Física Moderna I
Aula 14

Marcelo G Munhoz
Pelletron, sala 245, ramal 6940
munhoz@if.usp.br

Observáveis

- Como podemos agora relacionar essa função de onda com grandezas observáveis?
  - A interpretação probabilística de Born é o caminho para isso
- Mas, afinal como podemos obter a posição, o momento ou a energia de uma partícula a partir da função de onda, que é o que podemos determinar de maneira exata no mundo quântico?

Observáveis: Valor Esperado

- Diante da interpretação probabilística de Born, podemos obter apenas valores médios ou **valores esperados** para as grandezas

- Por exemplo, podemos obter o valor esperado para a posição de uma partícula a partir da expressão:

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

Observáveis: Valor Esperado

- Podemos generalizar esse resultado para qualquer grandeza que dependa apenas da posição *x*:

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

- Mas, como calcular o valor esperado para o momento ou energia da partícula?

Observáveis: Valor Esperado

- Na física quântica, qualquer grandeza é obtida a partir de um operador quântico aplicado à função de onda
- No caso da posição o operador é o próprio valor da posição, ou seja

  $\hat{x} \leftrightarrow x$

- No caso do momento, o operador é dado por:

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

- E no caso da energia $\hat{E} \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

Observáveis: Valor Esperado

- Com isso, temos que o valor esperado para qualquer grandeza que dependa da posição, do momento e do tempo é dado por:

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

Equação de Schroedinger Dependente do tempo

- A forma mais geral da equação de Schroedinger dependente do tempo é dada por:
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,t)$$
- Nosso objetivo é resolver essa equação para diversas formas de *V(x,t)*

Equação de Schroedinger Independente do tempo

- Inicialmente, podemos resolver essa equação para os casos em que o potencial só depende da posição, ou seja:

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

- Neste caso, podemos fazer a separação de variáveis dada por:

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

Equação de Schroedinger Independente do tempo

- Com essa separação obtém-se para a parte temporal da função de onda:

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

- Portanto, a função de onda é dada por:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

- cuja parte espacial, chamada de autofunção, é obtida pela equação diferencial ordinária:

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

Equação de Schroedinger Independente do tempo

- Notamos que a densidade de probabilidade da função de onda neste caso é dada por:

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

$$P(x,t)dx = \psi^*(x)e^{+iEt/\hbar} \cdot \psi(x)e^{-iEt/\hbar}dx$$

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

ou seja, não depende do tempo. Essas soluções da equação de Schroedinger são chamadas de **estados estacionários**

Propriedades da Função de Onda

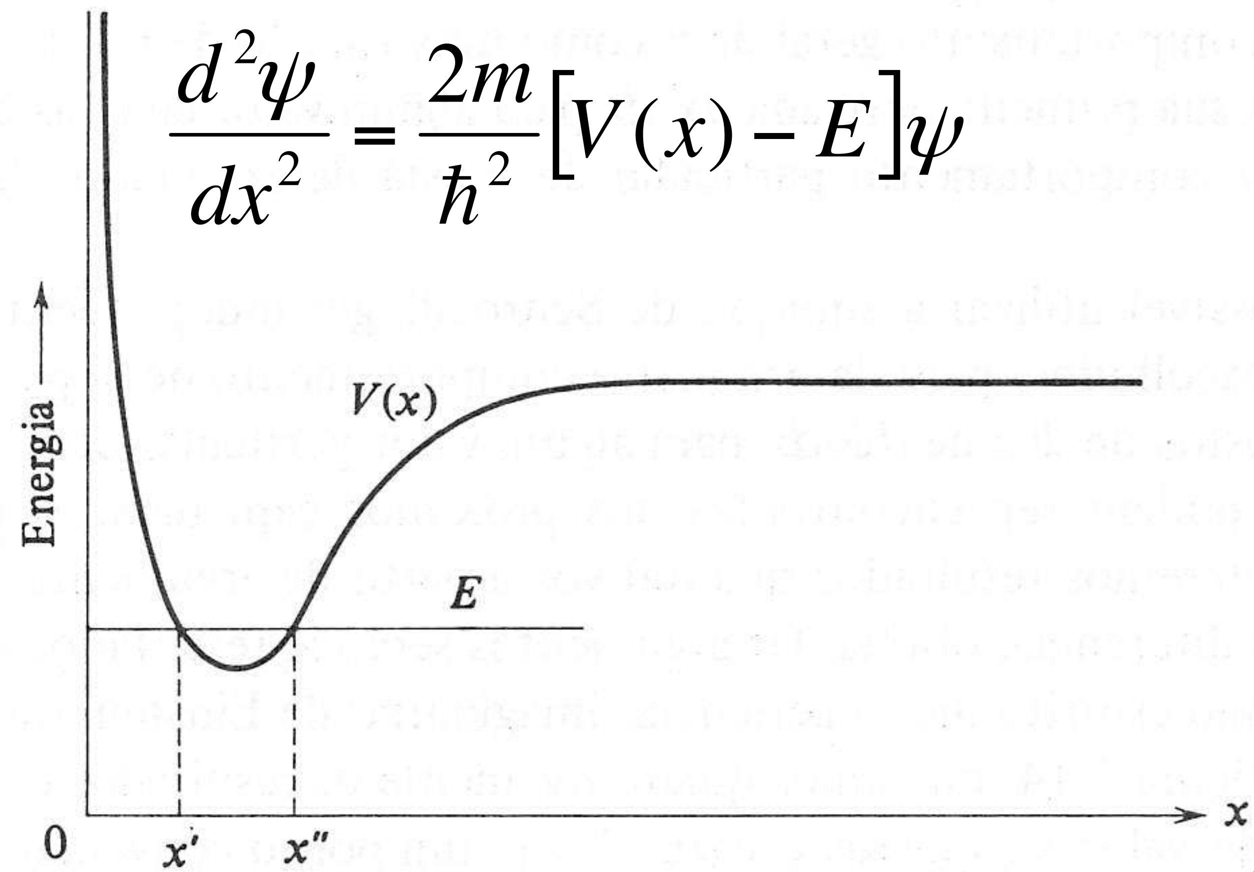
- As autofunções e sua primeira derivada, para serem uma solução aceitável da equação de Schroedinger, precisam possuir as seguintes propriedades:
  - Ser finita
  - Ser unívoca
  - Ser contínua
- Essas condições são necessárias para que as funções de onda representem os observáveis de maneira adequada

Soluções da Equação de Schroedinger Independente do tempo

- Para uma dada forma de *V(x)*, a equação de Schroedinger independente do tempo impõe uma relação entre a derivada segunda da função de onda e seu próprio valor

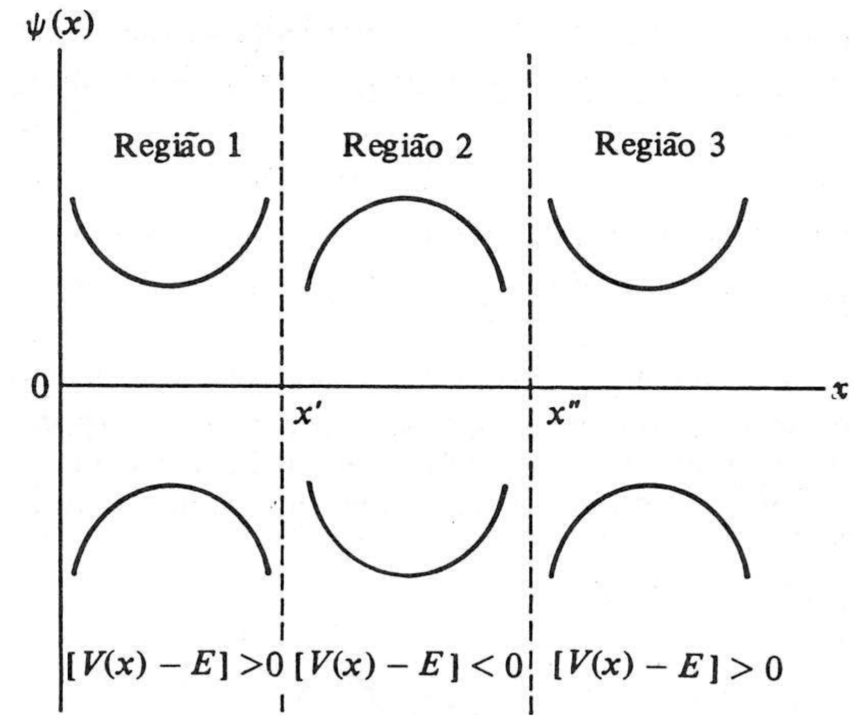
- Impondo condições iniciais para Ψ e dΨ/dx, pode-se determinar Ψ para qualquer valor de *x*

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

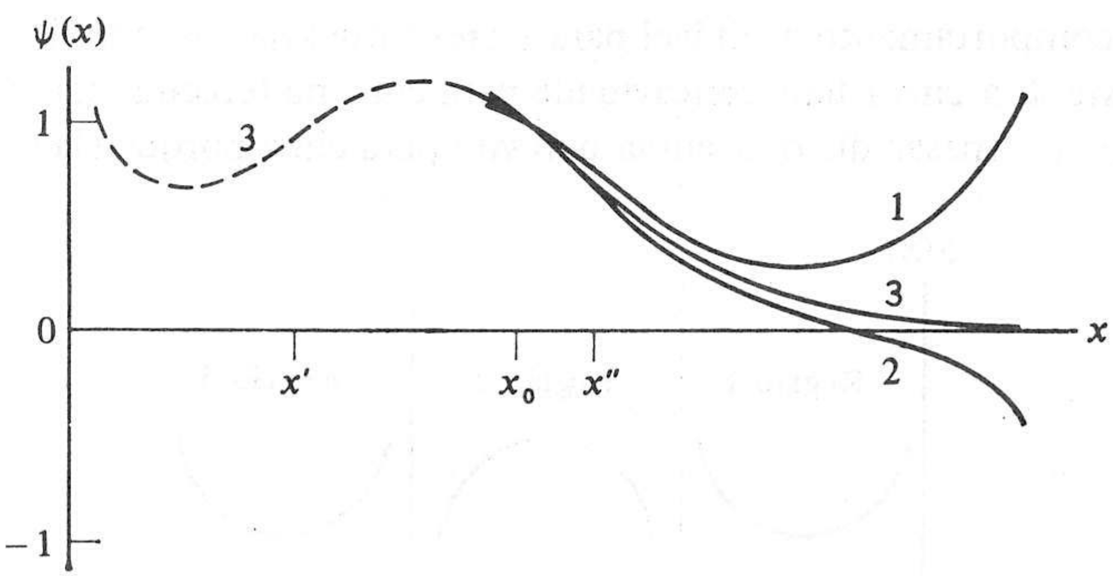


Soluções da Equação de Schroedinger Independente do tempo

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



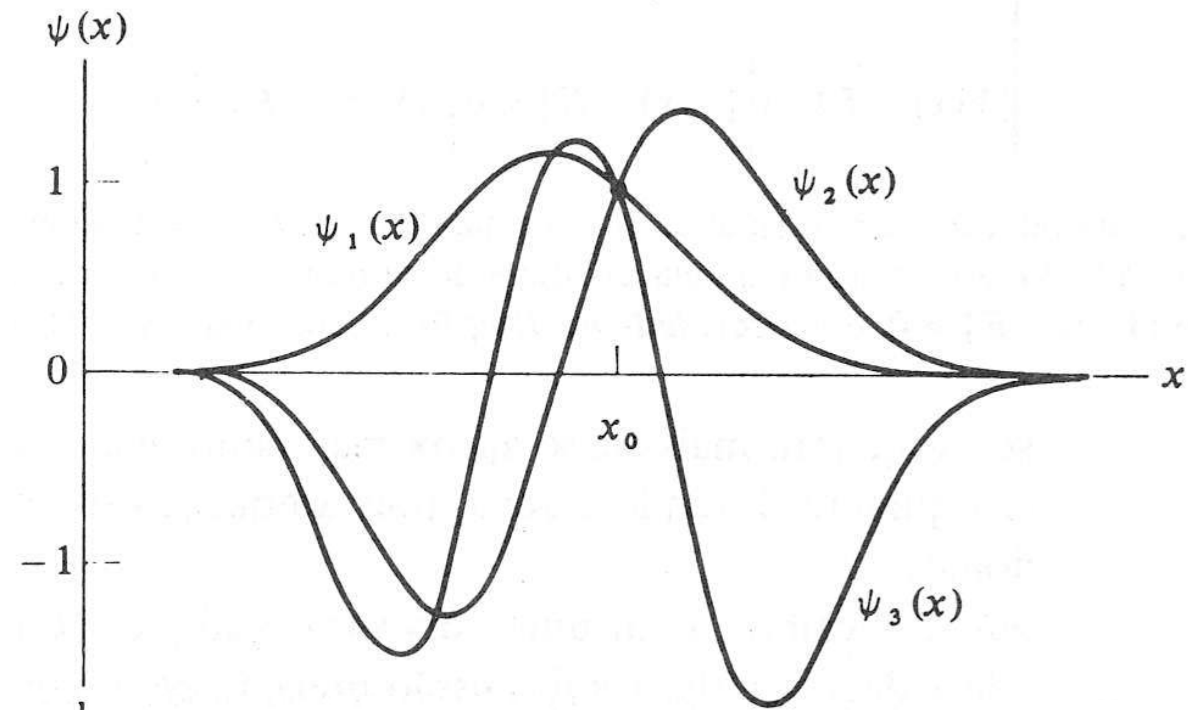
- O sinal de [*V(x)*-*E*] e Ψ(x) determinam a concavidade de Ψ(x)



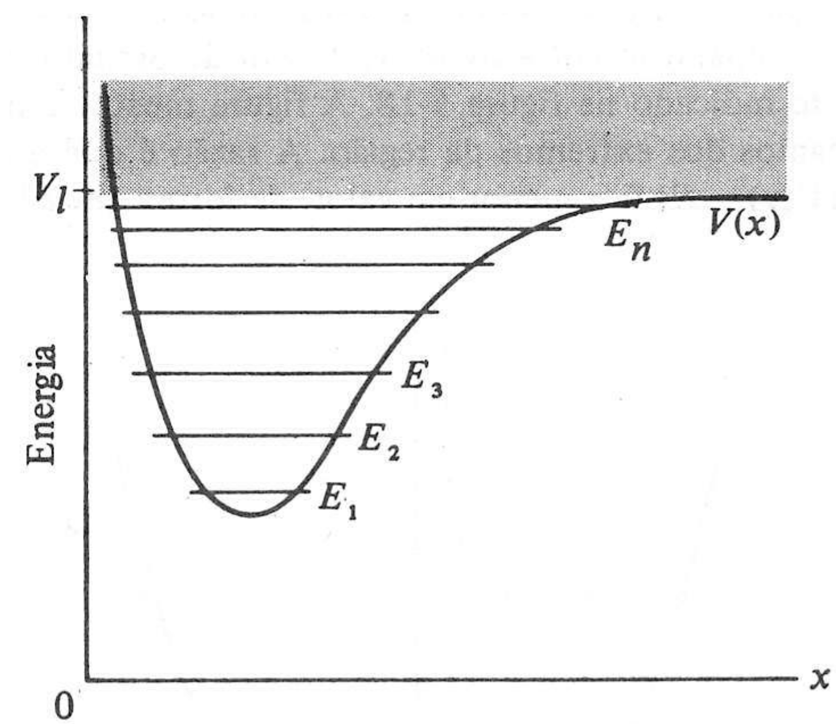
- Somente é possível encontrar solução para essa equação para certos valores de *E*

Soluções da Equação de Schroedinger Independente do tempo

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



- Como apenas algumas soluções são possíveis, a energia do sistema é **quantizada**



Soluções da Equação de Schroedinger Independente do tempo

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

- Quando *E > V(x)* para valor qualquer de *x>x'*, é possível encontrar uma solução para Ψ(x) para qualquer valor de energia, constituindo uma distribuição contínua de valores de energia do sistema