

Física IV

Introdução à Física Moderna

Prof. Dr. Lucas Barboza Sarno da Silva

Função de onda

Comportamento da luz e o comportamento da matéria.

- Ambas se comportam como ondas e partículas.

No caso das ondas de luz, a teoria ondulatória dá apenas a probabilidade de se encontrar um fóton num certo ponto dentro de um certo intervalo de tempo. Da mesma forma, as ondas de matéria são descritas por funções de onda complexas (imaginárias) cujo quadrado do módulo dá a probabilidade de se encontrar a partícula num certo ponto, num certo instante.

$$|\psi|^2 = \psi * \psi$$

ψ^* \longrightarrow a complexa conjugada

A função de onda tem toda a informação que se pode ter sobre a partícula.

Muitas experiências efetuadas mostram que a matéria tem uma natureza ondulatória e uma natureza corpuscular.

Uma pergunta muito natural que se faz a este propósito é a seguinte:

- Se estivermos descrevendo uma partícula, um elétron, por exemplo, como descrevemos o que está ondulando?

A resposta para essa pergunta é clara no caso de ondas em cordas, de ondas na água, de ondas sonoras. Estas constituem a propagação num meio material. Em cada caso, a onda é representada por uma grandeza que varia com o tempo e com a posição.

- Ondas sonoras: variação da pressão Δp
- Ondas em cordas: deslocamento transversal y

De modo semelhante, as ondas de matéria, ou ondas de de Broglie, podem ser representadas por uma grandeza ψ , a **função de onda**.

Função de onda: ψ

$\psi \rightarrow$ Depende do tempo e da posição de todas as partículas do sistema

$$\psi(x, y, z, t)$$

A forma de ψ depende do sistema que estiver sendo descrito e das forças que atuam sobre o sistema.

Se ψ for conhecida para uma partícula, então as propriedades particulares desta partícula poderão ser descritas.

A equação de onda de de Broglie relaciona o momento linear de uma partícula ao seu comprimento de onda, pela igualdade:

$$p = h / \lambda$$

Se uma **partícula livre** tiver o momento precisamente conhecido, a sua função de onda é uma senoidal de comprimento de onda

$$\lambda = h / p$$

A parte real da função de onda desta **partícula livre** que se move sobre o eixo dos x pode ser escrita na forma:

$$\psi(x) = A \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) = A \operatorname{sen}(kx)$$

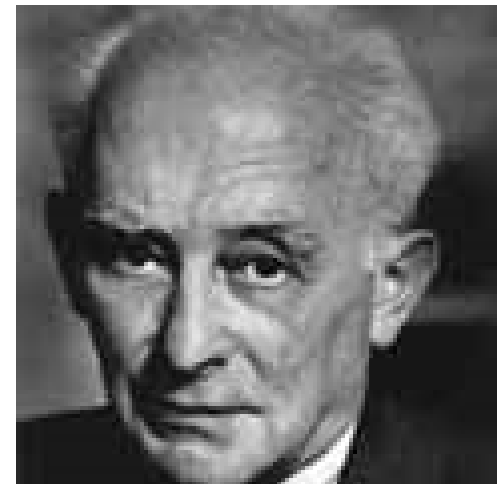
$k = 2\pi/\lambda$ é o número de onda

A é uma constante

Embora ψ não seja uma grandeza que se possa medir, a grandeza $|\psi|^2$ pode ser medida, onde $|\psi|^2$ é o quadrado do módulo de ψ .

Se ψ representa uma única partícula, então $|\psi|^2$ é a probabilidade, por unidade de volume, de a partícula ser encontrada num certo ponto.

$$\text{Probabilidade} = |\psi|^2 dV$$



Max Born

Probabilidade de a partícula ser encontrada no intervalo infinitesimal dx , em torno de um ponto x :

$$P(x)dx = |\psi|^2 dx$$

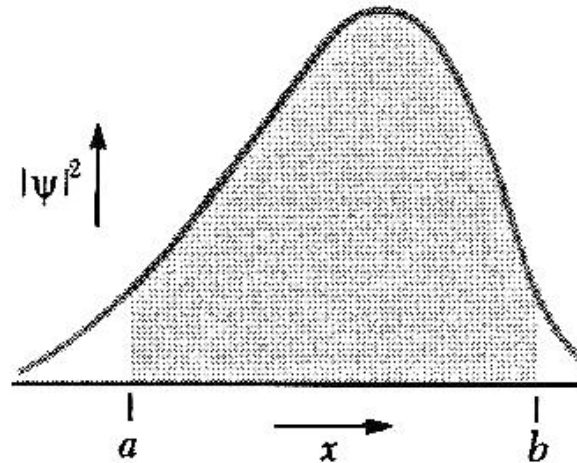
Uma vez que a partícula deve estar num ponto qualquer do eixo dos x , a soma das probabilidades sobre todos os valores de x deve ser 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad \text{(Normalização)}$$

A normalização é a simples afirmação de a partícula estar, num instante qualquer, num certo ponto.

A probabilidade de se encontrar a partícula no intervalo $a \leq x \leq b$ é dada por:

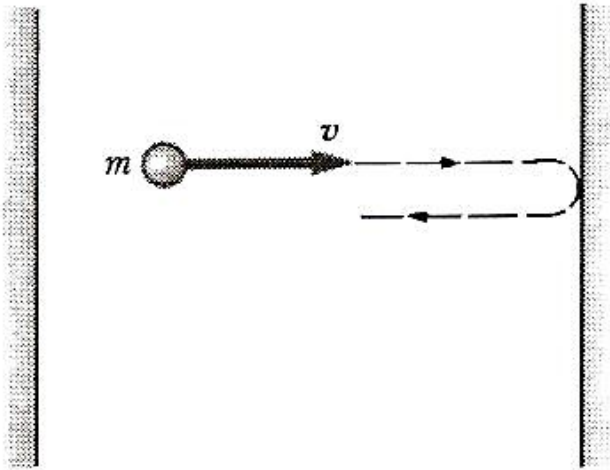
$$P_{ab} = \int_a^b |\psi|^2 dx$$



Experimentalmente, há uma probabilidade finita de se encontrar a partícula num certo ponto, num certo instante. O valor da probabilidade deve estar entre os limites 0 e 1.

- Por exemplo, se a probabilidade é de 0,3, isto significa haver 30% de chance de se encontrar a partícula.

Partícula numa caixa



Do ponto de vista clássico, uma partícula se move sobre o eixo dos x e reflete para frente e para trás entre duas paredes impenetráveis.

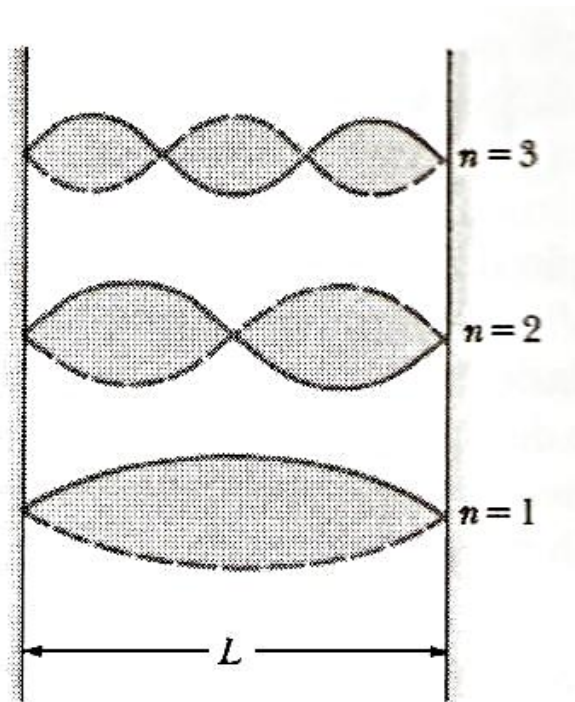
Se a velocidade da partícula for v , então:

- Momento = $mv = \text{constante}$
- Energia = constante

Reverendo a situação clássica das ondas estacionárias numa corda tensionada, que é análoga ao problema da partícula na caixa.

Condições de contorno: $y = 0$ em $x = 0$ e $x = L$

$$L = n \frac{\lambda}{2} \quad \lambda = \frac{2L}{n} \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$



Este resultado mostra que o comprimento de onda é quantizado.

$$y(x) = A \sin(kx)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{2L/n} = n \frac{\pi}{L}$$

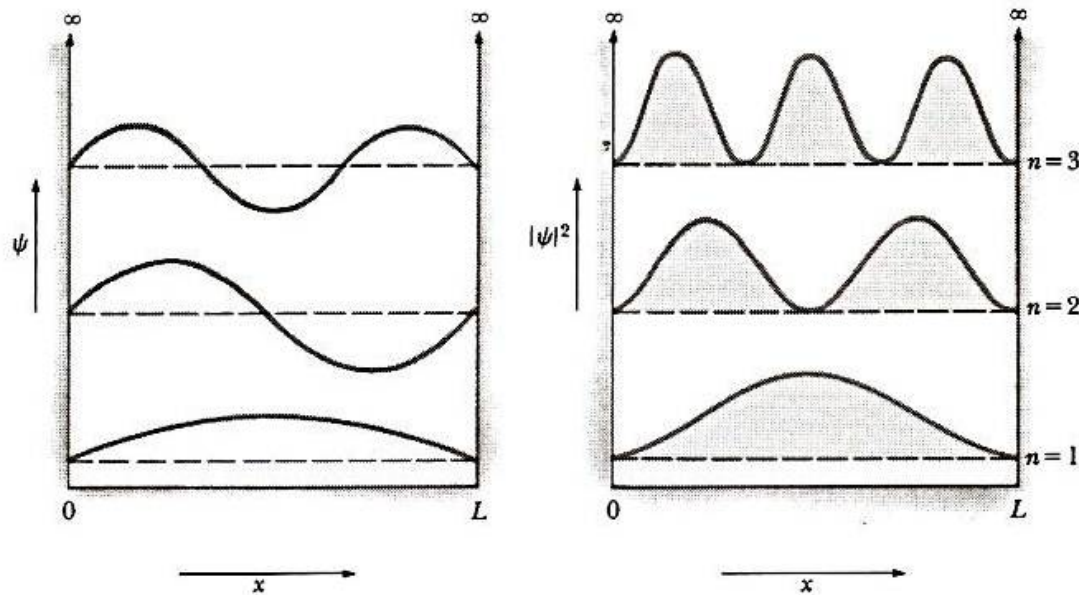
$$y(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Retornando à descrição da mecânica quântica de uma partícula numa caixa.

Condições de contorno: $\psi(x) = 0$ em $x = 0$ e $x = L$

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Os estados permitidos do sistema são os estados estacionários, pois representam ondas estacionárias e não ondas progressivas.



Energias permitidas

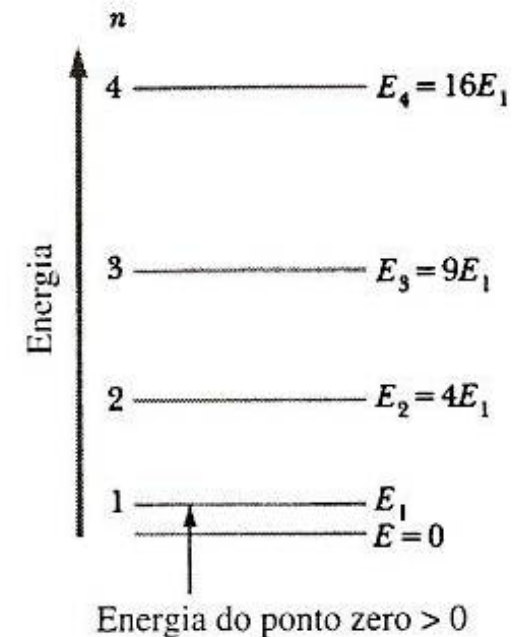
$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

O módulo do momento:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L/n} = \frac{nh}{2L} \quad p = mv$$

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{(nh/2L)^2}{2m}$$

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots$$



Resumo:

- Distribuição de probabilidade
- Níveis de energia permitidos

Se a partícula for eletricamente carregada (por exemplo, se fosse um elétron), então:

- Emitiria um fóton se caísse de um nível excitado, para um nível mais baixo
- Poderia absorver um fóton e saltar para um estado excitado

Exemplo:

Um elétron ligado

Um elétron está confinado entre duas barreiras impenetráveis, separadas por 0,2 nm. Determinar os níveis de energia para os estados $n = 1, 2$ e 3.

Exemplo:

Quantização de energia de um corpo macroscópico

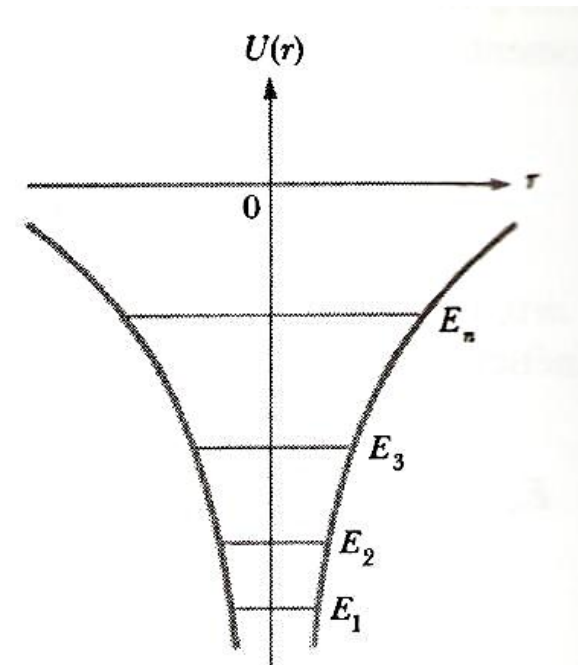
Um pequeno corpo, com a massa de 1 mg, está confinado e se move entre duas paredes rígidas separadas por 1 cm. (a) calcular a velocidade mínima do corpo. (b) Se a velocidade do corpo for 3×10^{-2} m/s, achar o valor correspondente de n .

Exemplo:

Modelo de um átomo

Um átomo pode ser imaginado como diversos elétrons que se movem em torno de um núcleo com carga positiva, com estes elétrons sujeitos principalmente à atração coulombiana do núcleo (na realidade atração parcialmente “blindada” pelos elétrons mais internos).

O poço de potencial em que cada elétron “se vê” está esquematizado na figura. Usar o modelo de uma partícula numa caixa para estimar a energia (em eV) necessária para elevar um elétron do estado $n = 1$ para o estado $n = 2$, admitindo que o átomo tenha um raio de 0,1 nm.



A equação de Schrödinger

A famosa **equação de Schrödinger** aplicada a uma partícula obrigada a se mover sobre o eixo dos x :

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

Sem dependência do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Uma vez que esta é uma equação independente do tempo, é comumente chamada a **equação de Schrödinger independente do tempo**.



ERWIN SCHRÖDINGER, Austrian
Theoretical Physicist (1887–1961)

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi$$

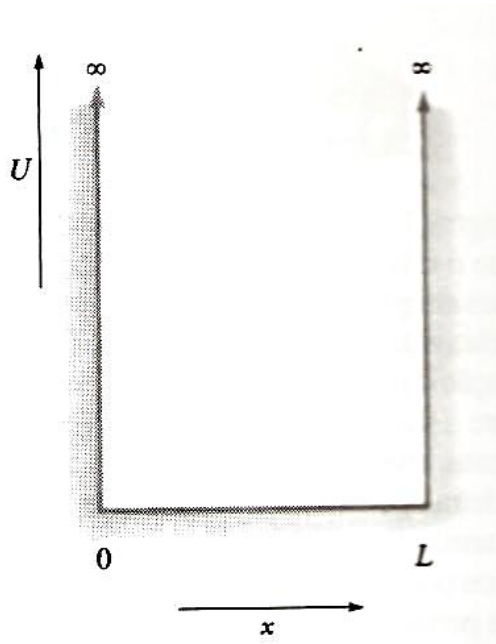
Equação de Schrödinger independente do tempo

U = energia potencial

Em princípio, se a energia potencial $U(x)$ do sistema for conhecida, podemos resolver a equação de Schrödinger e ter **as funções de onda** e também **as energias dos estados permitidos**.

Uma vez que U varia com a posição, é necessário resolver a equação em diferentes regiões do espaço. Neste processo, as funções de onda das diferentes regiões têm que se acoplar suavemente nas fronteiras ($\psi(x)$ seja contínua)

A partícula numa caixa



As paredes são infinitamente altas:

$$U(x) = \infty \quad \text{para } x = 0 \text{ e } x = L$$

No interior da caixa a energia potencial é constante:

$$U(x) = 0 \quad \text{em } 0 < x < L$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi \quad \text{onde:} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Solução da equação diferencial:

$$\psi(x) = A \sin(kx)$$

Condições de contorno:

$$\psi(0) = A \sin(k \cdot 0) = 0$$

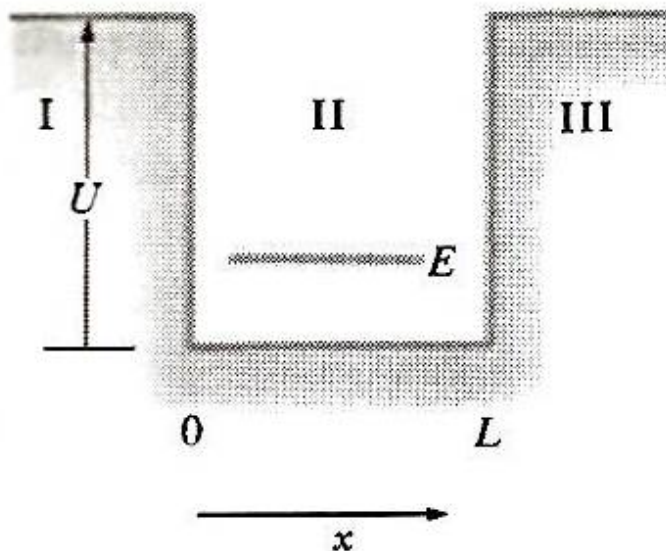
$$\psi(L) = A \sin(kL) = 0$$

$$kL = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi$$

$$\rightarrow E_n = \left(\frac{\hbar^2}{8mL^2} \right) n^2$$

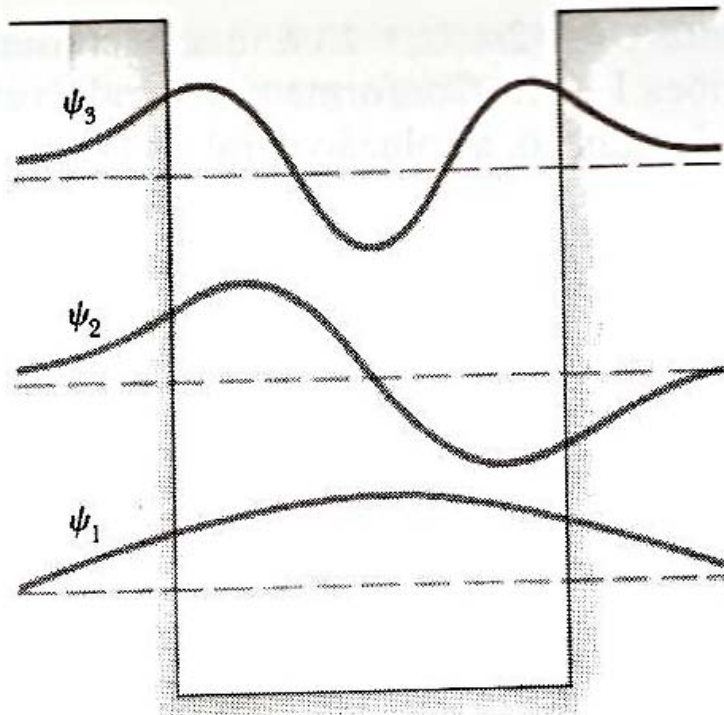
$$\rightarrow \psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

Partícula num poço de altura finita (potencial quadrado)

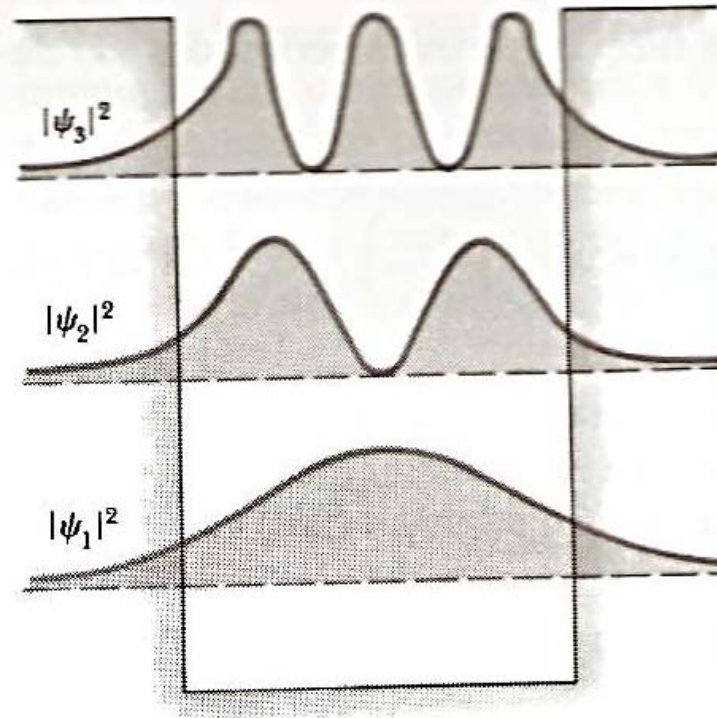


Do ponto de vista clássico, a partícula estaria permanentemente ligada na região $0 < x < L$.

Porém, conforme a mecânica quântica, há uma probabilidade finita de a partícula ser encontrada fora desta região.

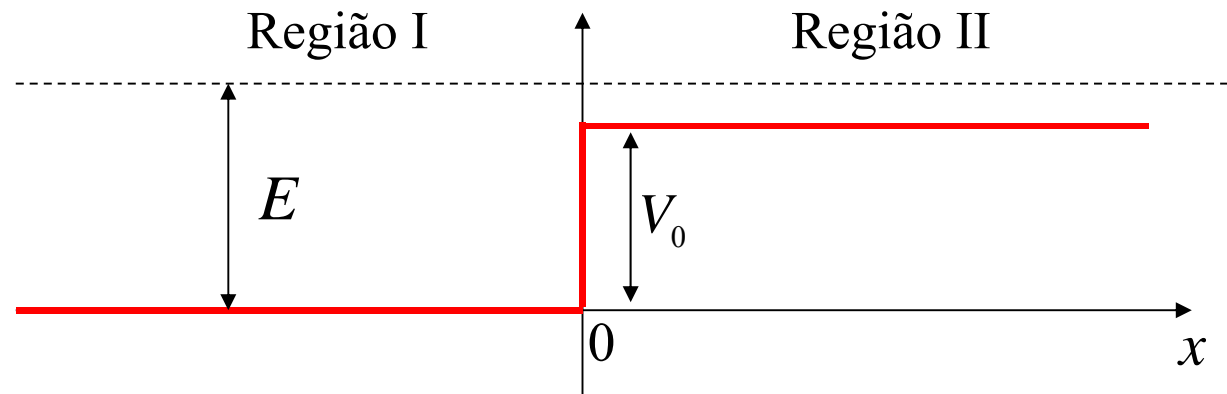


Funções de onda, ψ



Densidade de probabilidade, $|\psi|^2$

O potencial degrau ($E > V_0$)



$E > V_0$:

Região I: se $x < 0$; $\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} + k_I^2 \varphi_I(x) = 0$; onde $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: se $x > 0$; $\frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} + k_{II}^2 \varphi_{II}(x) = 0$; onde $k_{II}^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

Condições de contorno:

$$\Psi_I = \Psi_{II} \quad \frac{d\Psi_I}{dx} = \frac{d\Psi_{II}}{dx} \quad \longrightarrow \quad x = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II} x} \end{array} \right.$$

$$\longrightarrow \begin{array}{l} Ae^{ik_{II} x} + Be^{-ik_I x} = Ce^{ik_{II} x} \\ Ae^{ik_{II} 0} + Be^{-ik_I 0} = Ce^{ik_{II} 0} \end{array}$$

$$\boxed{A + B = C}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II} x} \end{array} \right.$$

$$\frac{d\Psi_I}{dx} = \frac{d\Psi_{II}}{dx} \quad \longrightarrow \quad x = 0$$

$$\frac{d\Psi_I}{dx} = Aik_I e^{ik_I x} - Bk_I e^{-ik_I x}$$

$$\frac{d\Psi_{II}}{dx} = Ck_{II} e^{ik_{II} x}$$

$$\longrightarrow Aik_I e^{ik_I x} - Bk_I e^{-ik_I x} = Ck_{II} e^{ik_{II} x}$$

$$Aik_I e^{ik_I 0} - Bk_I e^{-ik_I 0} = Ck_{II} e^{ik_{II} 0}$$

$$Aik_I - Bk_I = Ck_{II}$$

$$k_I (A - B) = Ck_{II}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A + B = C \\ k_I(A - B) = Ck_{II} \end{array} \right.$$

$$k_I(A - B) = k_{II}(A + B)$$

$$k_I A - k_I B = k_{II} A + k_{II} B$$

$$B(k_I + k_{II}) = A(k_I - k_{II})$$

$$B = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} A$$

$$C = A + \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} A$$

$$C = \left(1 + \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \right) A$$

$$C = \left(\frac{k_I + k_{II} + k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \right) A$$

$$C = \left(\frac{2k_I}{k_I + k_{II}} \right) A$$

$$\frac{B}{A} = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \longrightarrow \text{amplitude de reflexão}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}} \longrightarrow \text{amplitude de transmissão}$$

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(\frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} \right)^2 \longrightarrow \text{coeficiente de reflexão}$$

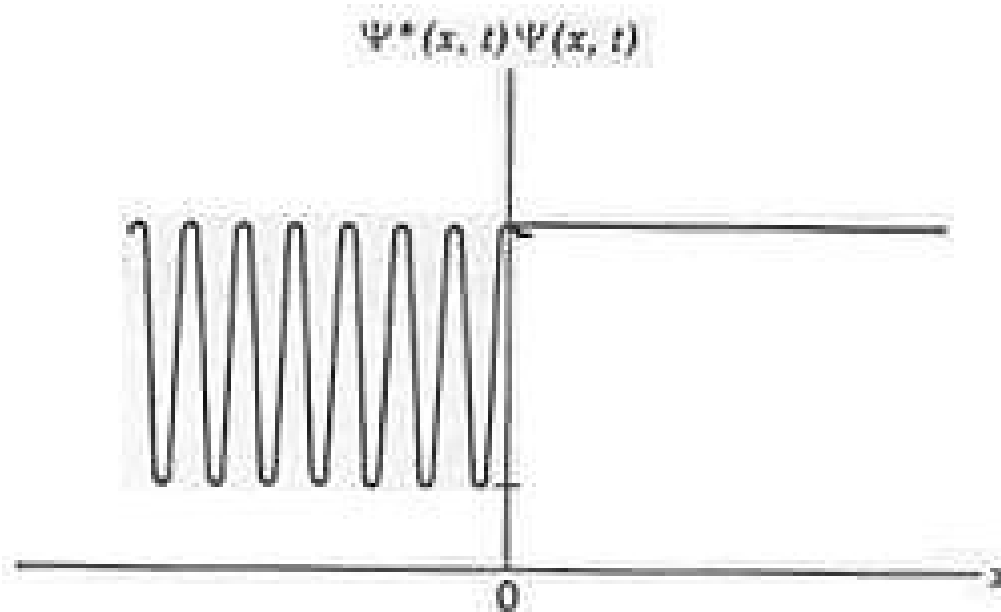
$$T = \frac{k_{II}}{k_I} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2} \longrightarrow \text{coeficiente de transmissão}$$

$$R + T = 1$$

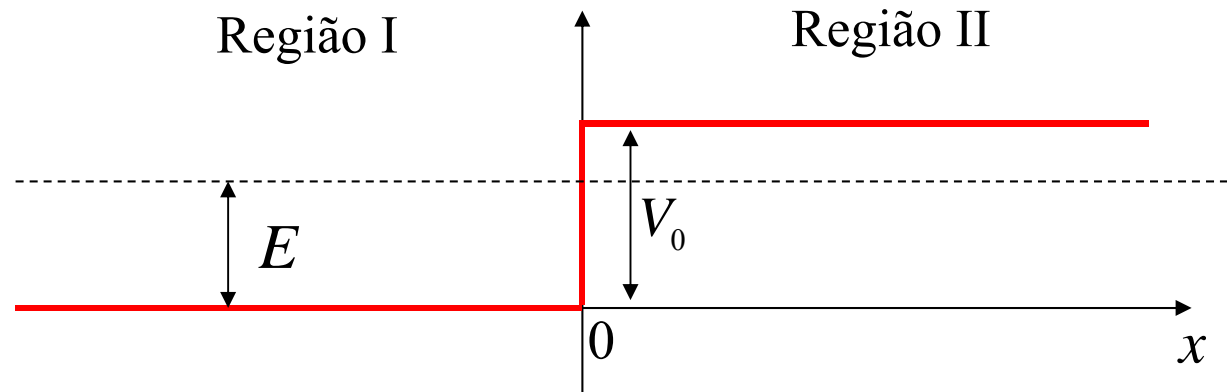
Densidade de probabilidade:

Sabendo que a parte real da função de onda, para $x \geq 0$, se propaga de acordo com a função $\cos(k_{II}x)$ e que a densidade de probabilidade

$$\Psi_{II}^*(x)\Psi_{II}(x) = y^* e^{-ik_{II}x} y e^{ik_{II}x} = 1$$



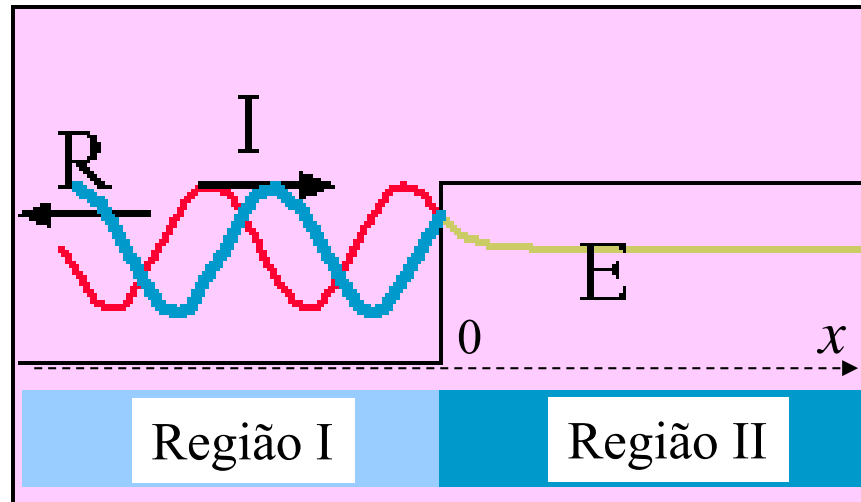
O potencial degrau ($E < V_0$)



$E < V_0$:

Região I: se $x < 0$; $\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} + k_I^2 \varphi_I(x) = 0$; onde $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: se $x > 0$; $\frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} - k_{II}^2 \varphi_{II}(x) = 0$; onde $k_{II}^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$



Soluções gerais:

Região I: $\varphi_I(x) = A \exp(ik_I x) + B \exp(-ik_I x)$; onde $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
 $x < 0$ Incidente Refletida

Região II: $\varphi_{II}(x) = C \exp(k_{II} x) + D \exp(-k_{II} x)$; onde: $k_{II}^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$
 $x > 0$ Transmitida

mas : $C = 0$, pois não há onda refletida para $x > 0$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{B}{A} = \frac{k_I - ik_{II}}{k_I + ik_{II}} \longrightarrow \text{amplitude de reflexão} \\ R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1 \longrightarrow \text{coeficiente de reflexão} \\ T = 0 \longrightarrow \text{coeficiente de transmissão} \end{array} \right.$$

$$\varphi_{II}(x) = D \exp(-k_{II}x) \Rightarrow \lambda = \frac{1}{k_{II}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Comprimento de penetração

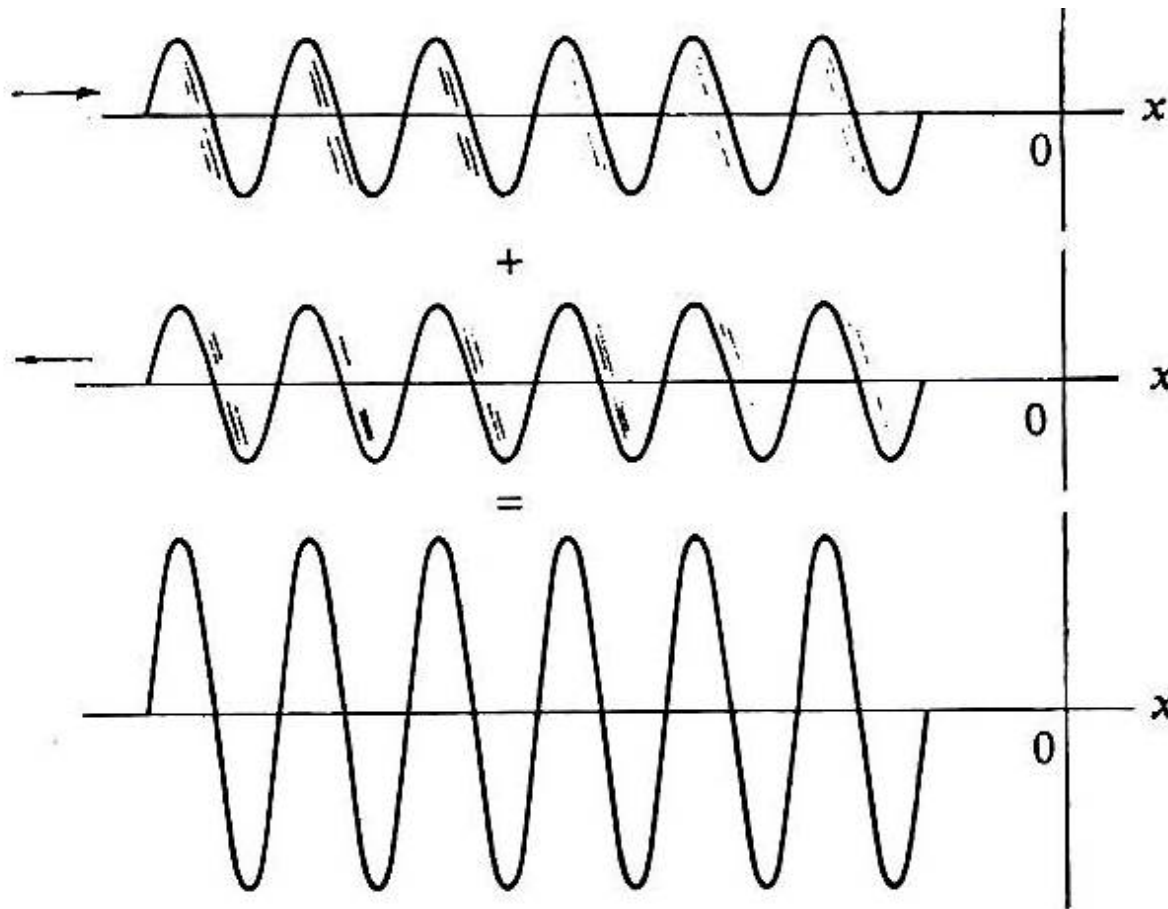
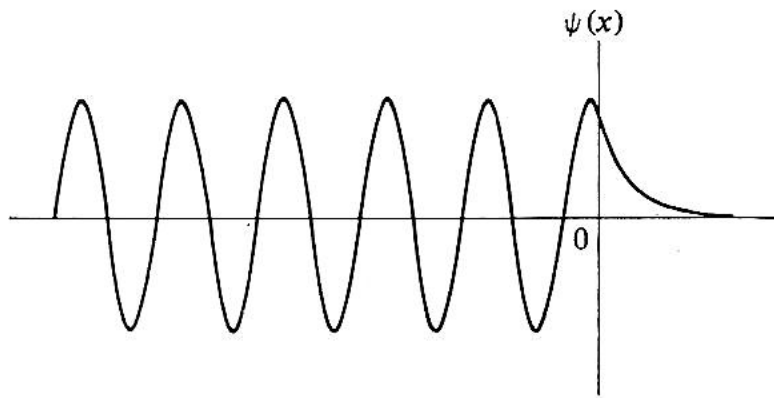
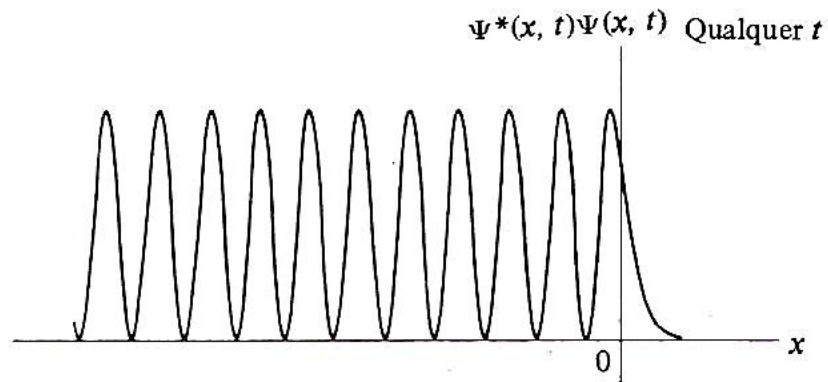


Ilustração esquemática da combinação de uma onda incidente e de uma onda refletida de mesmas intensidades, formando uma onda estacionária. A função de onda é refletida por um degrau de potencial em $x = 0$. Observe que os nós das ondas incidente e refletida se movem para a direita ou para a esquerda, mas os da onda resultante são estacionários.

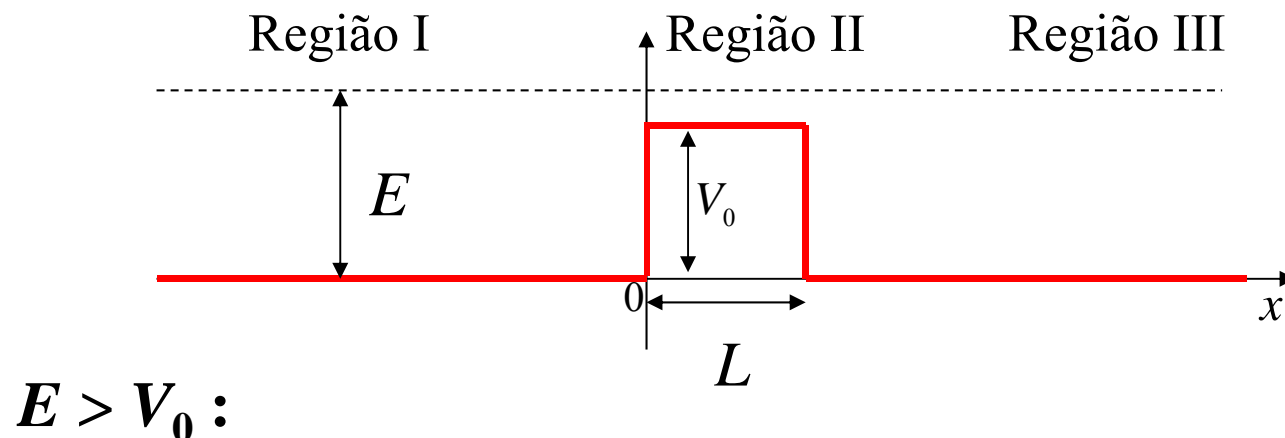


Funções de onda, ψ



Densidade de probabilidade, $|\psi|^2$

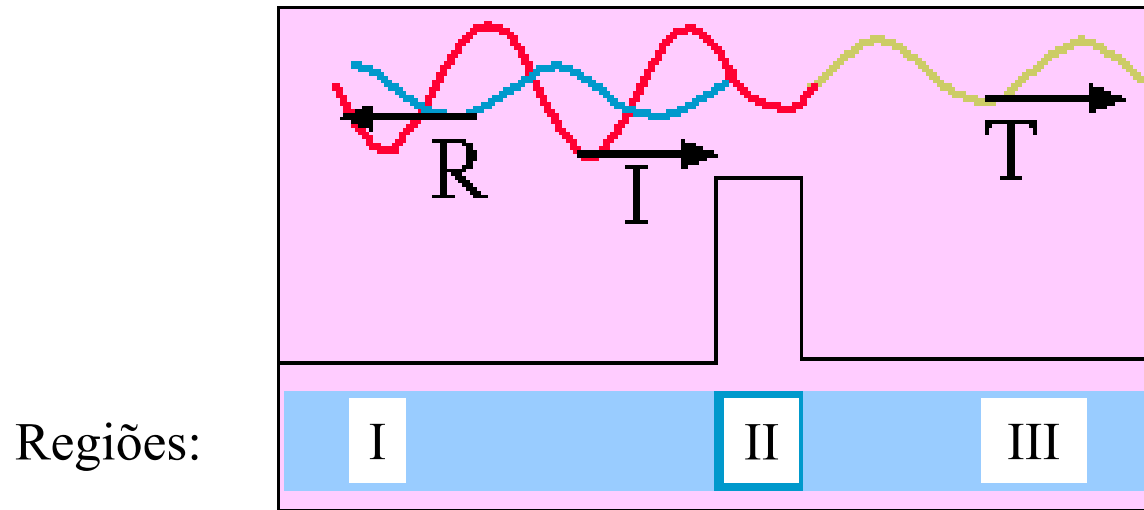
A barreira de potencial ($E > V_0$)



Região I: se $x < 0$; $\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} + k_I^2 \varphi_I(x) = 0$; onde $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: se $L > x > 0$; $\frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} + k_{II}^2 \varphi_{II}(x) = 0$; onde $k_{II}^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

Região III: se $x > L$; $\frac{d^2 \varphi_{III}(x)}{dx^2} + k_{III}^2 \varphi_{III}(x) = 0$; onde $k_{III}^2 = k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$



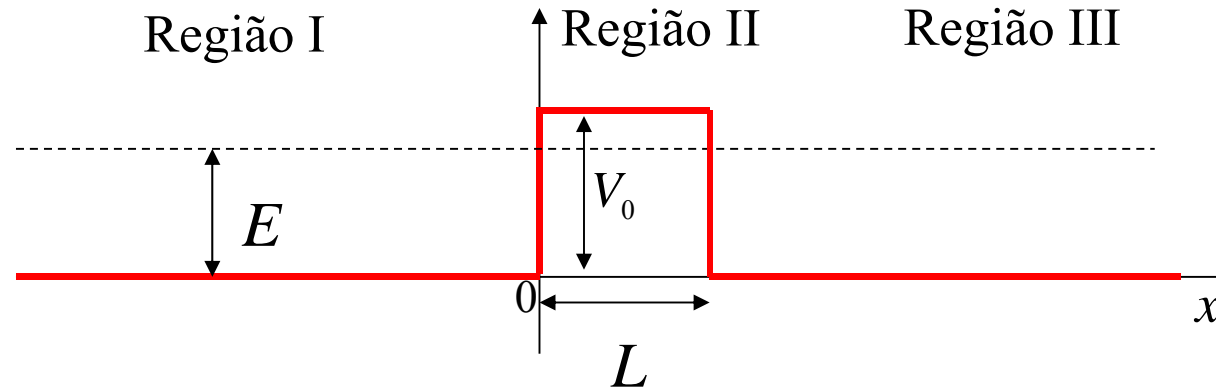
Região I: $\varphi_I(x) = A \exp(ik_I x) + B \exp(-ik_I x)$; onde $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: $\varphi_{II}(x) = C \exp(ik_{II} x) + D \exp(-ik_{II} x)$; onde $k_{II}^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

Região III: $\varphi_{III}(x) = E \exp(ik_{III} x) + \cancel{F} \exp(-ik_{III} x)$; onde $k_{III}^2 = k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

0

A barreira de potencial ($E < V_0$)



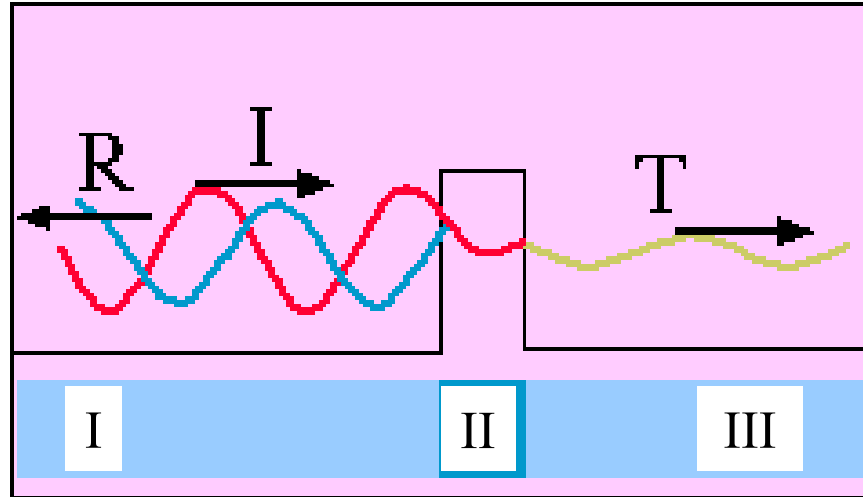
$E < V_0$:

Região I: se $x < 0$; $\frac{d^2 \varphi_I(x)}{dx^2} + k_I^2 \varphi_I(x) = 0$; onde $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: se $L > x > 0$; $\frac{d^2 \varphi_{II}(x)}{dx^2} - k_{II}^2 \varphi_{II}(x) = 0$; onde $k_{II}^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

Região III: se $x > L$; $\frac{d^2 \varphi_{III}(x)}{dx^2} + k_{III}^2 \varphi_{III}(x) = 0$; onde $k_{III}^2 = k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Regiões:



Região I: $\varphi_I(x) = A \exp(ik_I x) + B \exp(-ik_I x)$; onde $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: $\varphi_{II}(x) = C \exp(-k_{II} x) + D \exp(k_{II} x)$; onde $k_{II}^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

Região III: $\varphi_{III}(x) = E \exp(ik_{III} x) + F \exp(-ik_{III} x)$; onde $k_{III}^2 = k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Coeficiente de transmissão:

$$T \approx \exp(-2k_{II}L)$$

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Coeficiente de reflexão:

$$R = 1 - T = 1 - \exp(-2k_{II}L)$$