Física IV – Poli – Engenharia Elétrica: *13ª Aula* (30/09/2014)

Prof. Alvaro Vannucci

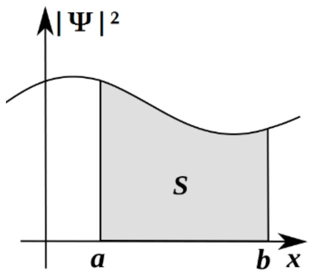
Na última aula vimos:

- Proposta de *de Broglie*: associar caráter ondulatório para as partículas:

$$\boxed{p = \frac{h}{\lambda}} \quad \text{ou} \quad \boxed{p = \hbar K} \quad \left(\hbar = \frac{h}{2\pi}\right)$$

- Função de onda ψ não tem significado físico, mas $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ corresponde a uma ***densidade de probabilidade*** de forma que, se dV for um elemento de volume infinitesimal ao redor de algum ponto do espaço, então $|\psi|^2\,dV$ será a probabilidade de se encontrar a partícula nesta região (neste elemento de volume).
- A função ψ estará ***normalizada*** quando (em *1D*):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \ \text{(100\% de probabilidade)}$$

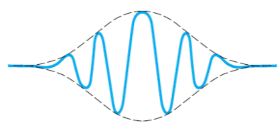


- E também, a probabilidade de se encontrar a partícula em uma região $a \le x \le b$ será obtida calculando: $P_{ab} = \int_a^b |\psi|^2 dx$, que será a área sob a curva.
- O cálculo do ***valor esperado*** (***valor médio***) de uma grandeza *f(x)* qualquer:

$$\underline{\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* f(x)\, \psi\, dx}$$

- Representação da função de onda como um *pacote de onda*, sendo que a velocidade de fase e a velocidade de grupo são determinadas por:

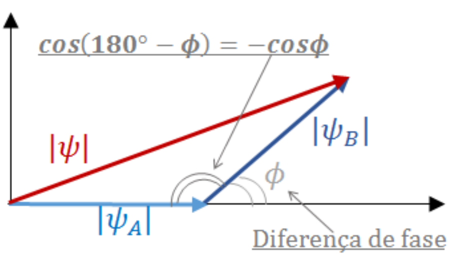
$$\boxed{v_{fase} = \frac{\omega}{K}} \quad \text{e} \quad \boxed{v_{grupo} = \frac{d\omega}{dK}} \quad ou \quad \boxed{v_{grupo} = \frac{dE}{dp}}$$



- No caso de uma *partícula livre*, ao longo do eixo x:
- $\psi(x,t) = Ae^{i(Kx-\omega t)}; \ \ sendo\, que: \begin{cases} \mathrm{Re}(\psi) = A\cos(Kx-\omega t) \\ \mathrm{Im}(\psi) = A\sin(Kx-\omega t) \end{cases}$

➢ Uma propriedade muito importante que devemos associar às funções de onda ψ é que elas seguem o ***Princípio da Superposição***.

➢ Ou seja, quando um determinado evento pode ocorrer de forma alternativa (elétron passar pela fenda ***A*** ou ***B*** para atingir o anteparo, por exemplo), então a amplitude de probabilidade total dele passar pelas fendas será:

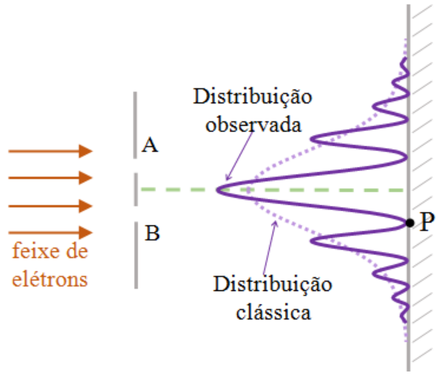


$$\psi = \psi_A + \psi_B \;\Rightarrow\; |\psi|^2 = |\psi_A + \psi_B|^2 \;\Rightarrow (do\, diagrama\, de\; fasores\, correspondente) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |\psi|^2 = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + 2|\psi_A||\psi_B|\cos\phi$$

- No caso da experiência com *fenda dupla*:

$$\begin{cases} \psi_A \equiv \text{"}onda\ progressiva\text{"}\, que\ passa\ pela\ fenda\ A \\ \psi_B \equiv \text{"}onda\ progressiva\text{"}\, que\ passa\ pela\ fenda\ B \end{cases}$$



- No anteparo, ψ_A e ψ_B se superpõe (utiliza-se o diagrama de fasores para ver isso) resultando em uma *franja de interferências*.

- ***Exemplo:*** Um contador Geiger é utilizado para detectar os elétrons que passam por uma fenda dupla. A função de onda relacionada com a fenda A é $\psi_A = 2\,unidades$ enquanto que com a fenda B é $\psi_B = 6\,unidades$. Sabendo-se que quando apenas a fenda A encontra-se aberta passam por ela 100 elétrons/s, responda:
  a) Quantos elétrons passam pela fenda B quando apenas esta encontra-se aberta?
  b) Quantos elétrons passam pelas fendas quando as duas encontram-se abertas?

- ***Resolução:***

a) A razão entre as "*intensidades*" das ondas (ou seja, *probabilidades*) será:

$$\frac{|\psi_B|^2}{|\psi_A|^2} = \frac{36}{4} = 9 \;\Rightarrow\; \begin{matrix}\text{passam 9 vezes mais elétrons pela fenda B do} \\ \text{que por A, ou seja, passam 900 elétrons/s}\end{matrix}$$

b) A amplitude total da função de onda resultante, aplicando o *Princípio da Superposição*, será: $\psi = \psi_A + \psi_B = 8 \;\Rightarrow\; |\psi|^2 = 64$

Comparando com a fenda A apenas:

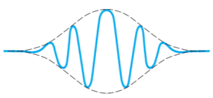
$$\frac{|\psi|^2}{|\psi_A|^2} = \frac{64}{4} = 16 \;\Rightarrow\; |\psi|^2 = 16|\psi_A|^2$$

(ou seja, a Probabilidade de que um elétron passe pelas duas fendas é 16x maior que a Probabilidade dele passar pela fenda A, quando a fenda B estiver fechada)

$$\therefore\; |\psi|^2 = 16|\psi_A|^2 = 1600\; elétrons/s \left(\begin{matrix}\text{passam pelo conjunto} \\ \text{de fendas}\end{matrix}\right)$$

- Este formalismo levanta algumas questões enigmáticas: o que acontece quando se lança apenas um elétron de casa vez em direção às fendas, considerando o padrão de interferência observado no anteparo?

- Pela proposta ondulatória, cada elétron seria, neste caso, representado por um *pacote de ondas* que, a princípio, passaria pelas duas fendas.



- Mas como o elétron não pode ser dividido, por qual fenda ele efetivamente passará?
- Muitos físicos, incluindo Einstein, se propuseram a responder esta pergunta, através de alguma experiência apropriada, mas nenhum deles teve sucesso.
- O problema é que qualquer tentativa de medida irá interferir no sistema, modificando a configuração original!
- E a grande questão é que, pela formulação da Física Quântica, as "*ondas* ψ" associadas às partículas não correspondem a qualquer tipo de oscilação de algum ente físico.
- Isto é, a função ψ não tem qualquer significado físico direto; contrariamente às ondas clássicas que podem ser observadas e medidas em laboratório.
- Para finalizar, vamos agora discutir um outro ponto muito importante.
- Agora, se pela Física Clássica é perfeitamente plausível medir a posição (x) e a velocidade (momento p) de uma partícula, em um dado instante t, com a precisão que se queira, o mesmo não ocorre com relação a sistemas quânticos.
- Em 1927, o físico alemão *Werner Heisenberg* demonstrou que quanticamente seria impossível medir, com precisão, a posição e o momento linear de uma partícula simultaneamente: este ficou conhecido como sendo o ***Princípio da Incerteza***.
- Ou seja, se Δx corresponder à incerteza na medida de posição da partícula e Δp a incerteza na medida do seu momento, então segundo o ***Princípio de Incerteza*** de Heisenberg a relação seguinte deve sempre ser satisfeita:

$$\boxed{\Delta x\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

- De forma que, se Δx for muito pequeno, então Δp deverá ser muito grande e vice-versa.
- E esta impossibilidade não advém da questão dos aparelhos de medida serem adequados, mas sim da própria estrutura atômica da matéria!
- Uma outra relação de incerteza que vale ser lembrada é a que envolve as grandezas energia ($E = hf$) e tempo:

$$\boxed{\Delta E\, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

- ***Exemplo:*** A velocidade de um elétron é medida como sendo $v = 5{,}00000 \times 10^3 m/s$, sendo que a incerteza na medida é de 0,003%. Qual seria a incerteza mínima que se obteria na medida de posição deste elétron?

- ***Resolução:*** Dada a velocidade, temos o momento do elétron:

$$p_e = m_e v_e = (5{,}000\times10^{3})(9{,}109\times10^{-31}) = 45{,}547\times10^{-28}\,Kg\cdot m/s$$

$$\therefore\ \Delta p = (0{,}00003)(45{,}547\times10^{-28}) = 0{,}0014\times10^{-28}$$

0,003 %

de forma que: $p = (45{,}547 \pm 0{,}001)\times10^{-28}\,kg\cdot m/s$

e como $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$: $\Delta x_{\min} = \dfrac{h}{4\pi\Delta p} = 0{,}377\,mm$

- ***Exemplo:*** O tempo médio de decaimento de um átomo excitado é de $\tau \approx 10^{-8}\,s$. Considerando que este valor corresponde à incerteza na medida temporal:
  a) Calcule a largura da raia Δf correspondente, utilizando o *Princípio de Incerteza*.
  b) Se $\lambda_{raia} = 500nm$, ache o alargamento relativo $\Delta f\ /\ f_0$ desta raia.

- ***Resolução:***

a) $\Delta E\Delta t \geq \dfrac{\hbar}{2}$; $\Delta E = h\Delta f \quad \therefore \quad \Delta f = \dfrac{\cancel{h}}{4\pi\cancel{h}\tau} = 8\times10^{6}\,Hz$

note que esta é a incerteza relacionada com o nível de energia do átomo bem como com a energia do fóton emitido devido ao decaimento.

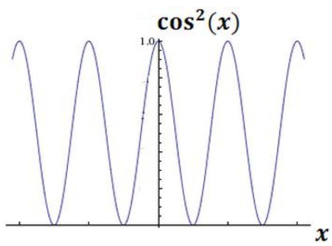
b) $f_0 = \dfrac{c}{\lambda} = 6{,}0\times10^{14}\,Hz \quad \therefore \dfrac{\Delta f}{f_0} = \dfrac{8\times10^{6}}{6\times10^{14}} = 1{,}3\times10^{-8}$

- Vamos mostrar agora qual será o procedimento a ser seguido para descobrirmos as funções de onda adequadas para os sistemas físicos de interesse.

- Considerando novamente o caso de uma partícula livre (em *1D*) que possui um comprimento de onda de *de Broglie* λ_0 ($k_0 = 2\pi/\lambda_0$) correspondente ao momento linear $p_0 = h/\lambda_0$, talvez pudéssemos pensar em representa-la, por analogia com o estudo que já fizemos sobre as ondas eletromagnéticas clássicas, da forma:

$\psi = A\cos\left(k_0 x - \omega t\right)$; com densidade de probabilidade $\left|\psi\right|^2 = A^2\cos^2\left(k_0 x - \omega t\right)$

- Mas, se assim fosse, haveria posições no eixo x nas quais a partícula nunca seria encontrada!



- Também por esta razão é que a função de onda adequada para representar uma partícula livre é da forma:

$$\boxed{\psi = Ae^{i(k_0 x - \omega t)}}$$; de maneira que:

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = \left(Ae^{i(k_0 x-\omega t)}\right)\left(Ae^{i(k_0 x-\omega t)}\right) = \underline{\underline{A^2, \text{constante!}}}$$

- Ou seja, a probabilidade de encontrar a partícula em <u>qualquer ponto</u> do eixo x é a mesma (como deveríamos esperar).

- Lembrando agora da *Lei de Conservação de Energia*: $E = E_{cin} = E_{pot}$, vamos escrevê-la da forma: $\boxed{E = \dfrac{p^2}{2m} + U}$; $\underline{p = \hbar K}$.

- E veja que interessante: se multiplicarmos os dois lados desta equação pela função de onda ψ, teremos: $E\psi = \dfrac{1}{2m} p^2\psi + U\psi$

- Agora, considerando que $\psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$ $\Rightarrow$ $\dfrac{d\psi}{dx} = ikAe^{i(kx-\omega t)}$ $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = i^2k^2Ae^{i(kx-\omega t)} = -k^2\psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \;\Rightarrow\; \underline{p^2\psi = -\hbar^2\frac{d^2\psi}{dx^2}}$$

- Substituindo na equação de *conservação de energia*:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi}$$; e esta é a famosa ***"Equação de Schrödinger"***

(independente do tempo)

(veja no *Apêndice* uma outra maneira interessante de se chegar a esta equação)

- E será esta a equação a ser resolvida para obtermos a função de onda ψ do sistema a ser estudado, conhecendo a *função potencial U* correspondente.

- Propriedades a serem satisfeitas pela função de onda ψ:

  (i) Deve ser unívoca

  (ii) Deve ser contínua

  (iii) A primeira derivada deve ser contínu

- Na próxima aula mostraremos como resolver esta equação para alguns sistemas físicos de interesse.

Apêndice: Forma alternativa para se chegar à equação de Schrödinger

- Como vimos, os fenômenos quânticos envolvendo partículas com momento linear $p = mv$ possuem, associado a eles, um caráter ondulatório de forma que também $p = h/\lambda = \hbar K$.
- É razoável supor que a função de onda ψ (que irá descrever o caráter ondulatório da partícula), por sua vez, deva ser solução de uma equação de onda (em analogia com ondas em uma corda, campos $\vec{E}$ e $\vec{B}$ das equações de Maxwell, etc.) do tipo:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

"velocidade da onda"

- Considerando que, para uma partícula livre: $\psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = A\,e^{ikx}e^{-i\omega t}\text{; que representaremos por } \underline{\psi(x,t) = \psi(x)e^{i\omega t}}$$

- Derivando *2* vezes esta última equação em relação a <u>*x*</u> e <u>*t*</u>, e substituindo na equação de onda (1):

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}e^{-i\omega t} - \frac{1}{v^2}\underbrace{(-i)^2}_{=-1}\omega^2\psi(x)e^{-i\omega t} = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{v^2}\psi(x) = 0 \quad (2)$$

- Mas: $\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{(2\pi \cancel{f})^2}{\lambda^2 \cancel{f^2}}$; e como $p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \frac{1}{\lambda^2} = \frac{p^2}{h^2}$, $\therefore$ $\underline{\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{p^2}{(h/2\pi)^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}}$ (3)

- Da conservação de energia: $E = E_{cin} + E_{pot} = \frac{p^2}{2m} + U \Rightarrow p^2 = 2m(E-U)$ (4)

- Substituindo (4) em (3), e depois em (2):

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo