

Física IV

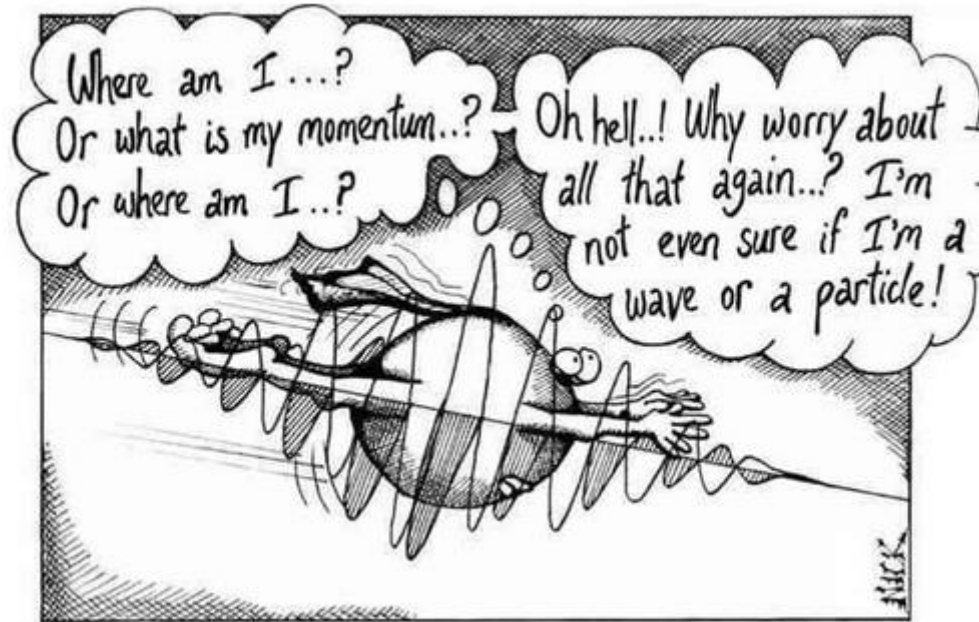
2020

Professor: Valdir Guimarães

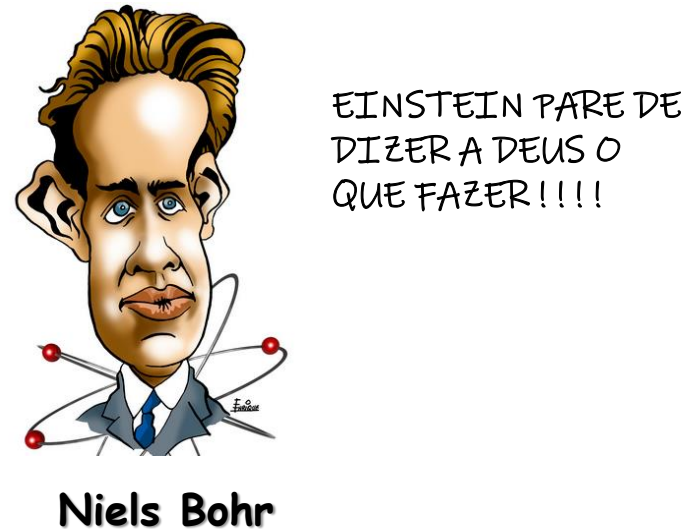
E-mail: valdir.guimaraes@usp.br

Aula-16: Eq. Schrodinger

Dualidade onda-partícula



- ❑ Mecânica Quântica é uma teoria probabilística.
- ❑ Princípio de incerteza de Heisenberg indica o carácter probabilístico.
- ❑ A função de onda é complexa.
- ❑ No entanto, a partir da função de onda podemos descrever o estado de uma partícula e obter informações reais sobre sua energia, momento, posição etc..



<https://www.umsabadoqualquer.com/tirinhas/um-sabado-qualquer/>



Partícula livre

A função de onda descreve o movimento de uma partícula.

$$\Psi(x, t) = A[\cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t)]$$

ou

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

$$\lambda = 2\pi/k$$

$$k = 2\pi/\lambda$$

$$T = 2\pi/\omega,$$

$$\nu = 1/T = \omega/2\pi$$

$$\omega = 2\pi\nu.$$

Partícula se movendo no sentido positivo de x com momento p e energia E

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



$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



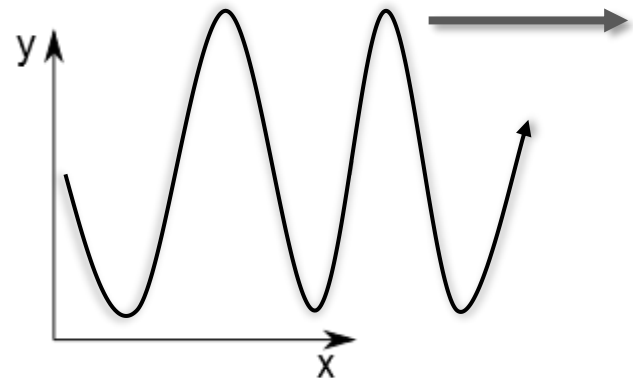
$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

Direção de propagação

Se o momento "p" ou numero de onda "k" é bem definido, $\Delta p_x \rightarrow 0$, pelo principio da incerteza a posição da partícula é indefinida $\Delta x \rightarrow \infty$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$



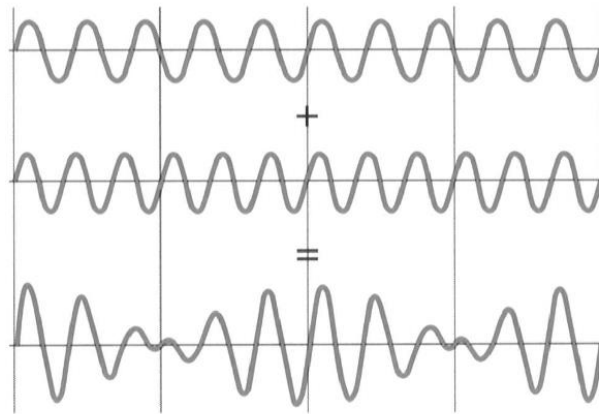
Pacote de onda

Como descrever uma partícula localizada na mecânica quântica ?

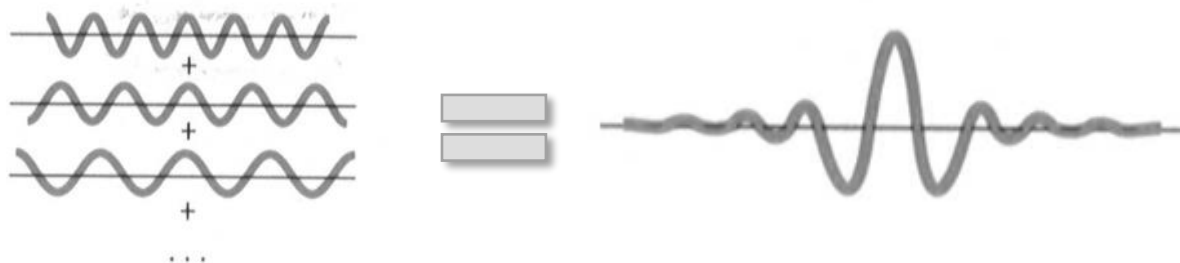


Com pacote de onda (soma de várias ondas)

Somatória de onda com frequência diferentes (mas próximas) -> batimento



A superposição de várias ondas resulta num pacote de onda mais localizado.



Considere a soma de duas ondas com frequência diferentes (mas próximas)

$$\Psi(x, t) = A \cos(k_1x - \omega_1t) + A \cos(k_2x - \omega_2t)$$

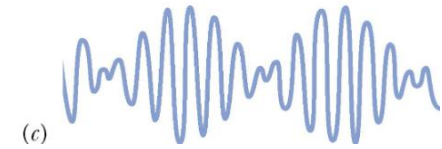
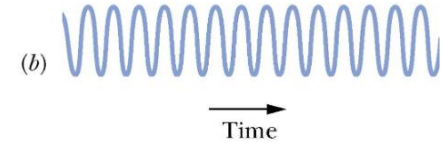
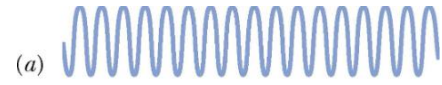
Usando que: $\cos(\alpha) + \cos(\beta) = 2 \cos\left(\frac{\beta - \alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\beta + \alpha}{2}\right)$



$$\Psi(x, t) = 2 \cos\left(\frac{k_2x - \omega_2t - k_1x - \omega_1t}{2}\right) \cos\left(\frac{k_2x - \omega_2t + k_1x - \omega_1t}{2}\right)$$



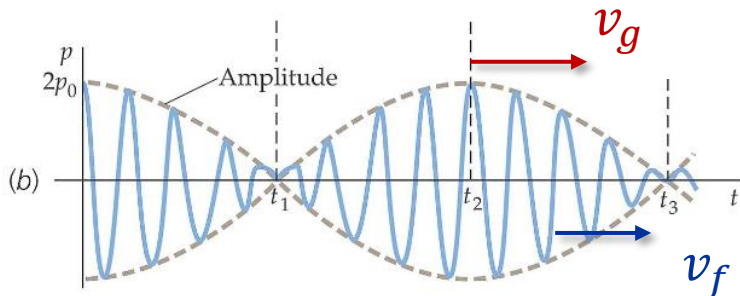
$$\Psi(x, t) = 2 \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta \omega}{2}t\right) \cos(\bar{k}x - \bar{\omega}t)$$



Com:

$$\begin{cases} \Delta k \equiv k_2 - k_1 \\ \Delta \omega \equiv \omega_2 - \omega_1 \\ \bar{k} = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \\ \bar{\omega} = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2) \end{cases}$$

Batimento (envelope dado pela frequência $\Delta \omega$)



Velocidade de grupo

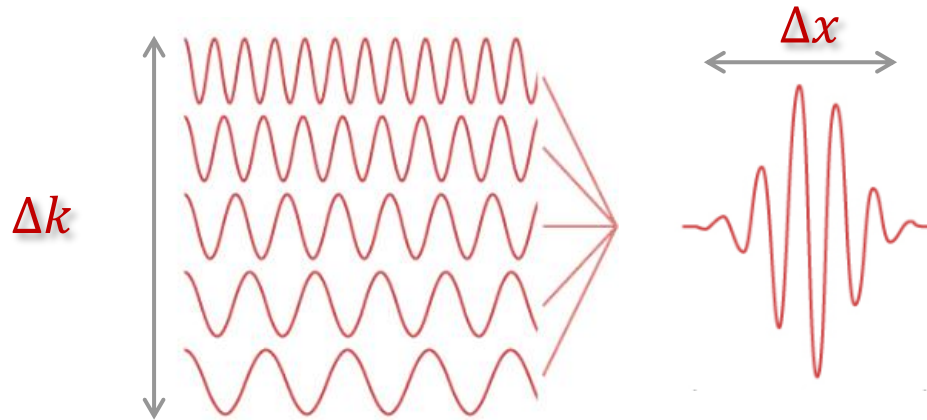
$$v_g = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}$$

Velocidade de fase

$$v_f = \frac{\bar{\omega}}{\bar{k}}$$

Se somarmos várias ondas podemos obter um pacote de ondas mais localizado.

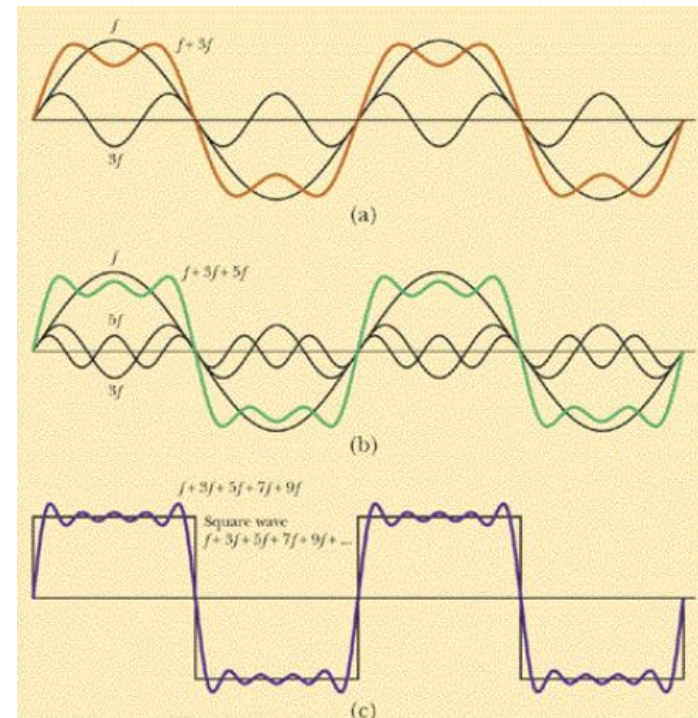
Uma soma de várias ondas com $k_1, k_2, k_3 + \dots$ numa faixa de largura Δk produz um pacote de onda localizado num intervalo $\Delta x = 2\pi/\Delta k$



Essa é a ideia da análise de Fourier onde uma função pode ser dada por uma soma de funções harmônicas

Análise de Fourier de uma onda quadrada, que é representada pela soma dos múltiplos ímpares do primeiro harmônico de frequência f

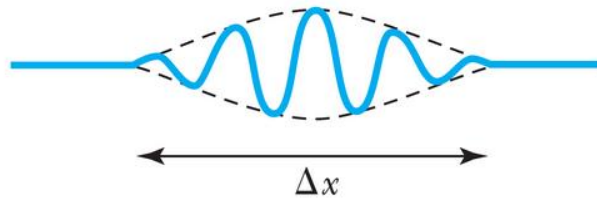
- (a) Adição das ondas de freq. f e $3f$
- (b) Adição de $5f$
- (c) Adição até $9f$: a curva da síntese se aproxima da onda quadrada



Pacote de onda na mecânica quântica.

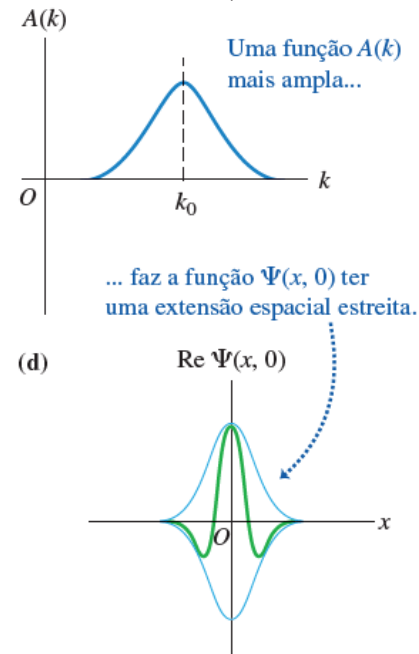
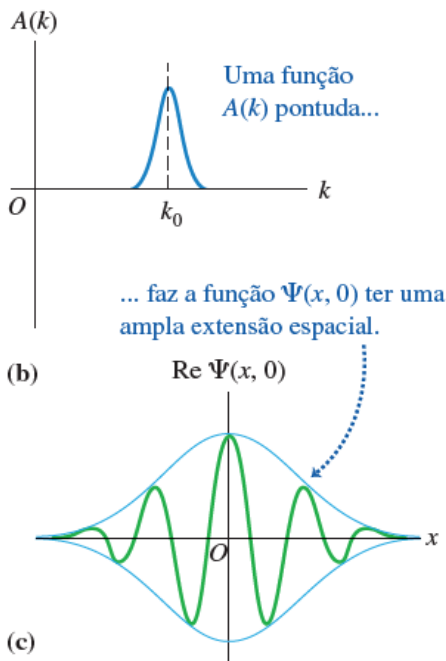
Na mecânica quântica utilizamos a função de onda.

Para descrever uma partícula mais localizada podemos então considerar a ideia de análise de Fourier e somar várias funções de onda.

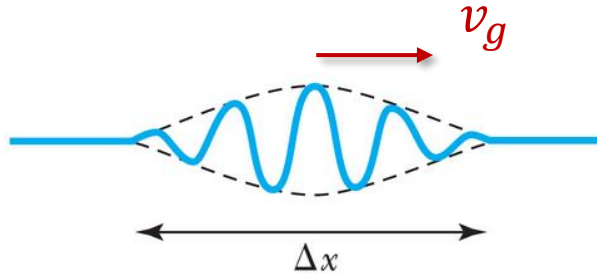


$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

A amplitude $A(k)$ define como será a localização em momento que por sua vez define como será a localização em posição da função de onda resultante.



Partícula como pacote de onda:



Velocidade de grupo

$$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$$

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

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



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



$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Velocidade de grupo

$$v_{group} = \lim_{\delta\omega \rightarrow +0} \frac{\delta\omega(k)}{\delta k} = \frac{d\omega(k)}{dk}$$



$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk}$$



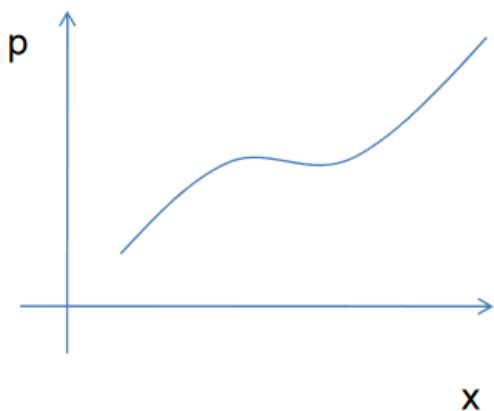
$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{2\hbar k}{2m} = \frac{2p}{2m}$$



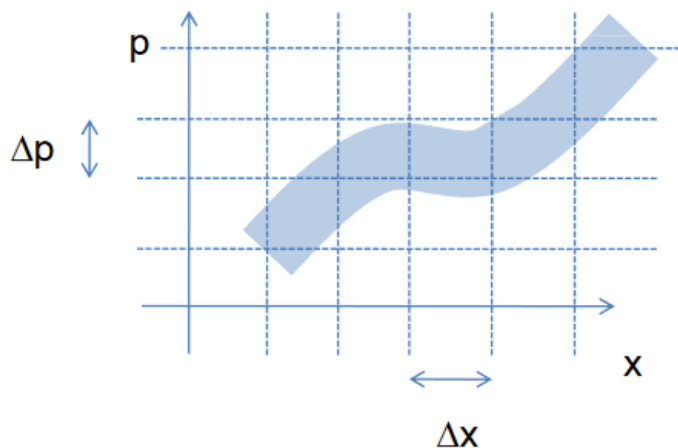
$$v_g = \frac{p}{m} = \frac{mv_{particle}}{m} = v_{particle}!!$$

Na mecânica quântica o momento p_x e posição da partícula x devem obedecer o princípio de incerteza de Heisenberg.

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

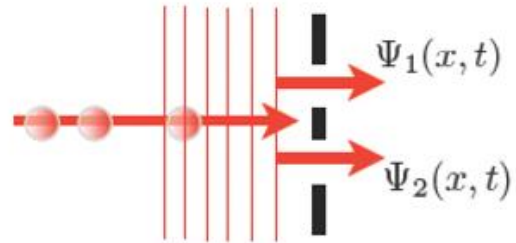


Mecânica clássica



Mecânica quântica

Fenda dupla na mecânica quântica



Soma as amplitudes:

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)$$

 Interferência

Valor esperado.

□ **Valor esperado:** média de muitas medidas de uma quantidade.

Na teoria de probabilidade o valor médio de uma variável discreta é dado por:

$$\bar{x} = \frac{N_1 x_1 + N_2 x_2 + N_3 x_3 + N_4 x_4 + \dots}{N_1 + N_2 + N_3 + N_4 + \dots} = \frac{\sum_i N_i x_i}{\sum_i N_i}$$

Para uma variável contínua:

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx}$$

Na mecânica quântica:

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx}$$

❑ Valor esperado para posição:

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx}$$

Se a função de onda for devidamente normalizada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad \text{ou} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$



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

Isso vale para qualquer variável e qualquer função:

$$\langle g(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) g(x) \Psi(x,t) dx$$

❑ **Valor esperado para o momento:**

Precisamos representar o momento como uma função de x (x, y, z 3 dimensões) e t

O momento p é dado por: $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$

A função de onda de uma partícula livre com momento p é dada por:

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

Derivando em x : $\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} [e^{i(kx - \omega t)}] = ik e^{i(kx - \omega t)} = ik\Psi$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = i\hbar k\Psi \quad \Rightarrow \quad \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = ip\Psi \quad \Rightarrow \quad p\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad \Rightarrow \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Momento funciona como um operador que modifica a função de onda

Valor esperado do momento: $\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} dx$

□ Valor esperado para a energia:

A energia é dada por: $E = \hbar\omega$

A função de onda de uma partícula livre com momento p é dada por:

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

Derivando em t: $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial e^{i(kx - \omega t)}}{\partial t} = -i\omega e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega\Psi$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi \quad \Rightarrow \quad \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar\omega\Psi \quad \Rightarrow \quad \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iE\Psi \quad \Rightarrow \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \quad \Rightarrow \quad \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

A energia também funciona como um operador que modifica a função de onda

Valor esperado para a energia: $\langle E \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} dx$

Uma vez ao final de um colóquio Debye disse:

-"Caro Schrodinger, já que você não está trabalhando em nenhum problema importante porque você não fala para a gente algo sobre a tese de De Broglie sobre partículas ter comportamento ondulatório. Essa tese tem atraído muita atenção."

No próximo colóquio Schrodinger explicou a tese de De Broglie e ainda mostrou como isso poderia ser usado para obter as regras de quantização de Neils Bohr e Sommerfeld.

No entanto, Debye comentou que essas ideias pareciam um pouco infantis. Ele achou que o tratamento dessas coisas deveriam envolver de alguma forma um tratamento ondulatório.

Schrodinger então voltou a pensar sobre o problema e desenvolveu a famosa:

equação de Schrodinger.

F. Bloch, "Reminiscences of Heisenberg and the early days of quantum mechanics", *Physics Today* 29(12), pp. 23-27 (1976).

□ Equação de Schrodinger

Existem várias formas de derivas e equação de Schrodinger

Vamos considerar a partir da ideia de conservação de energia.

Energia total = Energia cinética + Energia potencial:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x, t)$$

$$E\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi + U(x, t)\Psi$$

Usando que:

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

$$p\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$p^2\Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi$$

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

Equação de Schrodinger



Erwin Schrodinger
(1887-1961)



Nobel 1933

□ Estados estacionários

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

