é seno e segunda derivada é cosseno). O mesmo acontece para uma função de onda do tipo sen(kx-wt). Entretanto a combinação linear destas soluções é uma forma exponencial da função harmônica que satisfaz a equação de Schrödinger

$$p = \frac{h}{\lambda}, \nu = \frac{E}{h}$$

$$\Psi(x,t) = A\left[\cos(kx - \omega t) + isen(kx - wt)\right]$$

real

imaginária

Usando a fórmula de Euler

$$e^{i\theta} = \cos\theta + isen\,\theta$$

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - isen\,\theta$$

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

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

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = (ik)^2 A e^{i(kx-\omega t)} = -k^2 \Psi(x,t)$$

Substituindo na equação de Schrödinger e fazendo V(x,t)=Vo temos:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2\Psi) + V_0\Psi = i\hbar(-i\omega)\Psi$$

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

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi + V_0\Psi = \hbar\omega\Psi$$

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

$$\left(\frac{p^2}{2m}\right) + Vo = E$$

$$E = \hbar\omega$$

Energia total da partícula se conserva

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Estudar a partícula livre que não age nenhuma força é aplicada

V(x,t) = 0

$$\Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Vemos que a função de onda realmente apresenta um estado estacionário com energia

$$E = \hbar\omega$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2(Ae^{ikx})}{dx^2} + 0(Ae^{ikx}) = E\psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2 Ae^{ikx} = E\psi(x)$$

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

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} Ae^{ikx} = \frac{p^2}{2m}\psi(x) = E\psi(x)$$

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

Equação de Schrödinger

Assim para a partícula livre, não há restrições sobre o valor de p e, assim não há restrições para o valor de energia

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

Se V(x) não for constante, então as soluções de uma equação de Schrödinger são possíveis apenas para certos valores de E. Esses valores representam os níveis de energia permitidos descritos por V(x)

Esta descoberta é muito importante pois antes deste desenvolvimento não havia forma de prever os níveis de energia a partir de qualquer teoria fundamental, a não ser pelo método de Bohr, cuja eficiência era bastante limitada.

A dependência da função de onda com o tempo é essencial para estudar os detalhes das transições entre estados, a emissão e absorção de fótons e a vida média dos estados.

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Vimos que a função de onda da partícula livre apresenta um momento linear bem definido o que segundo o principio de incerteza, não temos a menor ideia onde a partícula está.

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

$$(A^* e^{-ikx}e^{i\omega t}).(Ae^{ikx}e^{-i\omega t}) = A^* Ae^0 = \left|A\right|^2$$

A função densidade de probabilidade não depende do tempo (estado estacionário de energia bem definida), e ela também não depende da posição, o que indica que a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer lugar no espaço é igual.

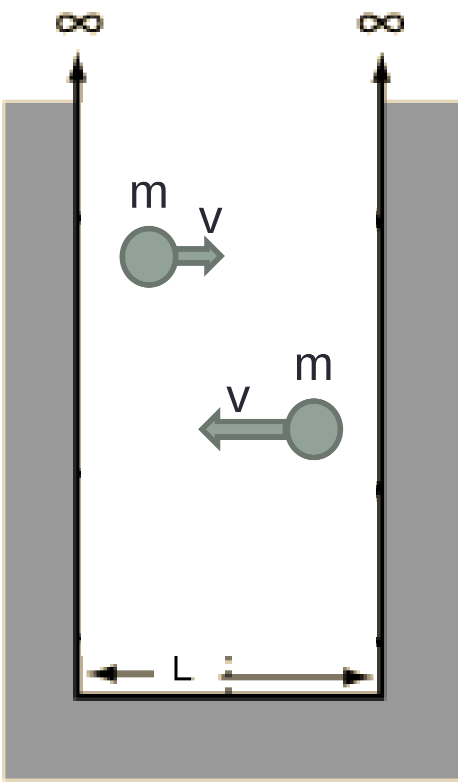
Logo para a partícula livre temos:

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Função de onda de uma partícula em uma caixa



Uma partícula de massa m desloca-se nesse sistema
Condições para a função de onda:

- Dentro da caixa V(x) = 0, fora V(x)=infinito
- Como a partícula esta confinada dentro da caixa $0 \leq x \leq L$ esperamos que a $\psi(x) = 0$ fora da caixa
- Estão de acordo com a Eq. de Schroedinger que diz que a função deve ser **finita** dentro da caixa e a função deve ser zero quando V(x) é infinito.
- A função de onda deve ser **contínua** para ser uma solução matemática da Eq. De Schrodinger. Então $\psi(x) = 0$ nas fronteiras das regiões x=0 e x=L
- Finalmente a derivada da função de onda deve ser também contínua – somente teremos nós nas paredes dada a descontinuidade da primeira derivada.

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Partícula dentro da caixa $0 \le x \le L$

Dentro da caixa V(x) = 0, fora V(x)=infinito

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

A equação de onda que satisfaz esta a eq. De Schrödinger poderia ser:

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

1) **É contínua e possui derivada primeira contínua** $\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx}$
2) **Problema: essa função de onda não satisfaz as condições de contorno em que a função deve ser zero em x=0 e x=L**

$$x = 0 \Rightarrow \psi(0) = Ae^0 = A$$
$$x = L \Rightarrow \psi(L) = Ae^{ikL}$$

Só será zero se A=0, ai a função de onda seria zero e não existiria nenhuma partícula

Para sair disto precisamos lembrar que para um estado estacionário podemos ter uma superposição de ondas :

$$\psi(x) = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx}$$