Instituto de Física USP

Física V - Aula 26

Professora: Mazé Bechara

Aula 26 – Bases da Mecânica quântica e equações de Schroedinger. Aplicação e interpretações.

1. **Outros postulados da interpretação de Max-Born para a onda da partícula. A equação geral da mecânica quântica de Schroedinger.**

2. **Propriedades das funções de onda decorrentes da interpretação probabilística de Max Born.**

3. **Aplicação: funções de onda e seus resultados na interpretação de Max Born.**

Mecânica Ondulatória para a partícula: A Interpretação Estatística de Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 01: o estado dinâmico de uma partícula pode ser descrito por uma **função de onda espaço-temporal** $\Psi(\vec{r},t)$ que permite extrair (todas) **informações** sobre a dinâmica da partícula.

Postulado 02: O que tem siginificado físico direto não são as funções de onda espaço-temporais $\Psi(\vec{r},t)$, que podem até ser funções imaginárias. **O significado físico está na grandeza** $|\Psi(\vec{r},t)|^2$.

O módulo ao quadrado da função de onda se relaciona com a **densidade de probabilidade,** ou seja**,** no caso de movimentos vale a relação**:**

$$\rho(x,y,z,t) = \frac{dP(\vec{r},t)}{dV} = |\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

dP($\vec{r}$,t) é a probabilidade de **uma única** partícula estar na posição $\vec{r}$, dentro do volume dV=dxdydz (em coordenadas cartesianas), no instante t, por unidade de dV.

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Analogamente, para os movimentos **bidimensional e unidimensional** a relação do módulo ao quadrado da função de onda é com a densidade superficial e a densidade linear de probabilidade, **respectivamente**:

$$\sigma(x,y,t) = \frac{dP(\vec{r},t)}{dA} = |\Psi(\vec{r},t)\,|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

$$\lambda(x,t) = \frac{dP(x,t)}{dx} = |\Psi(x,t)\,|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$

Postulado 3. Há uma outra função de onda que também define **o estado dinâmico** da partícula e a função de onda momento linear-temporal $\Phi(\vec{p},t)$ que **analogamente tem seu quadrado do módulo definido por:**

$$\rho(p_x,p_y,p_z,t) = \frac{dP(\vec{p},t)}{d\vec{p}} = |\Phi(\vec{p},t)|^2 = \Phi^*\,(\vec{p},t)\Phi(\vec{p},t)$$

probabilidade da partícula ter momento linear $\vec{p}$, dentro do volume $d\vec{p} = dp_x dp_y dp_z$, por unidade de $d\vec{p}$

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 3. As funções de onda $\Psi(\vec{r},t)$e $\Phi(\vec{p},t)$ **são a transformada de Fourier uma da outra,** ou seja, ao se conhecer uma a outra pode ser determinada pela transformada de Fourier. **O vínculo entre as duas funções de onda vem das relações de incerteza,** que relaciona a indeterminação de cada coordenada com o momento linear naquela direção.

Postulado 4. Quando se descreve a dinâmica da partícula pelas funções de onda espaço real $\Psi(\vec{r},t)$ **as grandezas físicas que dependem somente da posição são representadas pelas mesmas funções que na Física clássica.**

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 5. As grandezas que dependem da velocidade, **quando utilizadas as funções espaço-temporais, devem ser representadas por operadores diferenciais,** construídos **a partir das expressões clássicas que definem a grandeza física, substituindo o momento linear pelo operador diferencial:**

Vetorialmente: $$\hat{\vec{p}} = \hat{p}_x\vec{i} + \hat{p}_y\vec{j} + \hat{p}_z\vec{k} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} - i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\vec{j} - i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$$

Em Componentes: $$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Uma razão do Postulado 5: O valor esperado ou valor médio de uma grandeza física $\vec{f}(\vec{p})$ que depende do momento linear pode ser determinado com uso da função de onda do **espaço real-tempo** da seguinte forma:

$$\langle \vec{f}(\vec{p}) \rangle = \int |\Phi(\vec{p},t)|^2 \vec{f}(\vec{p}) d\vec{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\vec{r},t)\, \hat{\vec{f}}(\hat{\vec{p}}) \Psi(\vec{r},t)\, dV$$

Observe que:

1. *o operador $\hat{\vec{f}}(\hat{\vec{p}})$ é obtido substituindo-se na expressão clássica da grandeza física $\vec{f}(\vec{p})$ o momento linear pelo operador $\hat{\vec{p}}$.*

Interpretação física: a média é o resultado que a teoria prevê para várias medidas da grandeza física $\vec{f}(\vec{p})$ no mesmo estado quântico.

Valem relação e interpretação similares de f para grandeza escalar.

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 6. Se a grandeza física depender da posição e do momento linear, como por exemplo, o momento angular, vale a mesma regra de construção de operador da grandeza física, com a "complicação" que o operador dependerá de posição e de operadores diferenciais de posição.

Obs. ***nessa disciplina só usaremos a função de onda no espaço real*** $\Psi(\mathbf{r},t)$ *já que trabalharemos com a mecânica quântica no formalismo de Schroedinger.*

Mecânica Ondulatória Para A Partícula: A Interpretação Estatística De Max Born

Ref. Enge, Wehr & Richards - Introduction to Atomic Physics

Postulado 7: Quando uma grandeza física (F) obedece a equação do tipo:

$$\hat{F}(\vec{r},\vec{p})\Psi(\vec{r},t) = f_0\Psi(\vec{r},t)$$

Que é conhecida em matemática como **equação de auto-valores**, então $\Psi(\vec{r},t)$ é chamada de auto–função da grandeza física F e a constante f_o o auto-valor:

Se (e só se**) o auto-valor f_o for real**, se interpreta que a grandeza física F na dinâmica quântica descrita pela função de onda Ψ é **uma constante de movimento,** ou seja, **F não muda de valor, e este valor (constante) é f_o em qualquer medida**. Essa definição vale da mesma forma para grandezas vetoriais.

Obs. Esta equação é a equação da autovalor e a função é chamada de auto-função da matemática. Mas na matemática o autovalor pode ser imaginário.

A equação básica da Mecânica Quântica no formalismo de Schroedinger

Postulado 8.

$$\widehat{H}\Psi(\vec{r},t) \equiv [\hat{E}_c + U(\vec{r},t)]\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)$$

•Usando o postulado 5 para determinar o operador energia cinética:

$$\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r},t)\}\Psi(\vec{r},t) = \{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\}\Psi(\vec{r},t)$$

No caso de movimento unidimensional:

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

A equação de Schroedinger é compatível com o princípio de incerteza ou de indeterminação de Heisenberg e as relações de de Broglie.

A equação de Schroedinger para todas as partículas em movimento não relativístico

$$\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r},t)\}\Psi(\vec{r},t) = \{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\}\Psi(\vec{r},t)$$

Propriedades das funções de onda decorrentes da interpretação probabilística

1. As **<u>funções de onda</u>** devem ser: **<u>unívocas,</u>** porque a probabilidade (módulo ao quadrado das funções) em cada ponto não pode ter valores diferentes; **<u>contínuas,</u>** porque as probabilidades não podem ter valores indefinidos em nenhum ponto; **<u>finitas em todos os pontos</u>** do espaço, porque probabilidades são finitas.

2. As **funções de onda de estados ligados** (que descrevem partículas que ocupam região finita do espaço) devem ser **normalizadas**, ou seja:

$$\iiint |\Psi(\vec{r},t)\ |^2 dV = 1 \Rightarrow \Psi(\pm\infty,t) = 0$$

No caso de **estados não ligados**, nos quais a partícula pode ir a posições no infinito (infinitamente longe da origem do potencial de interação), **a função de onda deve ser finita em qualquer ponto. A possibilidade de ocupar um espaço infinito torna a função de onda não normalizável**. O que se impõe, nestas situações físicas, é **a conservação da partícula** (**a ser discutido posteriormente como se faz).**

Propriedades das funções de onda decorrentes da interpretação probabilística

2. Observação importante:

No caso de **estados não ligados**, nos quais a partícula têm probabilidade não nula de ir a posições no infinito (infinitamente longe da origem do potencial de interação), **a função de onda deve ser finita em qualquer ponto. Porém a possibilidade de ocupar um espaço infinito torna a função de onda não normalizável**.

O que se impõe, nestas situações físicas, é **a conservação da partícula, ou seja, que ela esteja em algum lugar do espaço infinito – não desapareça! (a ser discutido como se faz posteriormente)**

Propriedades decorrentes Da Interpretação Probabilística

3. As **<u>derivadas espaciais das funções de onda</u>** também devem ser: **<u>unívocas, contínuas e finitas em todo o espaço</u>**. As derivadas estão associadas aos valores das componentes do momento linear p no espaço das funções de onda espaço-temporal, e devem ser unívocos e finitos.

☠***Cuidado com o caso particular de energia potencial "infinita" em alguns pontos ou regiões do espaço****, aproximação no caso de energias potenciais muito maiores do que a energia total, e usada como boa aproximação da realidade. Nestes casos não há continuidade das derivadas das funções de onda. Mas há continuidade das funções de onda!*

Aplicação - interpretações na mecânica quântica

Uma partícula de massa m tem funções de onda abaixo: Questãp Q7 do Guia ao tópico IV

$$\Psi(0 \le x \le a, t) = A sen\frac{n\pi x}{a}\exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2}n^2 t\right) \qquad \Psi(x \le o e x \ge a, t) \sim 0$$

(a) Determine a densidade de probabilidade de se ter a partícula em uma posição em um certo instante por unidade de dx. Comente como tal resultado depende do tempo.

(b) Determine a constante A que permite tais funções representarem funções de onda na mecânica quântica. Justifique.

(c) Quais as posições mais prováveis da partícula no estado com n=1? E com n=2? E as menos prováveis? O que você entende por "posição mais provável" e "posição menos provável" em termos de medidas? Justifique.

(d) Determine a probabilidade da partícula ser encontrada a um quarto do comprimento da caixa de uma das paredes para qualquer estado n. Mostre no gráfico pertinente, nos estados n=1 e n=2, o que representa a probabilidade. Justifique. Sua resposta depende da definição da origem do eixo? Justifique.

(e) O momento linear é uma constante no movimento da partícula? E a energia ? Justifique formalmente. Se forem constantes determine os valores do momento linear e energia; se não forem constantes determine os valores médios. Justifique.

(f) É o quadrado do momento linear uma constante de movimento? Se for, determine o seu valor. Se não for, determine o valor médio.

(g) Não são contraditórias as respostas aos dois itens anteriores? Justifique e comente.

(h) O que é possível prever, usando a função de onda espaço temporal, sobre o resultado de <u>uma unica medida</u> das seguintes grandezas físicas da partícula: f1 posição; f2 energia; f3 momento linear? Justifique suas respostas.

(i) Responda o mesmo que no item anterior no caso de <u>cem (100) medidas</u>. Justifique.

(j) O que é mostrar formalmente que as funções de onda dadas são compatíveis com o princípio de incerteza? Faça detalhadamente em casa!