S T Q Q S S D

A Natureza ondulatória das partículas

(III) A Equação de Schrödinger (1926)

- A Eq. de Schrö. não é dedutível: expressa um NOVO CONCEITO da física.

- É uma equação cujas soluções representam as "funções de onda" da partícula

$$\Psi(\vec{r}, t)$$

- Para uma partícula restrita a uma dimensão espacial x, sujeita a forças conservativas derivadas de uma energia potencial $U(x)$

$$F_x \text{ (conservativa)} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x}$$

Exemplo: $U(x) = \frac{1}{2} k x^2$ (oscilador harmônico simples)

$$F_x = -kx$$

spiral

A Equação de Schrödinger para essa partícula é:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = H \Psi(x,t)}$$

1 Dimensão espacial x.

onde o "operador hamiltoniano" é dado por:

$$\boxed{H_{1D} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \ldots}{\partial x^2} + U(x)}$$

ou $H_{3D} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \ldots + U(\vec{r})$

Na Mecânica Quântica $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Note que $E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2}\frac{(mv)^2}{m} = \frac{p^2}{2m}$

Ou seja, o operador hamiltoniano representa o operador energia da partícula.

Para uma partícula com energia bem definida E:

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar} \cdot t}}$$

$\Psi(x,t)$ escrito desta forma caracteriza um ESTADO ESTACIONÁRIO.

De facto,

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) = \psi^*(x) e^{+\frac{iE t}{\hbar}} \cdot \psi(x) e^{-\frac{iE}{\hbar} t}$$

$$= |\psi(x)|^2 \quad \text{independe do tempo!}$$

Substituindo na Eq. de Schrödinger: (1D)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(\psi(x) e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\psi(x) e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\right) +$$

$$+ U(x)\left(\psi(x) e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\right)$$

$$\cancel{i\hbar}\, \psi(x) \left(\cancel{-i}\frac{E}{\cancel{\hbar}}\right) \cancel{e^{-\frac{iE}{\hbar}t}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\right) \cancel{e^{-iE/\hbar\, t}} +$$

$$+ U(x)\left(\psi(x) \cancel{e^{-iE/\hbar\, t}}\right)$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)}$$ = Eq. Schrödinger INDEPENDENTE DO TEMPO

ou, de forma mais compacta: $\boxed{H\psi = E\psi}$

E = energia da partícula em um estado ESTACIONÁRIO

- $\psi(x)$ = solução da Equação $H\psi = E\psi$
- $\Psi(x,t)$ = estado estacionário $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$

Para um estado estacionário:

- $P(x,t)\,dx = |\Psi(x,t)|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx$
  $\boxed{\text{independe do tempo!}}$

- Estado "superposto" de estados estacionários $\Psi(x,t) = \psi_1(x)\, e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(x)\, e^{-iE_2 t/\hbar}$

$\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ são ~~[illegible]~~ soluções da Eq. Schrödinger independente do tempo. São definidas no plano complexo.

Neste caso, $\Psi(x,t)$ não é um estado de energia bem definida.

Pergunta: $\Psi(x,t)$ é um estado estacionário?

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\psi_1^* e^{\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \psi_2^* e^{\frac{iE_2 t}{\hbar}}\right)\left(\psi_1 e^{\frac{-iE_1 t}{\hbar}} + \psi_2 e^{\frac{-iE_2 t}{\hbar}}\right)$$

$$= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2\, e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} + \psi_1 \psi_2^*\, e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar}$$

- Se $E_1 \neq E_2$, $\Psi(x,t)$ não é estacionário: oscila entre os dois estados ψ_1 e ψ_2.

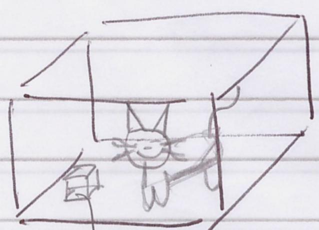
Estados superpostos

(Interpretação Copenhagen)

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

- O sistema encontra-se simultaneamente nos dois estados.
- No entanto, qdo observado (medido), a f. de onda colapsa e o sistema passa a ser descrito por um único estado (Ψ_1 ou Ψ_2)

Exemplo: o gato de Schrödinger:



Com a caixa FECHADA:

$$\Psi_{gato} = \Psi_{vivo} + \Psi_{morto}$$

A "densidade" de probabil. $|\Psi_{gato}|^2$ associada ao "estado do gato" oscila entre "vivo" e "morto"!

Ao abrir a caixa $\Rightarrow$ "colapso" da f. de onda:

$\Rightarrow$ $\Psi \rightarrow \Psi_{vivo}$ ou $\Psi \rightarrow \Psi_{morto}$

Exemplo: Partícula Livre em 1D

Dados: $\begin{cases} E = \text{energia da partícula} \\ m = \text{massa da partícula} \end{cases}$

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

Neste caso, $\boxed{U(x) = 0}$ (partícula livre)

Estados estacionários: $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$

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

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\,\psi(x)$$

$$\boxed{k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}$$

Admite soluções do tipo $\psi_+(x) = A e^{ikx}$

$\psi_-(x) = B e^{-ikx}$

Solução GERAL:

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Com isto: $\begin{cases} \Psi_+(x,t) = A\, e^{i(kx - \frac{E}{\hbar} t)} & \text{(PROGRESSIVA)} \\ \Psi_-(x,t) = B\, e^{-i(kx + \frac{E}{\hbar} t)} & \text{(RETRÓGRADA)} \end{cases}$

$\Psi_+(x,t)$, $\Psi_-(x,t)$: representam ondas planas, soluções da Eq. de Schrö dependente do tempo

Verificação : $\psi_+(x)$ e $\psi_-(x)$ são soluções da Eq. de Schrö. independente do tempo:

$$\frac{d\psi_+}{dx} = A e^{ikx}(ik)$$

$$\frac{d^2\psi_+}{dx^2} = A e^{ikx}(ik)^2 = -k^2 A e^{ikx} = -k^2 \psi_+(x) \checkmark$$

... idem para $\psi_-(x)$

Conexão: ~~xxxxxx~~ características corpusculares
características ondulatórias ?

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

$$E = E_c = \frac{p^2}{2m} \quad \text{(partícula livre)}$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \boxed{k = p/\hbar}$$

Com isso: $\Psi_+(x,t) = A e^{i\left[\underbrace{\frac{p}{\hbar}} \cdot x - \underbrace{\frac{E}{\hbar}} \cdot t\right]}$

... analogamente para $\Psi_-(x,t)$

Note: $\underbrace{p}$ e $\underbrace{E}$ são características da partícula

Podemos escrever $\Psi_+(x,t)$ na forma: $A e^{i[\underbrace{k}x - \underbrace{w}t]}$

$\underbrace{k}$ e $\underbrace{w}$ são características da onda

(1) $$k = \frac{p}{\hbar} \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\lambda = \hbar \cdot 2\pi / p = \frac{h}{p} = \lambda_{\text{de Broglie}} \quad !$$

(2) $$\underbrace{w} = \frac{E}{\hbar}$$

$$2\pi f = \frac{E}{\hbar} \Rightarrow f = \frac{E}{2\pi\hbar} = \frac{E}{h} = f_{\text{de Broglie}} \quad !$$

As soluções $\Psi_+(x,t)$ e $\Psi_-(x,t)$ são COMPATÍVEIS com a ~~toda~~ teoria de de Broglie

Ou seja, as soluções (partícula livre)

$$\Psi_{\pm}(x,t) = A\, e^{i[kx \mp \omega t]} \qquad \text{(onda viajante)}$$

[= amplitude de probabilidade de encontrar a partícula no ponto x, instante t.]

São tais que

$$\begin{cases} k = 2\pi/\lambda_{\text{de Broglie}} = 2\pi/(h/p) \\ \omega = 2\pi\, f_{\text{de Broglie}} = 2\pi \cdot (E/h) \end{cases}$$

Mas note:

$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2$ igual para qualquer ponto x

Ou seja: a densidade de probabilidade de encontrar a partícula em um ponto qualquer do espaço (em 1D) independe do ponto.

Isto significa que a função $\Psi(x,t)$ não pode ser normalizada:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2\, dx = ?$$

... não definida ...

Este resultado é coerente com o princípio da incerteza de Heisenberg.

De fato:

Esta partícula possui p_x bem definido. Se escolhermos a condição inicial para a qual a partícula parte de $x = -\infty$ em direção aos valores positivos de x:

$$\Psi(x,t) = \Psi_+(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

$k = 2\pi/(h/p)$, de forma que esta partícula

possui $p = p_x$ bem definido. $E = \frac{p^2}{2m}$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta p_x = 0}$$

Então, para que seja satisfeita

$$(\Delta x) \cdot (\Delta p_x) \geq \hbar/2$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x \to \infty}$$

A incerteza na medida da posição é máxima!

A partícula não pode ser localizada no espaço.