Instituto de Física USP

Física V - Aula 29

Professora: Mazé Bechara

Aula 29 – As ondas de partículas materiais - interpretações.

1. **Outros postulados da Mecânica Quântica.**

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

3. **Função de onda de partícula material – um exemplo.**

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 4. 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 5. 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 6a. Quando utilizadas as funções espaço-temporais, a velocidade deve ser representada **por 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:

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

Postulado 6b. As grandezas físicas que dependem da velocidade também devem ser representadas por operados construídos **a partir das expressões clássicas que definem a grandeza física, substituindo o momento linear pelo operador diferencial acima.**

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

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

Razão dos Postulados 6a: O valor esperado ou valor médio do **momento linear** obedece à seguinte relação:

$$< \vec{p} >= \iiint_{todo\, p_x, p_y e p_z} (p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k})\left|\phi(\vec{p},t)\right|^2 dp_x dp_y dp_z =$$

$$= \iiint_{todo\, espaço} \psi^*(\vec{r},t)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} - i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\vec{j} - i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\vec{k})\psi(\vec{r},t)dxdydz$$

Interpretação física: a média é o resultado que a teoria prevê para várias medidas da grandeza física no mesmo estado quântico.

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

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

Razão dos Postulados 6b: O **valor esperado ou valor médio** d**de uma grandezas físicas que dependem do momento linear** obedecem às seguintes relações quando usado o operador momento linear das transparência santeriores:

Grandeza vetorial:

$$< \vec{f}(\vec{p}) >= \iiint_{todo\,p_x p_y p_z} |\phi(\vec{p},t)|^2 \, \vec{f}(\vec{p}) dp_x dp_y dp_z = \iiint_{todo\,espaço} \psi^*(\vec{r},t) \hat{\vec{f}}(\vec{p}) \psi(\vec{r},t) dx dy dz$$

Grandeza Escalar:

$$< f(\vec{p}) >= \iiint_{todo\,p_x p_y p_z} |\phi(\vec{p},t)|^2 \, f(\vec{p}) dp_x dp_y dp_z = \iiint_{todo\,espaço} \psi^*(\vec{r},t) \hat{f}(\vec{p}) \psi(\vec{r},t) dx dy dz$$

Interpretação física: a média é o resultado que a teoria prevê para várias medidas das grandezas físicas no mesmo estado quântico.

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

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

Postulado 7. 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, e o** operador dependerá de posição e de operadores diferenciais de posição.

Determine o operador momento angular!

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

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

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

Postulado 8: Quando uma grandeza física (F) (obedece a equação do tipo:

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

e a constante f_o for real, se interpreta que a grandeza física F no estado descrito pela função de onda Ψ é **uma constante de movimento,** ou seja, **F não muda de valor, e este valor (constante) da grandeza física 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 na matemática. Mas na matemática o autovalor pode ser imaginário.

A equação básica da Mecânica Quântica no formalismo de Schroedinger

Postulado 9. **A equação básica da meacânica quântica (não relativística) é a equação de Schroedinger:**

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

•**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 particular de movimento unidimensional:

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

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

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

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

Erwin Schroedinger, físico austríaco (1887-1961) prêmio Nobel de Física de 1933

A denâmica de qualquer partícula quântica não relativística no formalismo de Schoedinger

- O que é **resolver a dinâmica de uma partícula material na mecânica quântica de Scroedinger**?
- **1. É preciso antes de mais nada postular a interação da dinâmica, a partir do que se conhece da Física clássica, ou se cria para uma situação nova, e aí escrever a equação de Schroedinger.**
- **2. Resolver a equação de de Schroedinger que é determinar as funções de onda que obedecem a equação, dadas as condições sobre impostas à solução matemática geral, impostas pela interpretação física:**
- $$\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r},t)\}\Psi(\vec{r},t) = \{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\}\Psi(\vec{r},t)$$

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 tem que ter valor único; **<u>contínuas,</u>** porque as probabilidades não podem ter valores indefinidos em algum ponto do espaço; **<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, portanto nunca vão infinitamente longe do ptencial de interação) devem ser **normalizadas**, ou seja , a probabilidade de estar em ponto de todo o espaço deve ser 1:

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

Observe que para que seja possível a normalização é obrigatório que a função de onda tenda a zero quando as coordenadas tendem a infinito.

Propriedades das funções de onda decorrentes da interpretação probabilística

3. 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. Esta condição será apresentada posteriormente.**

Propriedades da fu nção de onda decorrentes da Interpretação Probabilística

4. As **<u>derivadas espaciais das funções de onda</u>** também devem ser unívocas, **<u>contínuas e finitas em todo o espaço</u>**, já que as derivadas das funções de onda estão associadas aos valores das componentes do momento linear p no espaço das funções de onda espaço-temporal, e seus valores esperados devem ser bem defnidos.

☠***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 com mais questões.

$$\Psi(0 \le x \le a,t) = Asen\frac{n\pi x}{a}\exp(-i\frac{\hbar\pi^2}{2ma^2}n^2t) \qquad \Psi(x \le oex \ge a,t) \sim 0$$

n=1,2.3,,,

(a) Determine a densidade de probabilidade de se ter a partícula em uma posição em u m certo instante. Estqa densidade de probabilidade depende do tempo? Estas funções de onda representam um estado ligado ou não ligado? Justifique.

(b) Determine a constante A que permite a tais funções representarem funções de onda na mecânica quântica. Justifique. Faça um gráfico das densidades de probabilidade para os estados com n=1 e com n=2.

(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 estar nos valores mais praváveis e nos menos prováveis dentro de dx, nos estados com n=1 e com n=2. Mostre no gráfico pertinente a representação das probabilidades calculadas. Justifique.

(e) Determine a probabilidade da partícula estar, no caso do estado n=1, no primeiro quarto da caixa. Represente no gráfico do item (b).

(f) 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. Não são contraditórias tais respostas? Justifique

Aplicação - interpretações na mecânica quântica continuação

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

$$\Psi(0 \le x \le a,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} sen\frac{n\pi x}{a} \exp(-\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2}n^2t)$$

$$\Psi(x \le o,t) \sim 0$$

$$\Psi(x \ge a,t) \sim 0$$

n=1,2,3...

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

(h) Comente a validade das relações de de Broglie. O que é mostrar formalmente que as funções de onda dadas são compatíveis com o princípio de incerteza? Faça detalhadamente em casa!

(i) 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: i1 posição; i2 energia; i3 momento linear? Justifique suas respostas.

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

(k) Comente sobre as propriedades da função de onda dada, e as condições gerais que qualquer função de onda deve obedecer dada a interpretação probabilistica da função de onda.

(l) *Determine o potencial de interação desta partícula em todo o espaço x.*