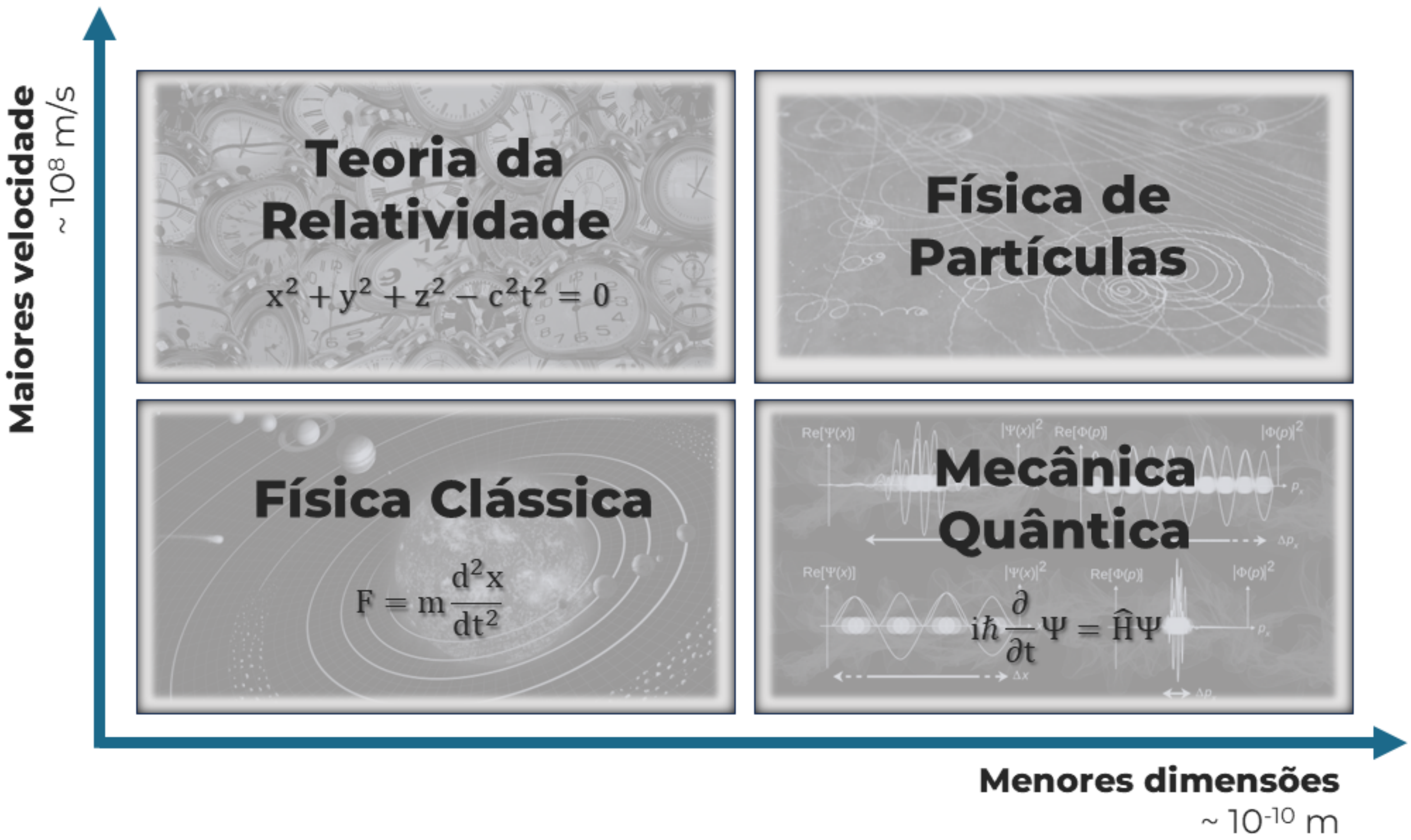
IFUSP
Instituto de Física da USP

Introdução à Física de Partículas Elementares (Física Moderna IIA)

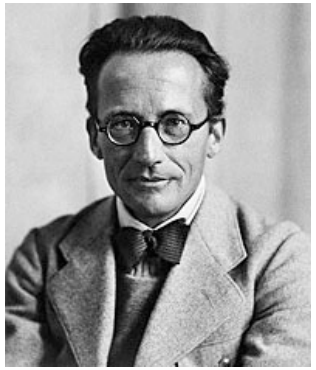
Aula 04

Da Equação de Schroedinger à Equação de Klein-Gordon

Física de Partículas



Teoria de Schroedinger



- Em 1925, Erwin Schroedinger desenvolve uma teoria para descrever o comportamento das funções de onda
- Ele propõe uma equação que permite obter a forma matemática da função de onda.
- Essa equação depende do potencial, isto é, das forças presentes no problema em questão
- Essa equação não pode ser deduzida, mas podemos dar um "palpite bem fundamentado" e verificar se a teoria descreve bem a natureza

Teoria de Schroedinger

- Essa equação deve ser consistente com as hipóteses de Einstein e de Broglie
- Ela deve reproduzir a conservação de energia
- Deve ser linear, para contemplar o princípio da superposição
- Vamos considerar o caso da partícula livre inicialmente

Função de onda de uma Partícula Livre

- A partir disso chegamos na equação de Schroedinger unidimensional para a partícula livre que é dada por:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}(x,t) + V_0\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,t)$$

- E a sua solução pode ser escrita como:

$$\Psi(x,t) = A\left[cos(kx-\omega t) + i\cdot sen(kx-\omega t)\right] = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

Função de onda de uma Partícula Livre

- A função de onda é uma função matemática complexa, portanto não pode ser medida diretamente
- Ela deve ser interpretada mais como um "guia" para se obter as grandezas realmente mensuráveis, chamadas de observáveis
- Como podemos agora relacionar essa função de onda com grandezas observáveis?

Funções de onda segundo Born

- Em 1926, Max Born propõe uma forma de relacionar as funções de onda com o comportamento das partículas que elas descrevem
- Segundo Born, o módulo da função de onda ao quadrado

  $$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$

  fornece a probabilidade da partícula ser encontrada no instante t em uma coordenada entre x e $x + dx$

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

Normalização da Função de Onda

- A constante *A* que aparece multiplicando a função de onda

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

permite a normalização da mesma, isto é, seu valor deve ser tal que

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

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*:

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

- 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: $\hat{p} \leftrightarrow -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$
- E no caso da energia $\hat{E} \leftrightarrow i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$

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

- Também é possível se chegar na equação de Schroedinger a partir desses operadores
- Sendo a energia total de uma partícula dada por

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

- Substituindo $\hat{E} \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ e $\hat{p} \leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, tem-se:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}(x,t) + V_0\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,t)$$

Conservação da Probabilidade

- **Sendo a probabilidade**

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

podemos definir uma corrente de probabilidade dada por:

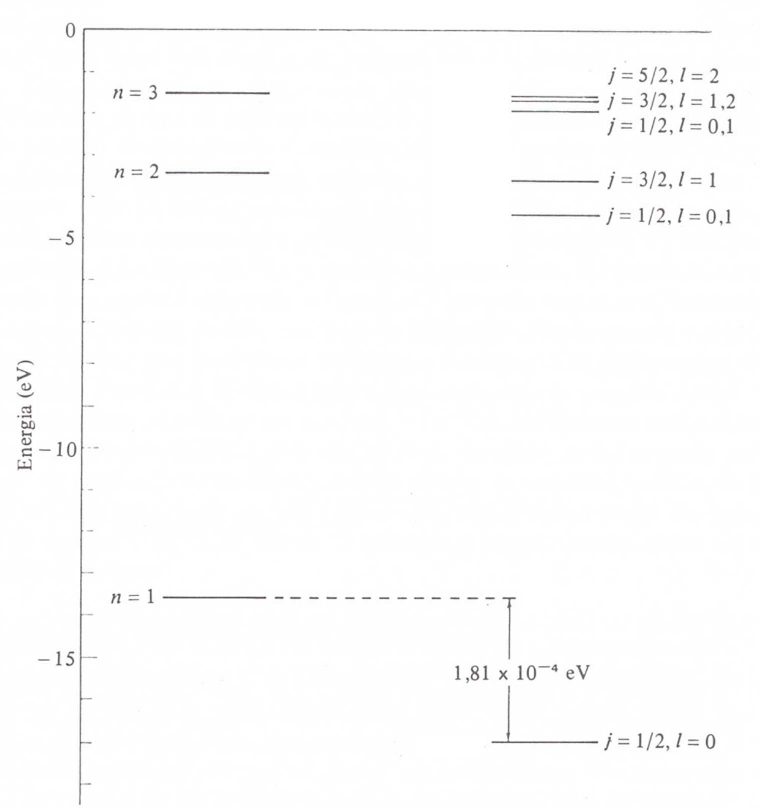
$$j(x,t) \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\psi^*(x,t)\right]$$

Com isso, a Eq. de Schroedinger se reduz a:

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) + \frac{\partial j}{\partial x}(x,t) = 0$$

Limitações

- Apesar de bem sucedida em vários aspectos, a teoria de Schroedinger apresenta sérias limitações
- Por exemplo, os níveis de energia do átomo mais simples, do hidrogênio, não são precisamente descritos por essa teoria
- Isso só é obtido considerando-se o *spin* do elétron, que é "estranho" a essa teoria



IFUSP
Instituto de Física da USP

Limitações

- E há outras limitações mais fundamentais:
  - Inconsistência com a Relatividade Restrita
  - Como descrever o comportamento dual da radiação eletromagnética? Como dar conta, por exemplo, da criação de fótons em um processo envolvendo radiação eletromagnética? Os fótons têm uma função de onda?

Inconsistência com a Relatividade Restrita

- O que está faltando na abordagem de Schroedinger?
  - A Relatividade!

- A equação de Schroedinger não é consistente com a Teoria da Relatividade Especial, pois não é invariante por Transformações de Lorentz

E agora, como proceder?

- A primeira tentativa seria escrever um equivalente da equação de Schroedinger, mas partindo da expressão da energia relativística:

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

- Lembrando que: $\widehat{p} \leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ e $\widehat{E} \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

Equação de Klein-Gordon

- Esse *ansatz* levaria a uma equação do tipo:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}(x,t) = -\hbar^2c^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}(x,t) + m^2c^4\psi(x,t)$$

que á conhecida como equação de Klein-Gordon para partícula livre

Limitações (ainda)

- Com a equação de Klein-Gordon temos a Física Quântica relativística?
- Ainda não!

- Mas qual é o problema com essa equação?

Limitações (ainda)

- Ao escrevermos a equação da conservação da probabilidade:

$$\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) + \frac{\partial j}{\partial x}(x,t) = 0$$

- Usando a mesma definição de corrente de probabilidade

$$j(x,t) \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi(x,t)\frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\psi^*(x,t)\right]$$

- Chegamos em uma densidade de probabilidade dada por

$$P(x,t) = \psi^*(x,t)\frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) - \psi(x,t)\frac{\partial \psi^*}{\partial t}(x,t)$$

- que pode ser negativa!

E agora?

- Em 1927, Dirac propõe uma nova equação que:
  - busca manter a derivada de primeira ordem no tempo, para que a função de onda contenha toda a informação sobre o estado quântico
  - busca manter a simetria entre tempo e espaço, ou seja, a parte espacial também deve apresentar uma derivada de primeira ordem
  - cujas soluções também sejam compatíveis com a equação de Klein-Gordon