4300375 - Física moderna I

Aula 7 – A quantização na teoria de Schrödinger

As consequências da equação de Schrödinger

Nesta aula...

- A quantização na teoria de Schrödinger
  - As propriedades da função de onda
  - O caso especial da partícula livre
  - Interpretação qualitativa da equação de Schrödinger
  - O caso do potencial de confinamento

Revisão da última aula

- **A equação de Schrödinger**:

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

Equação de Schrödinger

- A equação de Schrödinger **independente do tempo**:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

- A função de onda é uma **função complexa**!
  - inclui o número imaginário i
- A função de onda deve possuir **propriedades** definidas pelos **requisitos matemáticos** da **equação diferencial** e de **argumentos físicos**

A função de onda

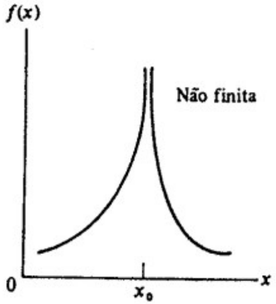
Propriedades da função de onda

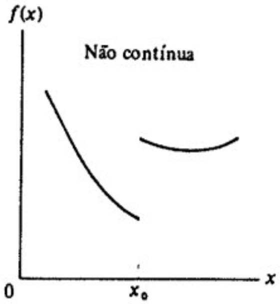
- **Propriedade 1** → a função $\Psi(x,t)$ deve **existir**, ser **contínua** e **satisfazer a equação de Schrödinger**
- **Propriedade 2** → a função $\partial\Psi(x,t)/\partial x$ deve **existir** e ser **contínua**
- **Propriedade 3** → Tanto a função $\Psi(x,t)$ quanto a $\partial\Psi(x,t)/\partial x$ devem ser **finitas**
- **Propriedade 4** → Tanto a função $\Psi(x,t)$ quanto a $\partial\Psi(x,t)/\partial x$ devem ser **univocas**
- **Propriedade 5** → A função $\Psi(x,t)$ deve tender a zero com suficiente rapidez quando $x \to \pm\infty$ para que a **integral de normalização convirja**.

A função de onda

Propriedades da função de onda

- **Propriedade 1** → a função $\mathbf{\Psi(x,t)}$ deve **existir**, ser **contínua** e **satisfazer a equação de Schrödinger**
- **Propriedade 2** → a função $\partial\mathbf{\Psi(x,t)}/\partial x$ deve **existir** e ser **contínua**
- **Propriedade 3** → Tanto a função $\mathbf{\Psi(x,t)}$ quanto a $\partial\mathbf{\Psi(x,t)}/\partial x$ devem ser **finitas**
- **Propriedade 4** → Tanto a função $\mathbf{\Psi(x,t)}$ quanto a $\partial\mathbf{\Psi(x,t)}/\partial x$ devem ser **univocas**
- **Propriedade 5** → A função $\mathbf{\Psi(x,t)}$ deve tender a zero com suficiente rapidez quando $x \rightarrow \pm\infty$ para que a **integral de normalização convirja**.





$$\boxed{P = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\,\psi^*(x)\,dx = 1}$$

O caso especial da partícula livre

A onda plana

- Na aula passada, usamos como solução da equação de Schrödinger para o caso da partícula livre uma função de onda na forma:

$$\Psi(x,t)=\cos(k.x-\omega.t)+i.\mathrm{sen}(k.x-\omega.t)$$

- Pela propriedade da linearidade da Eq. de Schrödinger, a mesma função multiplicada por uma constante também é solução!
- Formalmente, a solução completa, pode ser escrita como:

$$\Psi(x,t)=\underbrace{A.e^{i(k.x-\omega.t)}}_{\text{move para a direita}}+\underbrace{B.e^{i(-k.x-\omega.t)}}_{\text{move para a esquerda}}$$

- Podemos simplesmente adotar que k pode admitir valores negativos e tem uma solução geral do tipo:

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

Ver exercício 1 da lista da aula 6!

O caso especial da partícula livre

A onda plana

- De fato, olhando eq. independente do tempo:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}-E.\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}.\psi(x)=0$$

Tem solução

$$\boxed{\begin{array}{l}\psi(x)=A.e^{i(k.x)}\\ \text{com } k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\end{array}}$$

Lembre-se que: $\Psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$ com $e^{-i\omega t}$

O caso especial da partícula livre

A onda plana

- De fato, olhando eq. independente do tempo:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[\xcancel{V(x)}^{\,0}-E]\,\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}-E.\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}.\psi(x)=0$$

Tem solução

$$\boxed{\begin{gathered}\psi(x)=A.e^{i(k.x)}\\ \text{com } k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\end{gathered}}$$

Lembre-se que: $\Psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$ com $e^{-i\omega t}$

O caso especial da partícula livre

A onda plana

- Assim, dado: $\psi(x)=A.e^{i(k.x)}$
- Vamos calcular o valor da constante A pela propriedade de normalização: $P=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\,\psi^*(x)\,dx=1$

$$P=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\,\psi^*(x)\,dx=A^{2.}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik.x}e^{-ik.x}dx=A^{2.}\int_{-\infty}^{+\infty}dx=A^{2.}[\infty]$$

- Logo, não existe A que garanta a normalização!
- **O que isso quer dizer?**

O caso especial da partícula livre

A onda plana

- Assim, dado: $\psi(x) = A \, . \, e^{i(k \, . \, x)}$
- Vamos calcular o valor da constante A pela propriedade de normalização: $P = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \, \psi^{*}(x) \, dx = 1$

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \, \psi^{*}(x) \, dx = A^{2} . \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik.x} e^{-ik.x} dx = A^{2} . \int_{-\infty}^{+\infty} dx = A^{2} . [\infty]$$

- Logo, não existe A que garanta a normalização!
- **O que isso quer dizer?**
- Significa que o estado livre estacionário não é um estado fisicamente possível, ou seja, não existe partícula livre com energia bem definida!
  - Violaria o princípio da incerteza de Heisemberg
  - Note que neste caso $\Delta p = 0$ já que *k* é unicamente definido!

O caso especial da partícula livre

A onda plana

- Assim, dado: $\psi(x) = A.e^{i(k.x)}$ $\rightarrow$ $\boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$
- Vamos calcular o valor da constante A pela propriedade de normalização: $P = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\,\psi^*(x)\,dx = 1$

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\,\psi^*(x)\,dx = A.\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik.x} e^{-ik.x}\,dx = A.\int_{-\infty}^{+\infty} dx = A.[\infty]$$

- Logo, não existe A que garanta a normalização!
- **O que isso quer dizer?**
- Significa que o estado livre estacionário não é um estado fisicamente possível, ou seja, não existe partícula livre com energia bem definida!
  - Violaria o princípio da incerteza de Heisemberg
  - Note que neste caso $\Delta p = 0$ já que *k* é unicamente definido!

O caso especial da partícula livre

Como representar a partícula livre?

- Lembre-se da linearidade da eq. de Schrödinger:

$$\Psi(x,t)=c_1.\Psi_1(x,t)+c_2.\Psi_2(x,t) \Rightarrow \psi(x)=c_1.\psi_1(x)+c_2.\psi_2(x)$$

- Podemos supor uma solução do tipo:

$$\psi(x)=\sum_n A_n.e^{i(k_n.x)}$$

- Se A_n for uma função contínua de k:

$$A_n=\frac{1}{2L}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x).e^{i(k_n.x)}dx$$

O caso especial da partícula livre

Como representar a partícula livre?

- Lembre-se da linearidade da eq. de Schrödinger:

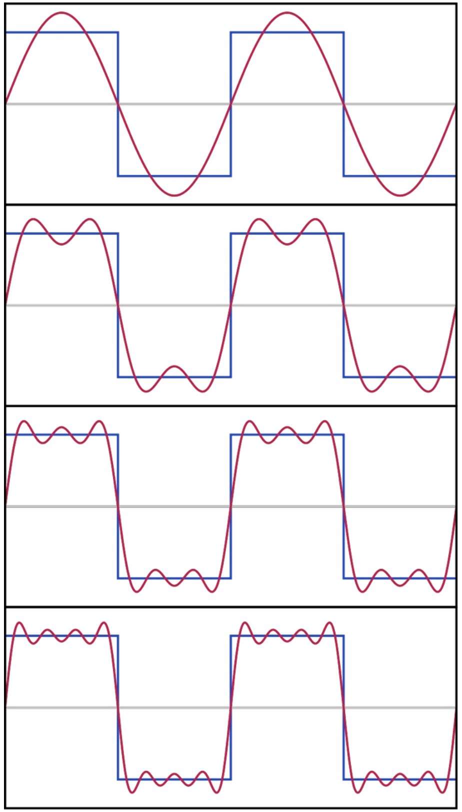
$$\Psi(x,t)=c_1.\Psi_1(x,t)+c_2.\Psi_2(x,t) \Rightarrow \psi(x)=c_1.\psi_1(x)+c_2.\psi_2(x)$$

- Podemos supor uma solução do tipo:

$$\psi(x)=\sum_n A_n.e^{i(k_n.x)}$$

- Se A_n for uma função contínua de k:

$$A_n=\frac{1}{2L}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x).e^{i(k_n.x)}dx$$

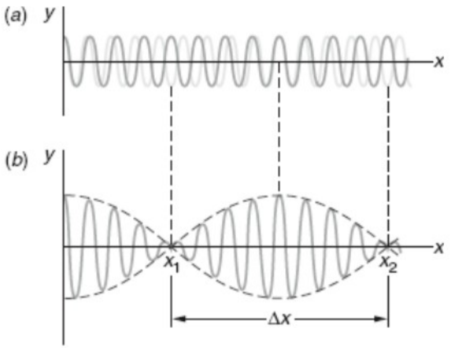


O caso especial da partícula livre

Como representar a partícula livre?

- **Como representar uma partícula?**

  Soma infinita de ondas com diferentes comprimentos de onda!

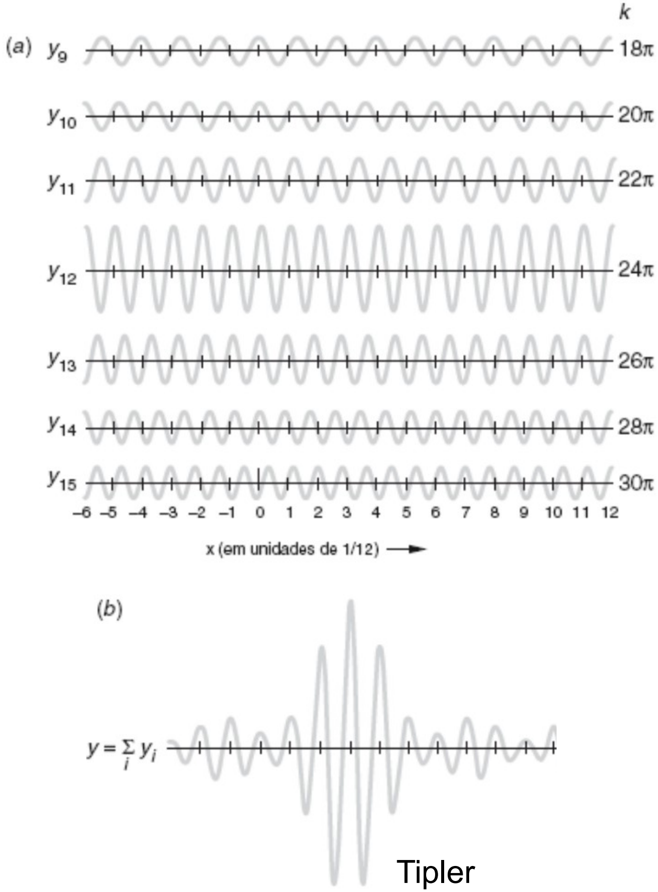


$$v_p = \nu\lambda = \frac{E}{h}\frac{h}{p} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

Velocidade de fase

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{h}\frac{h}{dp} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

Velocidade de grupo



Tipler

O caso especial da partícula livre

A onda plana

- Uma combinação de funções de partículas livres com momentos diferentes é solução da eq. de Schrödinger e também é normalizável!

  (A série passa a ser normalizável)

- Somando-se mais ondas, insere-se uma indeterminação no momento da partícula

  (comprimento de onda multiplamente definido)

- A localidade se restringe quando mais ondas são adicionadas à solução

  (para melhor definir a posição da partícula, mas comprimentos de onda devem ser adicionados!)

O princípio da indeterminação

A mecânica quântica e a probabilidade

- Sendo a função de onda de uma partícula uma soma infinita de ondas, quando medimos a posição da partícula teremos vários comprimentos de ondas possíveis, referentes às infinitas ondas parciais
- Quanto mais precisa for a medida, maior é o número de comprimentos de onda e maior é a indeterminação do momento a ser medido

$$\boxed{\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}} \qquad \boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

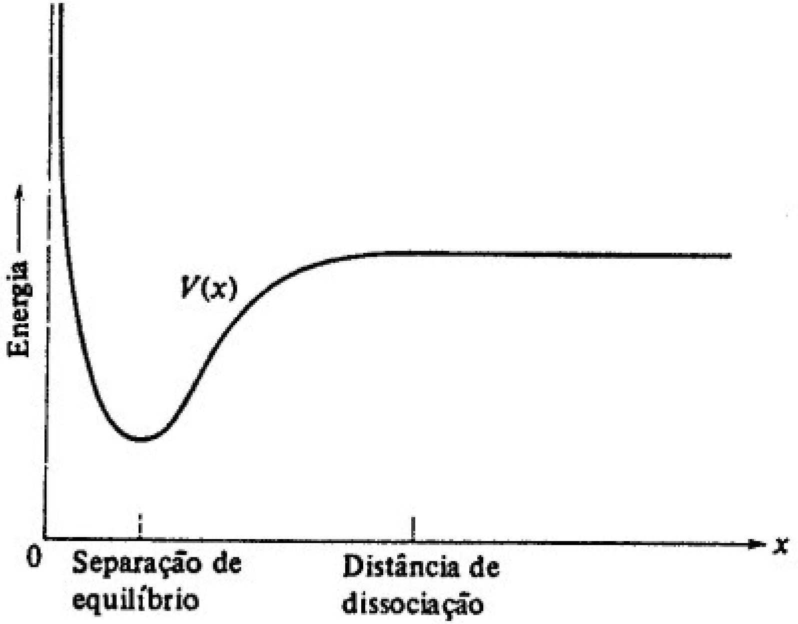
- O **principio da indeterminação** não é um problema de medida, que melhora com o avanço tecnológico, trata-se de um **limite intrínseco e relacionado à dualidade onda-partícula** por meio do princípio da complementaridade

Interpretação qualitativa da equação de Schrödinger

Visualizando a solução

- Tomemos a eq. independente do tempo: $$\boxed{\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)}$$

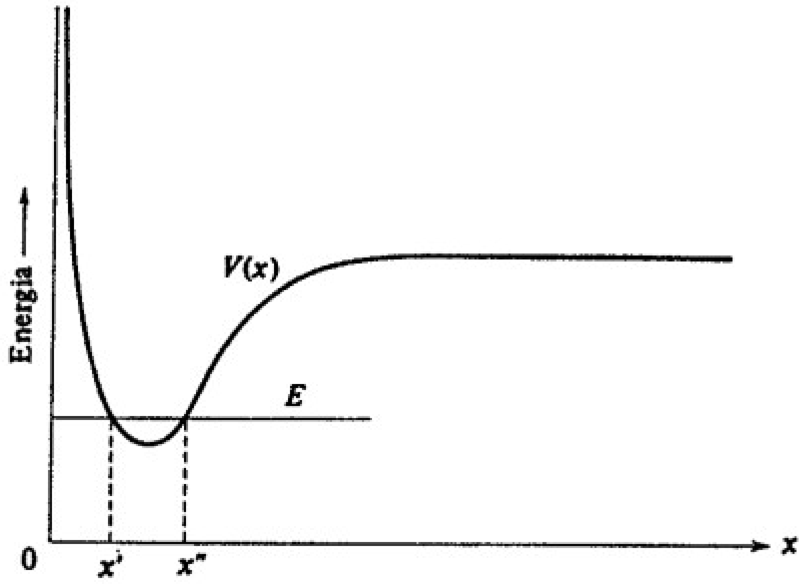
- As propriedades de $\psi(x)$ dependem de $V(x)$, lembre que $F = -dV(x)/dx$
- Para discutir qualitativamente a eq. de Schrödinger independente do tempo, tomemos o potencial ao lado
  - Potencial de atração de um elétron pelo núcleo



Interpretação qualitativa da equação de Schrödinger

Visualizando a solução

- Tomemos a eq. independente do tempo: $$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi(x)$$
- As propriedades de $\psi(x)$ dependem de $V(x)$, lembre que $F = -dV(x)/dx$
- Para discutir qualitativamente a eq. de Schrödinger independente do tempo, tomemos o potencial ao lado
  - Potencial de atração de um elétron pelo núcleo



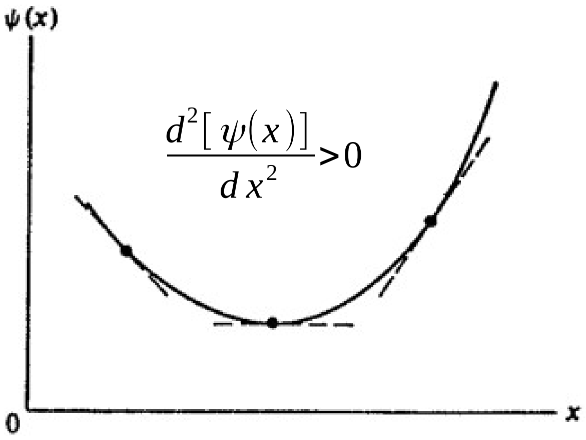
Interpretação qualitativa da equação de Schrödinger

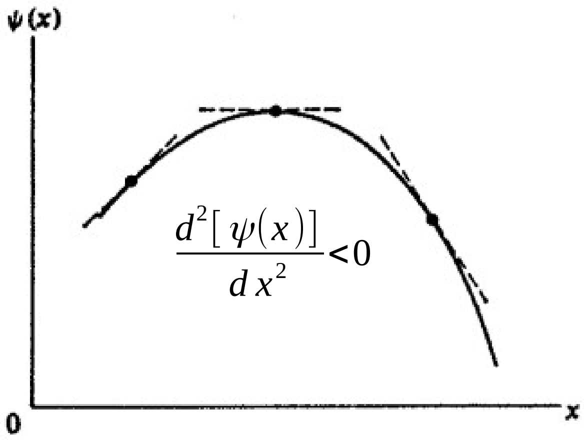
Visualizando a solução

- A relação entre $V(x)$ e E define o sinal de $d^2\psi(x)/dx^2$ em relação ao sinal de $\psi(x)$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+\left[V(x)-E\right]\psi(x)=0} \Rightarrow \boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+\left[E-V(x)\right]\psi(x)=0}$$

- Sendo $\psi(x)$ de sinal positivo, a concavidade da função é para cima se for $d^2\psi(x)/dx^2$ também for positiva, e para baixo se $d^2\psi(x)/dx^2$ for negativa



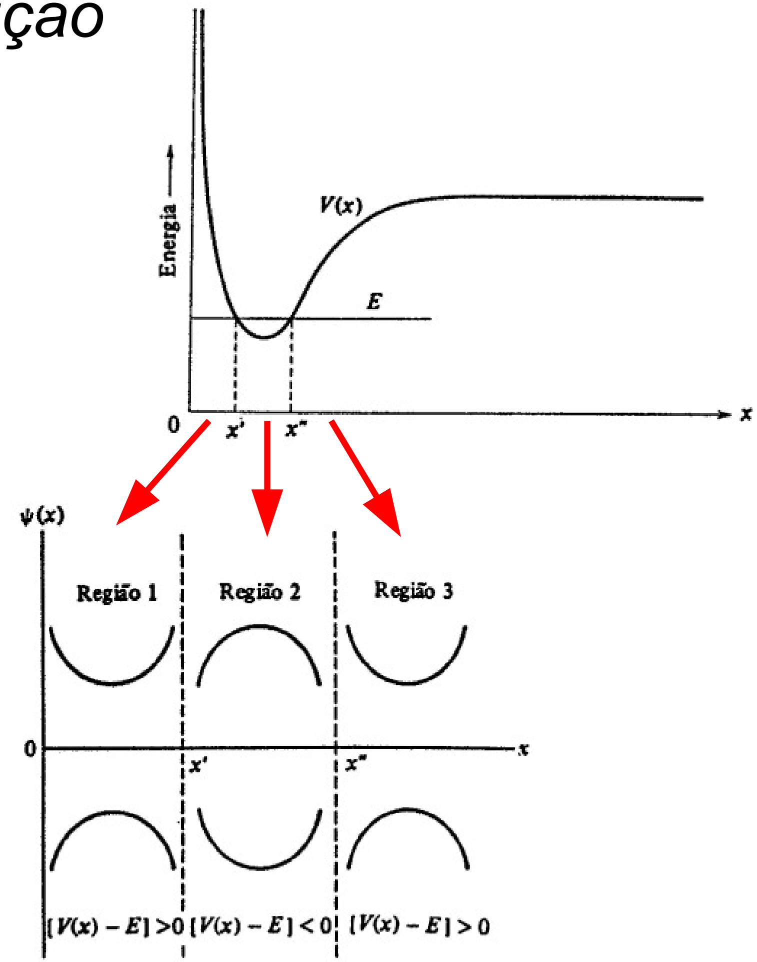


Interpretação qualitativa da equação de Schrödinger

Visualizando a solução

- A concavidade muda com o sinal de $\psi(x)$
- Nas interfaces entre as regiões, a continuidade deve ser garantida!
- A solução é totalmente definida por valores a serem definidos para $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ em um ponto arbitrário x_0

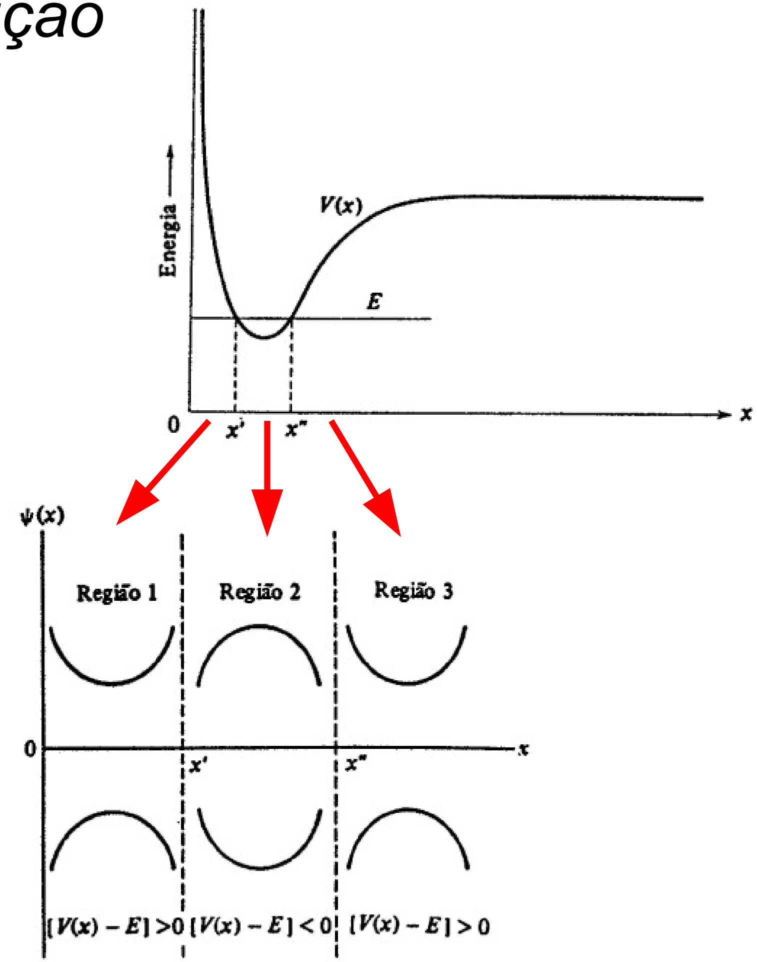
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}=[V(x)-E]\psi(x)$$

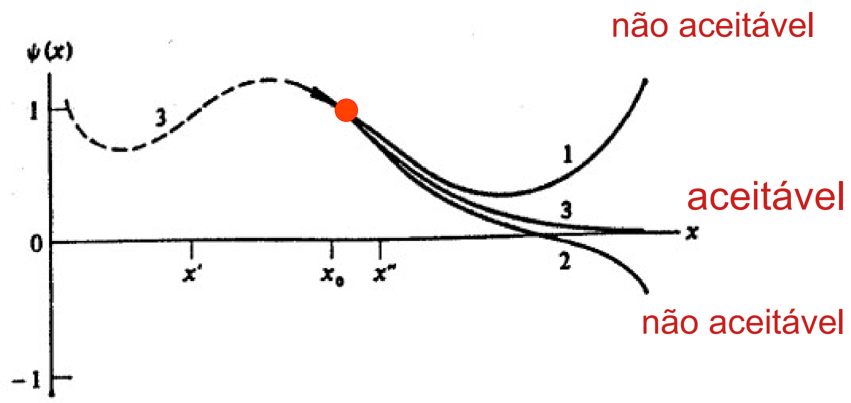


Interpretação qualitativa da equação de Schrödinger

Visualizando a solução

- A concavidade muda com o sinal de $\psi(x)$
- Nas interfaces entre as regiões, a continuidade deve ser garantida!
- A solução é totalmente definida por valores a serem definidos para $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ em um ponto arbitrário x_0

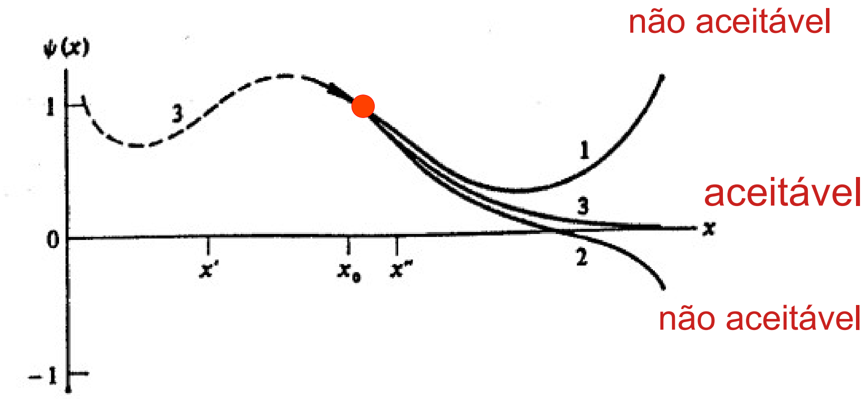


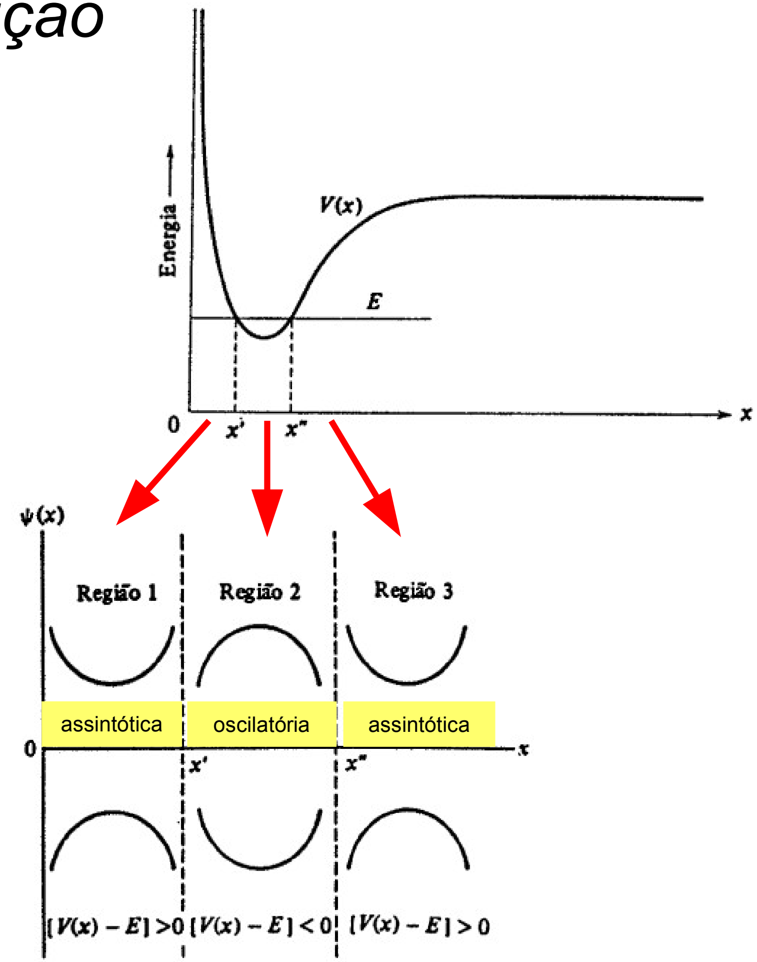


Interpretação qualitativa da equação de Schrödinger

Visualizando a solução

- A concavidade muda com o sinal de $\psi(x)$
- Nas interfaces entre as regiões, a continuidade deve ser garantida!
- A solução é totalmente definida por valores a serem definidos para $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ em um ponto arbitrário x_0

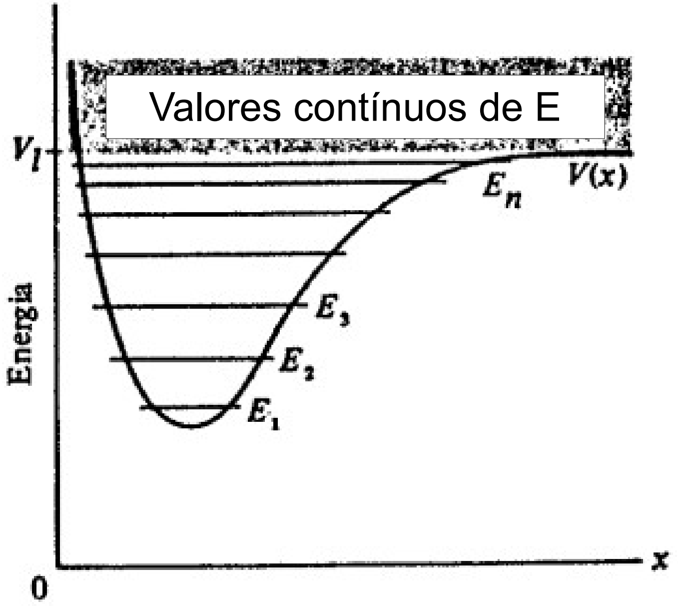




O caso do potencial de confinamento

A quantização como consequência da continuidade

- Não são todos os valores de $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ que resultam em soluções aceitáveis
- Isso impõem restrições nos valores de energia na região onde E > V(x)
  - "*O fato essencial é que a misteriosa 'exigência de múltiplos de h' não mais entra nas regras de quantização; foi atingido, por assim dizer, um estágio antes, sendo mostrado que essa exigência resulta do fato que um certa função espacial é finita e unívoca*"
    E. Schrödinger

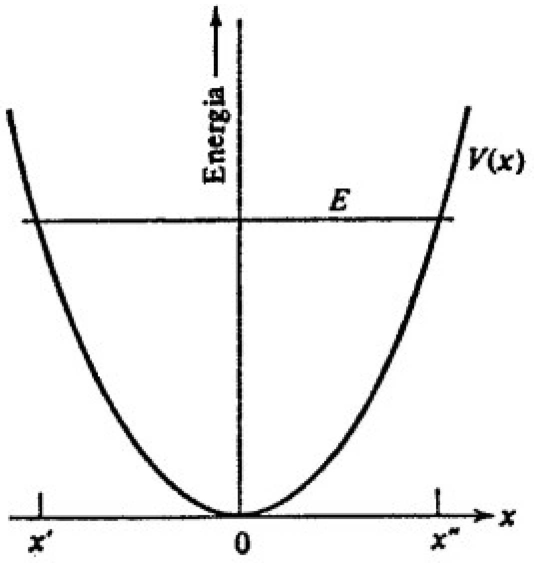


- O **efeito de quantização** aparece **naturalmente** na **teoria de Schrödinger**
- Na antiga mecânica quântica a quantização era importa pelas **regras de Wilson-Sommerfeld**.

O caso do potencial de confinamento

A quantização como consequência da continuidade

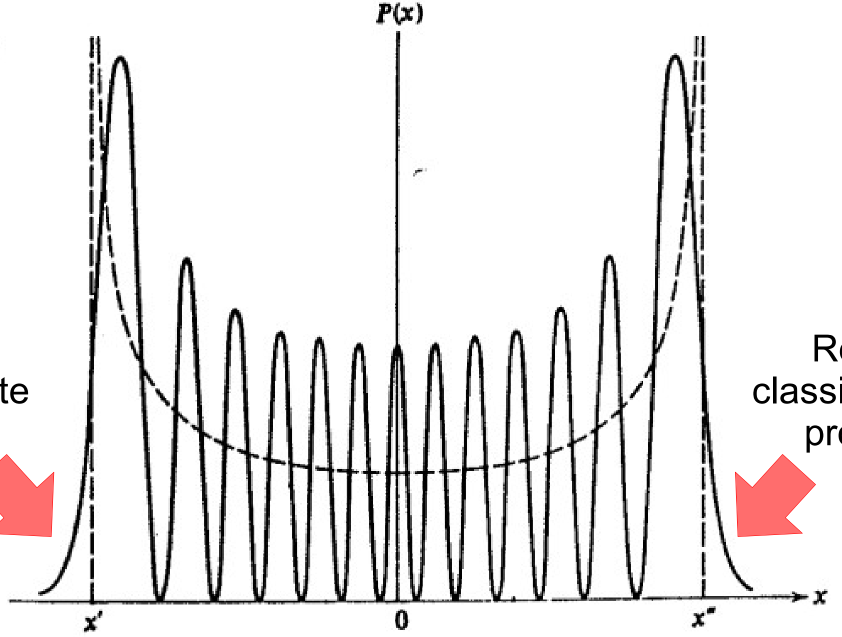
- Exemplo do oscilador harmônico e comparação com caso clássico



—— Densidade de probabilidade quântica para o 13º estado

–·–·– Densidade de probabilidade clássica para a mesma energia

Região classicamente proibida



Região classicamente proibida

O conceito de variáveis observáveis

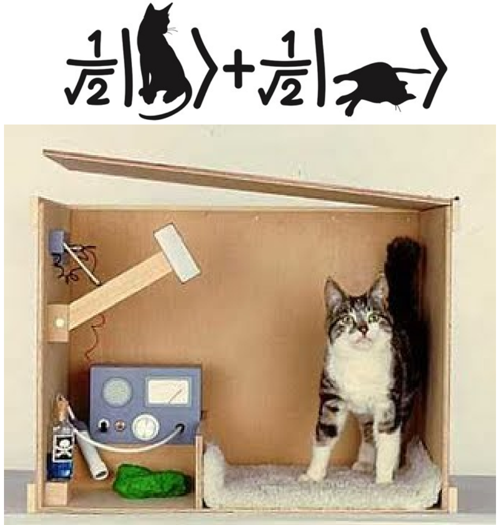
A realidade do ponto de vista da mecânica quântica

- Uma **variável observável** é qualquer variável de um sistema quântico **passível de ser conhecida** por meio de um **experimento**
- **São observáveis**: posição, energia, momento, momento angular, spin, momento magnético, … , entre outras…
- A **medição** de uma variável observável é sempre uma **materialização de uma possibilidade**
- **Previsões** são feitas por meio de **cálculos de valores esperados** utilizando a **densidade de probabilidade**

O gato de Schrödinger

O colapso a função de onda

- A “experiência” do **gato de Schrödinger** é na realidade uma **analogia**. Um recurso didático para **ilustrar a natureza da interpretação probabilística** da função de onda
- A **variável observável** neste caso é a **situação de vida** do gato (vivo ou morto)
- **Todos os estados quânticos** possíveis devem ser representados na função de onda
- Ao realizar o experimento, diz-se que ocorre o colapso da função de onda na realidade observada

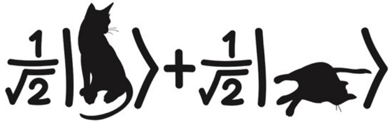


No “experimento” do gato de Schrödinger, um dispositivo libera aleatoriamente veneno ou alimento ao gato, que se encontra dentro de uma caixa fechada, sem que o observador possa dizer se ele está vivo ou morto.

O gato de Schrödinger

O colapso a função de onda

- A “experiência” do **gato de Schrödinger** é na realidade uma **analogia**. Um recurso didático para **ilustrar a natureza da interpretação probabilística** da função de onda
- A **variável observável** neste caso é a **situação de vida** do gato (vivo ou morto)
- **Todos os estados quânticos** possíveis devem ser representados na função de onda
- Ao realizar o experimento, diz-se que ocorre o colapso da função de onda na realidade observada



“About your cat, Mr. Schrödinger—I have good news and bad news.”

O cálculo de valores esperados

Sobre previsões e variáveis observáveis...

- O **objetivo** de toda teoria científica é explicar **observações experimentais**
- A função de onda **contém toda a informação** sobre o sistema quântico
- O valor esperado de x é o valor médio de x que esperamos obter quando medimos a posição de um **grande número de partículas** descritas pela mesma função de onda $\Psi(x, t)$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \,.\, P(x)\, dx$$

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

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\, dx = 1$$

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

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \,.\, E \,.\, \psi(x)\, dx$$

$$\langle L \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \,.\, L \,.\, \psi(x)\, dx$$

O cálculo de valores esperados

Sobre previsões e variáveis observáveis...

- No entanto, a função de onda **não depende explicitamente** de algumas dessas variáveis observáveis
- Neste caso, utiliza-se o conceito de **operadores**
- Os operadores **transformam a função de onda** e revelam as observáveis!

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

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

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)+i.\operatorname{sen}(kx-\omega t)$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=ik.[\cos(kx-\omega t)+i.\operatorname{sen}(kx-\omega t)]$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=ik.[\cos(kx-\omega t)+i.\operatorname{sen}(kx-\omega t)]$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=-i\frac{p}{\hbar}.\Psi(x,t)$$

$$\boxed{p[\Psi(x,t)]=-i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}}$$

O cálculo de valores esperados

Sobre previsões e variáveis observáveis...

- No entanto, a função de onda **não depende explicitamente** de algumas dessas variáveis observáveis
- Neste caso, utiliza-se o conceito de **operadores**
- Os operadores **transformam a função de onda** e revelam as observáveis!

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

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

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i . \mathrm{sen}(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i\,\omega . [\cos(kx - \omega t) + i . \mathrm{sen}(kx - \omega t)]$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i\,\omega . [\cos(kx - \omega t) + i . \mathrm{sen}(kx - \omega t)]$$

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = i \frac{E}{\hbar} . \Psi(x,t)$$

$$\boxed{E[\Psi(x,t)] = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$$

O cálculo de valores esperados

Sobre previsões e variáveis observáveis...

- No entanto, a função de onda **não depende explicitamente** de algumas dessas variáveis observáveis
- Neste caso, utiliza-se o conceito de **operadores**
- Os operadores **transformam a função de onda** e revelam as observáveis!

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

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

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

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

Operadores:

$$\hat{p}=\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad \hat{E}=\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)$$

O cálculo de valores esperados

Sobre previsões e variáveis observáveis...

- **Outros operadores úteis:**

$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ Componente x do momento

$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ Componente y do momento

$\hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$ Componente z do momento

$\hat{p} = -i\hbar\nabla$ Operador momento

$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ Energia total (dependente do tempo)

$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ Energia cinética

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ Hamiltoniana (energia total independente do tempo)

Resumo...

- A **partícula livre** (ou a **onda plana**) é um sistema importante na teoria quântica
- Um **estado livre localizado** com a **energia definida** é **inconsistente** com o **princípio da incerteza**
- Uma **partícula livre** deve ser descrita como uma **série de ondas planas**, inserindo uma **indeterminação** no momento (energia) e assim uma **restrição de localidade**
- A eq. de Schrödinger independente do tempo permite uma **interpretação qualitativa** pela análise do **sinal da segunda derivada da função de onda**

Resumo...

- **Potenciais de confinamento** implicam em **quantização**!
- A **quantização** é **consequência** da necessidade da **continuidade da função de onda**
- As **regras de quantização de Wilson-Sommerfeld** são embutidas na **equação de Schrödinger**

Próxima aula...

- Soluções da eq. de Schrödinger, parte 1
  - Solução de problemas interessantes
    - Potencial uniforme
    - Potencial degrau
    - Barreira de potencial
    - Poço quadrado infinito e finito