

# Universidade Sistema Instituto de Física Universidade de São Paulo

# FÍSICA MODERNA I **AULA 17 - REVISÃO**

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto Pelletron – sala 220 rizzutto@if.usp.br

10. Semestre de 2015

**Monitor:** Gabriel M. de Souza Santos

Página do curso:

## Conteúdo P2

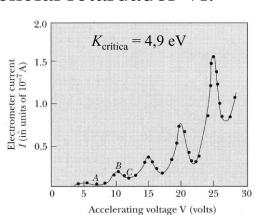
- Panorama da Física no final do século XIX
- Natureza Ondulatória da Radiação eletromagnética
  - Radiação Térmica Hipótese de Planck
- Dualidade onda partícula: Radiação eletromagnética e as propriedades corpusculares
  - Efeito fotoelétrico
  - Efeito Compton
  - Produção e aniquilação de pares
  - Difração de raios-X
- Dualidade onda partícula: Matéria e as propriedades corpusculares
  - Natureza atômica da matéria
  - Modelo de Thomson
  - Modelo de Rutherford
  - Modelo de Bohr
  - Modelo de Sommerfeld –FranckHertz
- Dualidade onda partícula: Matéria e as propriedades ondulatórias
  - Postulado de de Broglie
  - Difração de elétrons,
  - Difração de Bragg
  - Principios de incerteza
- Teoria de Schroedinger da Mecânica Quântica
  - Equação de Schroedinger equação de onda para o elétron
  - Autofunções e autovalores
  - Valores esperados
  - Equanção de Schroedinger Depende e independente do tempo
  - · Potenciais nulo, degrau e poço quadrado
- Átomo de Hidrogênio

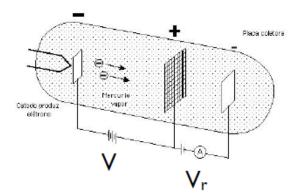
#### **BIBLIOGRAFIA**

- Física Quântica, Eisberg e Resnick (ER);
- Capítulo 3, 4 (4.8 até 4.12), 5 (até 5.4)
- 2) Modern Physics for scientists and engineers, T. Thornton e Andrew Rex (TR);
- Capítulo 4 (4.7), 5, 6 (até 6.3)
- 3) Modern Physics de Serway, Moses e Moyer (SMM);
- Capítulo 4 (4.5), 5, 6 (até 6.4)
- 4) Física Moderna, Paul A. Tipler e Ralph A. Liewellyn (TL);
- Capítulo 4 (4.5), 5, 6 (6.1)
- 5) Notas de aula do Professor Roberto V. Ribas (RR)
- Capítulo 4 (4.4), 5
- 6) Física Moderna, Francisco Caruso e Vitor Oguri (FV)
- Capítulo 14

# Experimento de Frank - Hertz

- Franck e Hertz em 1914 realizaram um experimento que para confirmação que os estados de energia interna de um átomo são quantizados.
- Ampola de vidro com gás a baixa pressão (gás de átomos para investigar).
- Catodo aquecido que produz elétrons.
- Elétrons são acelerados por um potencial V e atraídos pela grade polarizada positiva.
- Os elétrons que passam pela grade só chegam a placa P se tiverem energia suficiente para vencer o potencial retardador Vr.





 $eV=E_2-E_1=4,9eV$  (gráfico mostra primeiro pico).

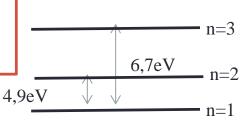
■Se eV>=4,9eV, o elétron incidente poderá transferir 4,9eV ao elétron do gás (fazer o elétron ir para o estado excitado), o espalhamento é inelástico e o elétron perde toda a sua energia e não consegue vencer o potencia Vr e a corrente cai.

## Experimento de Franck - Hertz

 O primeiro estado excitado do Hg (mercúrio) tem energia 4,9 eV acima do estado fundamental

$$\frac{hc}{\lambda} = 4.9 \ \lambda = 253 \dot{A} = 2536 mm$$

- Experimentalmente temos uma linha espectral do mercúrio com este comprimento de onda
- E excitações múltiplas causadas pelo mesmo elétron 2x4,9=9,8V (metade do caminho até a grade)
- Na configuração do arranjo apenas as excitações múltiplas para o primeiro estado excitado são observadas, de modo que as quedas de corrente acontecem a cada 4,9V



# Hipóteses de de Broglie

- A hipótese de de Broglie em sua tese de doutorado de 1924, era que o comportamento dual (onda-partícula) da radiação eletromagnética poderia ser aplicado a matéria
- Vimos que podemos associar a um fóton uma frequência de uma onda luminosa que governa seu movimento E=hv
- E um momento do fóton é relacionado ao comprimento de onda

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

- Então segundo de Broglie se ondas de luz tem propriedades de partículas, partículas devem ter propriedades de onda. E propôs que ambas as relações cima são validas também para partículas.
- Deste modo, o comprimento de onda (não relativístico) associado a partícula d emassa m e velocidade v é:

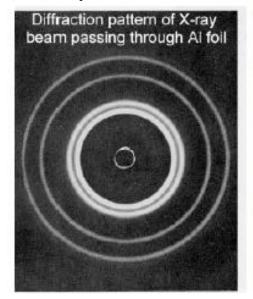
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

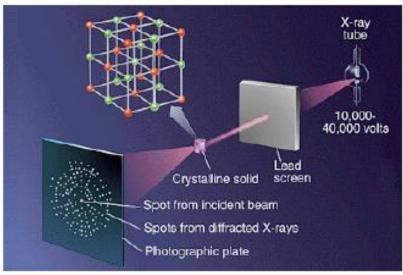
# Difração de RX

•O pequeno alargamento sofrido por um feixe de raios X ao passar por uma fenda de alguns milésimos de milímetros de largura indicava que

$$\lambda \sim 10^{10} m = 0.1 nn$$

- •Bragg em 1912 estudou a difração de raios X em várias famílias de planos paralelos de átomos
- •As ondas difratadas com o mesmo ângulo por átomos situados em planos diferentes estarão em fase (interferência construtiva) se a diferença entre os dois percursos foi igual ao um numero inteiro de comprimento de onda  $2dse\theta = n\lambda$





# Difração de elétrons

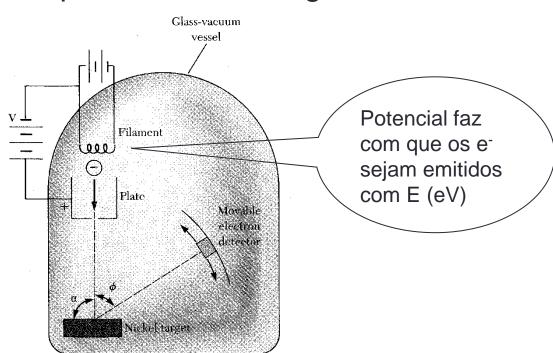
#### Temos que:

Elétron para este caso podemos associar um comprimento de onda (por exemplo para energia cinética de 100 eV) – De Broglie

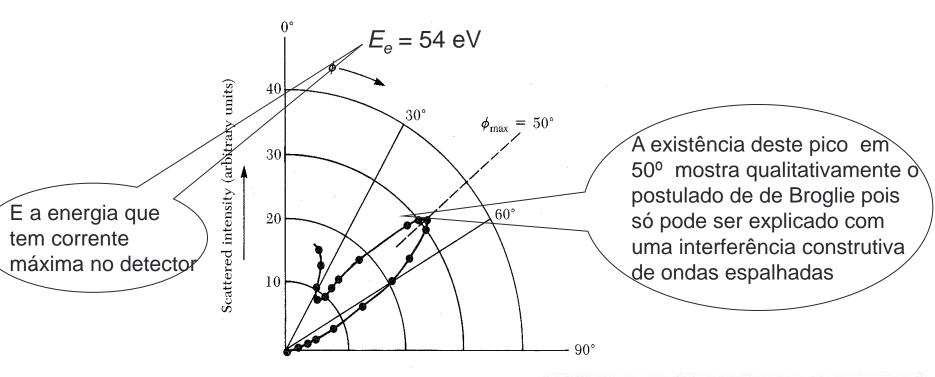
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2E}} = \frac{1,24keVnm}{\sqrt{2.5.10.10(kV)^2}} = 1,2x10^{10}m$$

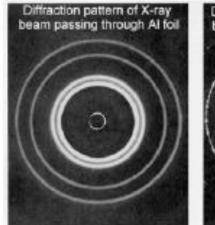
Testes experimentais da hipótese de de Broglie

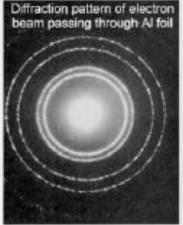
- 1927 Davisson e Germer (USA) e G. Thomson (Escócia):
- Estudaram a quantidade de elétrons que eram espalhados em uma superfície de Ni em função do ângulo de espalhamento



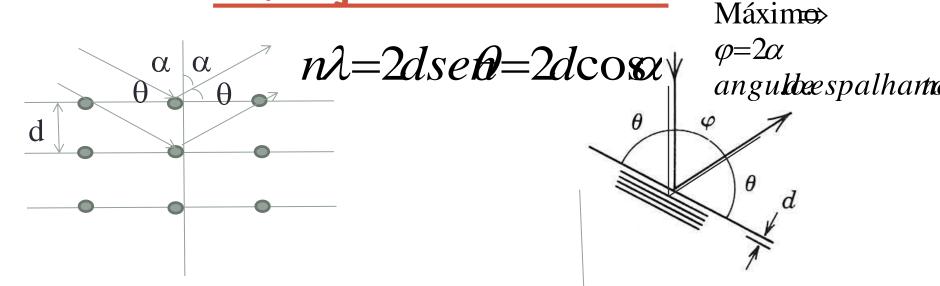
# Difração de elétrons







## Difração de elétrons



d é a distância entre os planos de Bragg esta relacionada a distância interatômica D através da relação: d=Dsex

$$n\lambda = 2Dse\alpha\cos\alpha$$
  
 $n\lambda = Dse\alpha\cos\alpha = Dse\alpha$ 

Medidas de difração de RX revelaram que D=0,215nm para o Ni. O comprimento de onda então calculado para n=1

$$\lambda = 0.215e50 = 0.165n$$

## Caso relativístico

 Para se determinar uma expressão equivalente que se aplique tanto as partículas relativísticas como não-relativísticas: Energia de

$$E^{2} = (pc)^{2} + (mc)^{2} \qquad mc^{2} = E_{0} \text{ particula}$$

$$(E_{0} + E_{K})^{2} = (pc)^{2} + (E_{0})^{2}$$

$$E = E_{0} + E_{K}$$

$$p = \frac{(2E_{0}E_{K} + E_{K}^{2})^{1/2}}{C}$$

$$\lambda = \frac{hc}{p} = \frac{hc}{\left(2E_0E_K + E_K^2\right)^{1/2}}$$

Aplicável a qualquer partícula com qualquer energia

## Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

- Em 1916, Wilson e Sommerfeld enunciaram um conjunto de regra de quantização:
- "Para qualquer sistema físico no qual as coordenadas são funções periódica do tempo existe uma condição quântica para cada coordenada"

$$\int P_q dq = n_q h$$

q é uma coordenada,  $p_q$  é o momento associado a esta coordenada e ,  $n_q$  é o número quântico que toma apenas valores inteiros.

significa que a integração é tomada sobre um período da coordenada q.

# Exemplo:

No caso do átomo de H o elétron se movendo em uma órbita de raio r tem momento angular constante L=mvr.

A coordenada  $\theta$  é uma função periódica do tempo (0 a  $2\pi$ )

$$\int_{0}^{2\pi} L d\theta = nh$$

$$L \int_{0}^{2\pi} d\theta = nh$$

$$L (2\pi = nh) \Rightarrow L = n\hbar$$

## Regras de quantização de Wilson e Sommerfeld

 Uma interpretação física da regra de quantização de Bohr foi dada em 1924 por de Broglie

$$L = mv = n\hbar$$

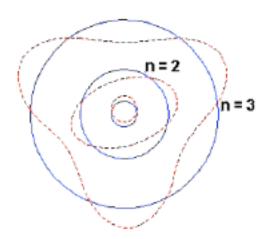
$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$2\pi r = n\lambda$$

Momento do elétron em uma órbita possível de raio r,

As órbitas possíveis são aquelas nas quais as circunferências podem conter exatamente um número inteiro de comprimentos de onda de de Broglie



Sommerfield trabalhou com órbitas elípticas para o átomo de H e também levou em conta as correções relativísticas para a energia do elétron. Usou isto como tentativa de explicar a estrutura fina do hidrogênio (Estrutura fina é uma separação das linhas espectrais em várias componentes diferentes).

## Orbitas elípticas de Sommerfeld

Sommerfeld calculou os valores dos semi-eixos maior (a) e menor (b) que dão a forma e o tamanho das órbitas elípticas e a energia total E do elétron nessa órbita

$$a = \frac{4\pi \varepsilon n^2 \hbar^2}{\mu Z e^2}$$

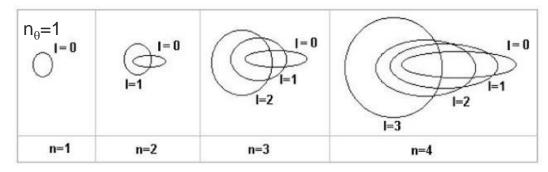
$$b = a \frac{n_\theta}{n}$$

$$E = -\left(\frac{1}{4\pi \varepsilon}\right)^2 \frac{\mu Z^2 e^4}{2n\hbar^2}$$

μ é a massa reduzida n é o número quântico:

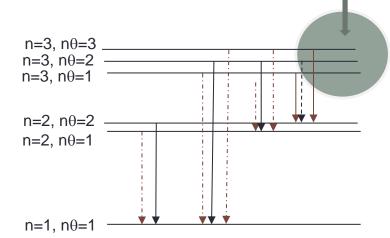
$$n \equiv n_{\theta} + n_{r} \frac{n_{\theta} = 1,2,3....}{n_{r} = 0,1,2,3....}$$
 $n = 1,2,3....$ 
As energia são

As energia são degeneradas



$$E=E_1$$
  $E=E_2$   $E=E_3$ 

$$E=E_4$$



# Orbitas elípticas de Sommerfeld tratadas relativisticamente

O tamanho real da correção depende da velocidade média do elétron que por sua vez depende da excentricidade da órbita, correções da ordem de  $v^2/c^2$ , era provável que a maior correção fosse na órbita muito excêntrica, porque v aumenta à medida que o elétron se aproxima do núcleo  $\mathbf{k}_{\kappa}$ 

$$v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{\hbar}{mr} (n=1)$$

$$r_1 = a_0 = \frac{4\pi \xi \hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar^2}{mke^2}$$

$$E = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon}\right)^{2} \frac{\mu Z^{2} e^{4}}{2n\hbar^{2}} \left[1 + \frac{\alpha^{2} Z^{2}}{n} \left(\frac{1}{n_{\theta}} - \frac{3}{4n}\right)\right]$$

 $\alpha$  é chamada de "constante de estrutura fina"

$$v = \frac{\hbar}{mr} = \frac{\hbar}{m(\frac{\hbar^2}{mk^2})} = \frac{k\vec{e}}{\hbar} \frac{\alpha}{v} = \frac{k\vec{e}}{\hbar c} = \frac{1,44vnm}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=3 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=1}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=2 \\ n=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n=3, \ n\theta=3, \ n\theta=2}}^{n=3, \ n\theta=2} = \frac{1}{19 \text{Bevnm}} \Big|_{\substack{n$$

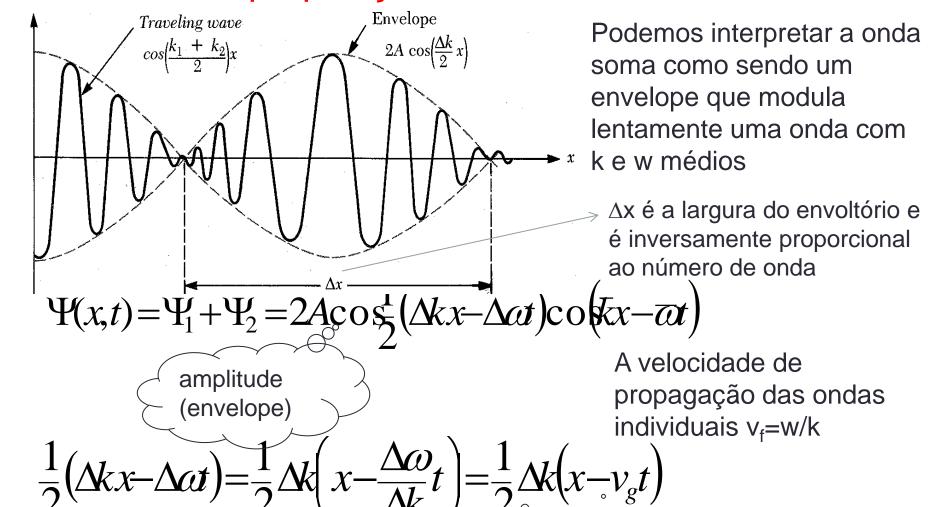
As linhas tracejadas não foram observadas nos espectros e estas transições não ocorrem (regras de seleção):  $n_{\Omega} - n_{\Omega} = \pm 1$ 

$$\alpha = \frac{k\vec{e}}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$$

n=2, nθ=2 n=2, nθ=1

 $n=1, n\theta=1$ 

#### Superposição de duas Ondas



A velocidade de propagação do grupo de grupo (que é a velocidade do envoltório)

Em contraste com o pulso a combinação de ondas não é localizada no espaço

velocidade

# Ondas harmônicas que compõem um pacote de ondas. A velocidade é dada por:

$$v_f = \lambda f$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$
  $\omega = 2\pi$ 

$$\omega=2\pi$$

Velocidade de fase

$$v_f = \left(\frac{2\pi}{k}\right)\left(\frac{\omega}{2\pi}\right)$$

$$v_f = \left(\frac{\omega}{k}\right)$$

$$v_f k = \omega$$

A velocidade de grupo esta relacionada a velocidade de fase por:  $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}(kv_f) = v_f + k\frac{dv_f}{dk}$ 

• A velocidade  $v_g$  pode  $ser > ou < que v_f$ 

Para o postulado de de Broglie

$$E=h\nu=\hbar\omega$$
  $p=\frac{h}{\lambda}=\hbar k$   $E=\frac{p^2}{2m}$ 

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E \hbar}{\hbar} \frac{p}{p} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

 A velocidade de fase n\u00e3o corresponde a velocidade da part\u00e1cula

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v$$

 O pacote de onda se propaga com velocidade do elétron

#### Princípio de incerteza de Heisenberg, diz:

que é impossível determinar (fazer medidas) simultaneamente da posição e momento de uma partícula) (x e  $p_x$ , por exemplo) apresentam uma relação entre suas incertezas dada por

$$\Delta k \Delta x \ge \frac{1}{2}$$

$$\Delta p \Delta x \ge \frac{\hbar}{2}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi \frac{p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

Quanto mais bem definida a posição de uma partícula (pacote de onda mais estreito), menos definido será o momento dessa partícula (uma combinação maior de comprimentos de onda, e portanto de momentos será necessário)

O princípio de incerteza também pode ser enunciado em termos da energia e do tempo:

Das propriedades do pacote de onda, tem-se que:

$$E=h\nu=h\frac{\omega}{2\pi}=\hbar\omega$$

$$\Delta\omega\Delta t \ge \frac{1}{2}$$

$$\Delta E.\Delta t \ge \frac{\hbar}{2}$$

#### Probabilidade

Em 1925-1926 Max Born propôs como relacionar a Ψ (função de onda) com o comportamento das partículas que ela descreve:

A probabilidade que a partícula seja encontrada no instante t em uma coordenada entre x e x+dx é :

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

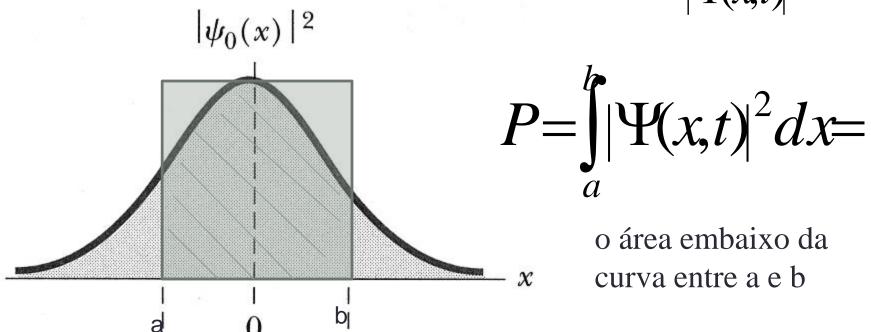
$$P(x)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

Ψ não é uma quantidade mensurável, mas o seu módulo ao quadrado é mensurável e é justamente a probabilidade por unidade de comprimento ou densidade de probabilidade P(x) para encontrar a partícula no ponto x no tempo t.

Já que a partícula deve ser encontrada em algum lugar ao longo do eixo x, a soma das probabilidade sobre todos os valores de x deve ser 1.

$$\iint_{\mathbb{R}^2} \Psi(x,t)^2 dx = 1$$
 Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

A probabilidade de uma partícula estar no intervalo a=<x<=b esta relacionado área embaixo da curva de a até b de uma função densidade de probabilidade  $|\Psi(x,t)|^2$ 



#### **OBSERVÁVEIS:**

Ψ não é uma quantidade mensurável

MAS como podemos relacionar a função de onda com grandezas observáveis????

COMO podemos obter a posição, o momento ou a energia de uma partícula a partir da função de onda (de maneira exata no mundo quântico)?????

#### **VALORES ESPERADOS:**

USANDO a interpretação probabilística de Bohr, podemos obter apenas os <u>valores médios</u> ou <u>valores esperados</u> das grandezas + \*\*

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x R(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx$$

#### OPERADORES - OBSERVÁVEIS RESUMIDAMENTE

1- no caso da posição o operador é o próprio valor da posição:

$$\hat{x} \iff x$$

2 - no caso do momento, operador é dado per:
$$\hat{p} \iff i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\bar{p} = \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t) dx$$

3 - no caso da energia, operador é dado por:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

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

#### OBSERVÁVEIS - VALOR ESPERADO

Temos então que o valor esperado de qualquer grandeza que depende da posição, do momento, da energia pode ser determinado através de:

$$f(x,p,E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \hat{f}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi(x,t) dx$$

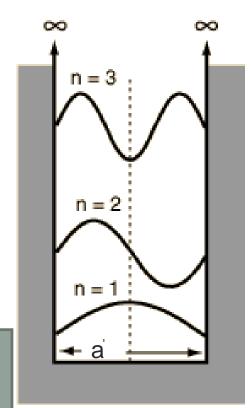
O valor médio de uma grandeza em mecânica quântica é normalmente chamado de valor esperado, que é o valor que se espera obter de uma medida daquela grandeza.

Observe que não esperamos necessariamente que o valor de uma medida que tenha uma alta probabilidade seja igual ao valor esperado.

#### Elétron em uma caixa

Podemos associar a probabilidade de localizar a partícula em um estado com menor energia usando uma função de onda para o elétron (associar

ao elétron uma onda cossenoidal)



x = 0 at left wall of box.

Função de onda

$$\Psi(x) = A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$
$$-\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}, n = 1, 2, 3...$$

A probabilidade que a partícula seja encontrada em um ponto na coordenada x entre -a/2 e a/2 é:

$$P(x) = |\Psi(x)|^{2} dx$$

$$P(x) = \Psi^{*}(x)\Psi(x)dx$$

$$\Psi_{n}^{2}(x) = A^{2} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

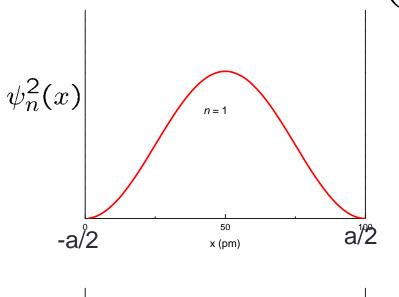
$$\Psi_n^2(x) = A^2 \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

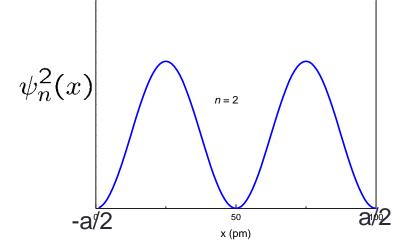
 $P(x) = \int_{-a/2}^{+a/2} A^2 \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx$ 

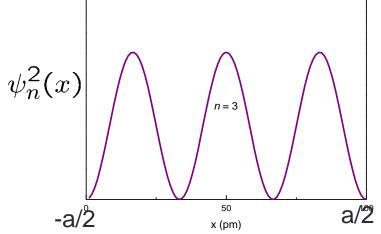
Onda fixa nas ponta separada por uma distância a, terá  $\lambda/2$  comprimentos  $a = \frac{n\lambda}{2}$ de onda:

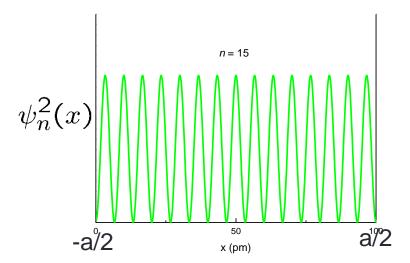
#### Elétron em uma caixa

$$\Psi_n^2(x) = A^2 \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right), n=1,2,3...$$









Já que a partícula deve ser encontrada em algum lugar ao longo do eixo x, a soma das probabilidade sobre todos os valores de x deve ser 1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

No nosso caso:

Qualquer função que satisfaz esta equação é dita normalizada

$$P(x) = \int_{-a/2}^{+a/2} A^2 \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = 1$$

Mudança de variável

$$\theta = \frac{\pi}{a} x$$

$$d\theta = \frac{\pi}{a} dx$$

$$\psi_n^2(x)$$

$$\begin{array}{c|c}
& & \\
& & \\
& & \\
-a/2 & & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\
& & \\$$

Posso calcular:

$$p = \langle p \rangle ou.. \langle p^2 \rangle$$

 $\bar{x} = \langle x \rangle ou.. \langle x^2 \rangle$ 

$$P(x) = A^{2} \frac{a}{\pi} \int_{-a/2}^{+a/2} \cos \theta d\theta = 1$$

$$A^{2} \frac{a}{\pi} \frac{\pi}{2} = 1$$

$$A^2 \frac{a}{\pi} \frac{\pi}{2} = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Constante de normalização

Esperamos que a Equação de Schrödinger incorpore os seguintes princípios fundamentais:

- A conservação de energia: este principio é tão básico que sua exclusão é impensável.
- A hipótese de de Broglie: mecânica quântica esta especificamente relacionada a partículas que mostram distintas propriedades de ondas.

O princípio de conservação de energia é definido pela equação:

$$E=E_c+E_p$$
  $E_c=rac{p^2}{2m}$  Substituindo a equação de de Broglie:  $p=rac{h}{\lambda}$   $E_c=rac{h^2}{2\mathcal{R}m}$ 

Vamos assumir, por simplicidade, que a parte da função de onda da partícula independente do tempo, em uma dimensão, pode ser escrita como:

Acabamos de ver que: 
$$E_c = \frac{h^2}{2 2 m}$$
 então :  $E_c = \frac{h^2}{2 2 m} = E - E_p$ 
A equação:  $\mathcal{V} = A S e n l$   $\mathcal{E} = \frac{h^2}{2 (E - E_p) m}$ 

A derivada segunda desta equação é:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A \operatorname{sink} x = -k^2 \psi \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -4\pi^2 \frac{2(E - E_p)m}{h^2} \psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi$$

Esta equação é a forma unidimensional da **equação de Schrödinger** 

Vimos que:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p)\psi$$

Vamos re-escrever:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - E_p)\psi$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p\psi = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - E_p)\psi$$

$$\hat{E}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Para uma função de onda dependente de x e t

 $\psi(x,t)$ 

## Equação de Schrödinger dependente do tempo

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

## Equação de Schrödinger independente do tempo

Geralmente estudaremos os casos que correspondem a situações de onda estacionária:

átomo de hidrogênio,

Partículas em uma caixa

Oscilador harmônico

Nestes casos o potencial V não depende explicitamente do tempo

V(x,t)=V(x) — Utilizaremos neste caso a ideia de separação de variáveis:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Cuja parte espacial, chamada de autofunção é obtida pela equação diferencial:

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