4300375 - Física moderna I

Aula 6 – A equação de Schrödinger

Uma mecânica ondulatória

Nesta aula...

- A equação de Schrödinger
  - A função de onda na antiga mecânica quântica
  - Argumentos plausíveis para a equação de Schrödinger
  - A interpretação de Bohr para a função de onda
    - A função de onda na nova mecânica quântica

Sobre a antiga teoria quântica

- A **física clássica** no início do século XX **falha** ao tentar explicar vários fenômenos
- Max Planck explica o espectro de emissão de **radiação de corpo negro** apenas após adotar a **quantização da energia**
- Einstein e Compton apresentam demonstrações do caráter **corpuscular da luz** para o efeito fotoelétrico e espalhamento
- de Broglie postula que as **partículas** também tem **caráter ondulatório**
- Rutherford demonstrou o **átomo nucleado**
- Niels Bohr apresenta um **modelo quantizado do átomo** de hidrogênio **(sucesso na explicação da emissão atômica)**
- **O caráter dual onda-partícula é interpretado por meio do princípio da complementaridade de Bohr**

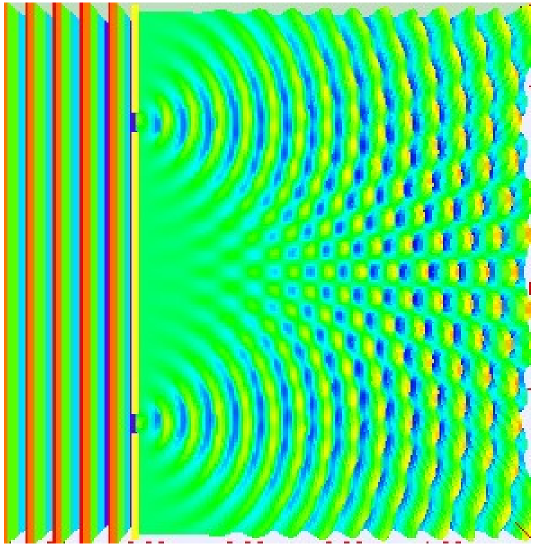
Sobre a antiga teoria quântica

- Algumas **críticas** à antiga teoria quântica:
  - A teoria só nos diz como tratar **sistemas que sejam periódicos** usando as **regras de quantização de Wilson-Sommerfeld**, mas há muitos sistemas físicos interessantes que não são periódicos
  - Embora a teoria nos diga como calcular a energia dos estados possíveis e a frequência do fóton emitido nas transições, **ela não dos diz como calcular a probabilidade de determinada transição ocorrer**
  - Quando aplicado à **átomos mais pesados** (mais elétrons) a **teoria não é bem sucedida**

Ondas de matéria

Mas afinal, o que está oscilando?

- Padrões de **difração não dependem do fluxo de partículas**!
- **Não é um resultado de interferências mútuas!**

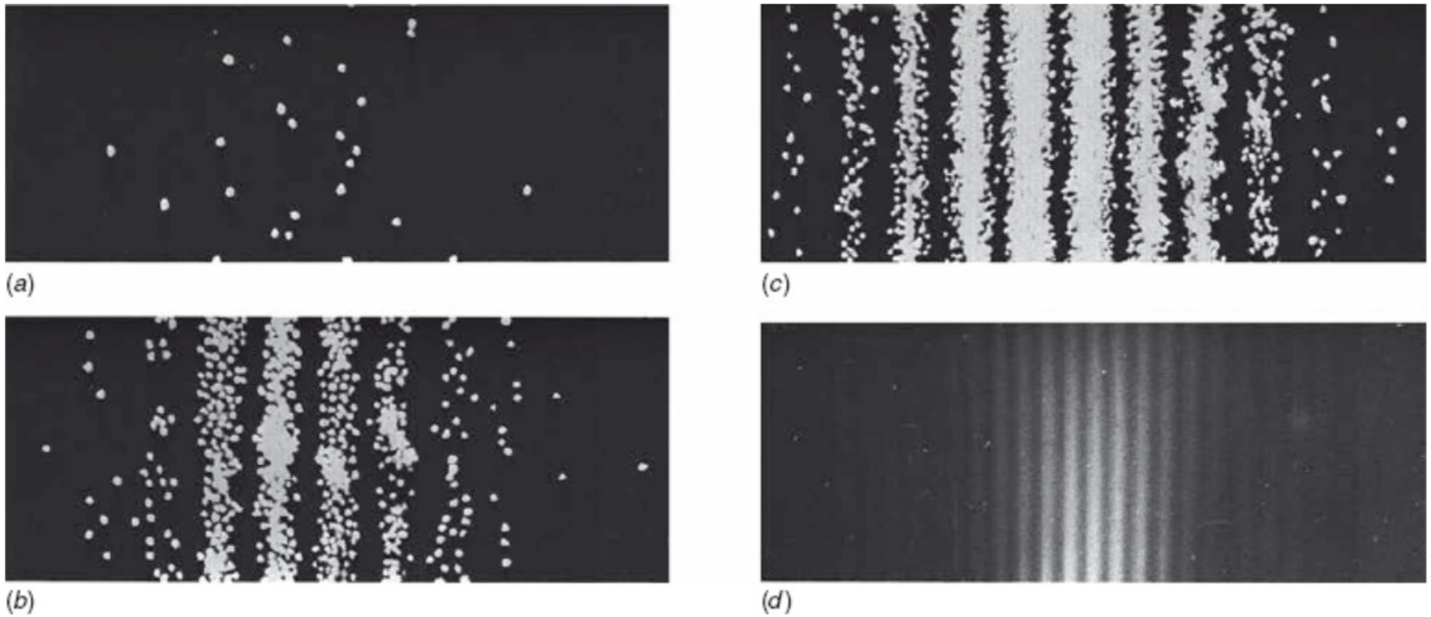


alanzucconi.com

Ondas de matéria

Mas afinal, o que está oscilando?

- Padrões de **difração não dependem do fluxo de partículas**!
- **Não é um resultado de interferências mútuas!**



Tipler

A interpretação de Copenhague

A mecânica quântica e a probabilidade

- **As previsões probabilísticas feitas pela mecânica não são um mero reflexo da falta de conhecimento de hipotéticas variáveis escondidas.**
  - No lançamento de dados, usamos probabilidades para prever o resultado porque não possuímos informação suficiente apesar de acreditarmos que o processo é determinístico. *A interpretação de Copenhague defende que em Mecânica Quântica, os resultados são indeterminísticos.*
- **A Física é a ciência dos resultados de processos de medida. Não faz sentido especular para além daquilo que pode ser medido.**
  - *A interpretação de Copenhague considera sem sentido perguntas como "onde estava a partícula antes de a sua posição ter sido medida?".*
- **O ato de observar provoca o colapso das possibilidades.**
  - *O que significa que, embora antes da medição o estado do sistema permitisse muitas possibilidades, apenas uma delas foi escolhida aleatoriamente pelo processo de medição.*

Ondas de matéria

Mas afinal, o que está oscilando?

- Na **interpretação moderna** da mecânica quântica, o que oscila é a **função de onda** Ψ
- A função de onda se relaciona com a **probabilidade de medida**
(*interpretação de Bohr para a função de onda*)

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

- Através de **experimentos**, sabemos detalhes **qualitativos** da função de onda
- Nesta aula, veremos uma **definição mais formal da função de onda** e como ela se propaga em um determinado potencial

Ondas de matéria

Mas afinal, o que está oscilando?

- Na **interpretação moderna** da mecânica quântica, o que oscila é a **função de onda** ψ, que se relaciona com a **probabilidade** de medir a partícula $|\psi|^2$
- A função de onda pode ser expressa de diversas formas:

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

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

- E se relaciona com a probabilidade de medida da seguinte forma:

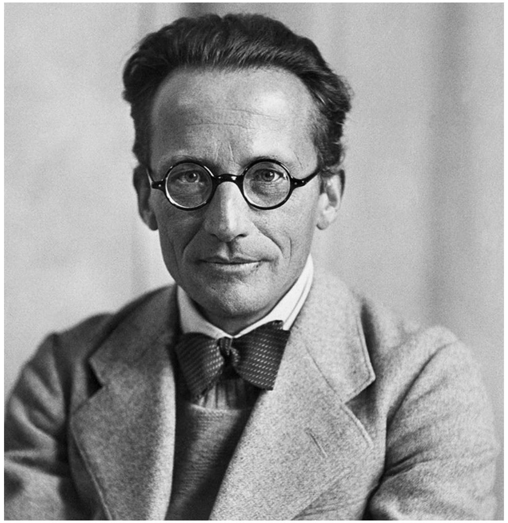
$$P(x)dx=|\Psi|^2dx=\Psi\cdot\Psi^* dx$$

Erwin Schrödinger

- **Erwin Schrödinger** pode ser considerado o pai da **mecânica quântica moderna**

- Através da famosa **Equação de Schrödinger** é possível se definir toda a mecânica baseada na **propagação das funções de onda**!

- É a equação de Schrödinger que permite um **estudo mais abrangente** e ao mesmo tempo **detalhado** do **mundo subatômico**!



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

Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger

- A equação de Schrödinger é uma **equação fundamental**
- Como toda equação fundamental, **não existe uma demonstração matemática** para ela
- As equações fundamentais são **baseadas em observações experimentais e argumentações lógicas** (e até filosóficos)
- O **modelo** por trás de uma equação fundamental **permanece vigente** até que este seja **refutado** através de **experimentos ou observações**
  - O mesmo vale para a mecânica quântica de Schrödinger

A equação de Schrödinger

- Vamos agora analisar argumentos que **justificam** a equação de Schrödinger

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

Equação de Schrödinger

- Pela equação de Schrödinger será possível se estudar diversas **propriedades das funções de onda**

- Passaremos as próximas aulas do curso estudando soluções da equação de Schrödinger e suas implicações em diversos fenômenos e na constituição da matéria

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- **Hipótese 1** → Ela dever ser consistente com o postulados de de Broglie-Einstein

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad \nu = \frac{E}{h}}$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- **Hipótese 1** → Ela dever ser consistente com o postulados de de Broglie-Einstein

$$\boxed{\lambda=\frac{h}{p} \quad \text{e} \quad \nu=\frac{E}{h}}$$

- **Hipótese 2** → Ela deve ser consistente com a equação da energia total

$$\boxed{E=\frac{p^2}{2m}+V}$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- **Hipótese 1** → Ela dever ser consistente com o postulados de de Broglie-Einstein

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad \nu = \frac{E}{h}}$$

- **Hipótese 2** → Ela deve ser consistente com a equação da energia total

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m} + V}$$

- **Hipótese 3** → Ela deve ser linear em $\Psi(x,t)$, ou seja, $\Psi_1(x,t)$ e $\Psi_2(x,t)$ são soluções, então $c_1.\Psi_1(x,t)+c_2.\Psi_2(x,t)$ também é.

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- **Hipótese 1** → Ela dever ser consistente com o postulados de de Broglie-Einstein

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad \nu = \frac{E}{h}}$$

- **Hipótese 2** → Ela deve ser consistente com a equação da energia total

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m} + V}$$

- **Hipótese 3** → Ela deve ser linear em $\Psi(x,t)$, ou seja, $\Psi_1(x,t)$ e $\Psi_2(x,t)$ são soluções, então $c_1.\Psi_1(x,t)+c_2.\Psi_2(x,t)$ também é.
- **Hipótese 4** → para $V(x,t) = V_0$ (constante) a solução deve ser uma função oscilatória com **frequência e comprimento de onda bem definidos**.

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- **Objetivo**: montar uma eq. diferencial baseado nas hipóteses
- Primeiro, vamos nos inspirar nas hipóteses #1 e #2:

Hipótese 1

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{e} \quad \nu = \frac{E}{h}$$

Hipótese 2

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$h\nu = \frac{h^2}{2m\lambda^2} + V$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{e} \quad \omega = 2\pi\nu$$

Número de onda

Frequência angular

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

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- **Objetivo**: montar uma eq. diferencial baseado nas hipóteses
- Primeiro, vamos nos inspirar nas hipóteses #1 e #2:

$$\boxed{\Psi(x,t)=A\cos(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=-k[A\,\mathrm{sen}(kx-\omega t)] \qquad \frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\omega[A\,\mathrm{sen}(kx-\omega t)]$$

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2[A\cos(kx-\omega t)] \qquad \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial t^2}=-\omega^2[A\cos(kx-\omega t)]$$

Note que existe uma relação entre as derivadas parciais e os termos k e ω:

$$\frac{\partial}{\partial x}\rightarrow -k \qquad \frac{\partial}{\partial t}\rightarrow \omega$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rightarrow -k^2 \qquad \frac{\partial^2}{\partial t^2}\rightarrow -\omega^2$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Por comparação, poderíamos supor uma equação diferencial da forma:

$$\boxed{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\,\omega} \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow -k^2 \qquad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \omega$$

$$\boxed{\alpha.\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta.\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$$

- Onde α e β são constantes a se determinar para garantir as propriedades da função de onda!

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Por comparação, poderíamos supor uma equação diferencial da forma:

$$\boxed{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\,\omega} \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow -k^2 \qquad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \omega$$

$$\boxed{\alpha . \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta . \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$$

- Onde α e β são constantes a se determinar para garantir as propriedades da função de onda!
- Mas, pela hipótese 3, temos:

Hipótese 3

$$\Psi(x,t) = c_1 . \Psi_1(x,t) + c_2 . \Psi_2(x,t)$$

Ψ é solução se Ψ_1 e Ψ_2 também forem.

Porém, note que: $$\alpha . \frac{\partial^2 [c_1 . \Psi_1(x,t)]}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta . \frac{\partial [c_1 . \Psi_1(x,t)]}{\partial t}$$

Resulta em uma equação diferencial diferente para Ψ_1: $$\alpha . \frac{\partial^2 \Psi_1(x,t)}{\partial x^2} + \frac{V(x,t)}{c_1} = \beta . \frac{\partial \Psi_1(x,t)}{\partial t}$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Por comparação, poderíamos supor uma equação diferencial da forma:

$$\boxed{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\,\omega} \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \to -k^2 \qquad \frac{\partial}{\partial t} \to \omega$$

$$\boxed{\alpha.\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta.\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$$

- Onde α e β são constantes a se determinar para garantir as propriedades da função de onda!
- Mas, pela hipótese 3, temos:

Hipótese 3

$$\Psi(x,t) = c_1.\Psi_1(x,t) + c_2.\Psi_2(x,t)$$

Ψ é solução se Ψ_1 e Ψ_2 também forem.

Porém, note que: $$\alpha.\frac{\partial^2[c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta.\frac{\partial[c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial t}$$

Resulta em uma equação diferencial diferente para Ψ_1: $$\alpha.\frac{\partial^2 \Psi_1(x,t)}{\partial x^2} + \frac{V(x,t)}{c_1} = \beta.\frac{\partial \Psi_1(x,t)}{\partial t}$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Por comparação, poderíamos supor uma equação diferencial da forma:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\,\omega \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow -k^2 \qquad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \omega$$

$$\alpha.\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta.\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

- Onde α e β são consta s propriedades da função de onda!
- Mas, pela hipótese 3, t)

Ψ é solução se Ψ_1 e Ψ_2 também forem.

Temos que rejeitar esse formato pois ele não oferece linearidade!

Porém, note que: $\alpha.\frac{\partial^2 [c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta.\frac{\partial [c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial t}$

Resulta em uma equação diferencial diferente para Ψ_1: $\alpha.\frac{\partial^2 \Psi_1(x,t)}{\partial x^2} + \frac{V(x,t)}{c_1} = \beta.\frac{\partial \Psi_1(x,t)}{\partial t}$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Por comparação, poderíamos supor uma equação diferencial da forma:

$$\boxed{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}+V=\hbar\,\omega} \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rightarrow -k^2 \qquad \frac{\partial}{\partial t}\rightarrow \omega$$

$$\boxed{\alpha.\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t).\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}}$$

- Onde α e β são constantes a se determinar para garantir as propriedades da função de onda!
- Mas, pela hipótese 3, temos:

Hipótese 3

$$\Psi(x,t)=c_1.\Psi_1(x,t)+c_2.\Psi_2(x,t)$$

Ψ é solução se Ψ_1 e Ψ_2 também forem.

Porém, note que: $$\alpha.\frac{\partial^2[c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial x^2}+V(x,t)c_1.\Psi_1(x,t)=\beta.\frac{\partial[c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial t}$$

Resulta em uma equação idêntica para Ψ_1: $$\boxed{\alpha.\frac{\partial^2[\Psi_1(x,t)]}{\partial x^2}+V(x,t).[\Psi_1(x,t)]=\beta.\frac{\partial[\Psi_1(x,t)]}{\partial t}}$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Por comparação, poderíamos supor uma equação diferencial da forma:

$$\boxed{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\,\omega} \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow -k^2 \qquad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \omega$$

$$\boxed{\alpha.\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t).\Psi(x,t) = \beta.\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$$

- Onde α e β são constantes a se determinar para garantir as propriedades da função de onda!
- Mas, pela hipótese 3, temos:

Hipótese 3

$$\Psi(x,t) = c_1.\Psi_1(x,t) + c_2.\Psi_2(x,t)$$

Ψ é solução se Ψ_1 e Ψ_2 também forem.

Porém, note que: $$\alpha.\frac{\partial^2 [c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta.\frac{\partial [c_1.\Psi_1(x,t)]}{\partial t}$$

Resulta em uma equação idêntica para Ψ_1: $$\boxed{\alpha.\frac{\partial^2 [\Psi_1(x,t)]}{\partial x^2} + V(x,t).[\Psi_1(x,t)] = \beta.\frac{\partial [\Psi_1(x,t)]}{\partial t}}$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Por comparação, poderíamos supor uma equação diferencial da forma:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\,\omega \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow -k^2 \qquad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \omega$$

$$\alpha . \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t).\Psi(x,t) = \beta . \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

- Onde α e β são consta[...]s propriedades da função de onda!
- Mas, pela hipótese 3, t[...]

Este formato é o ideal por garantir a linearidade!

Ψ é solução se Ψ_1 e Ψ_2 também forem.

Porém, note que: $\alpha . \frac{\partial^2 [c_1 . \Psi_1(x,t)]}{\partial x^2} + V(x,t) = \beta . \frac{\partial [c_1 . \Psi_1(x,t)]}{\partial t}$

Resulta em uma equação idêntica para Ψ_1: $\alpha . \frac{\partial^2 [\Psi_1(x,t)]}{\partial x^2} + V(x,t).[\Psi_1(x,t)] = \beta . \frac{\partial [\Psi_1(x,t)]}{\partial t}$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \end{cases}$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

Partícula livre $V(x,t) = V_0$

$$\alpha.\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

Do slide anterior!

$$\alpha.\left[-k^2.\cos(kx-\omega t)\right]+V_0\left[\cos(kx-\omega t)\right]=\beta.\left[\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t)\right]$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \end{cases}$$

Partícula livre $V(x,t) = V_0$

$$\alpha.\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Do slide anterior!

$$\alpha.\left[-k^2.\cos(kx-\omega t)\right]+V_0\left[\cos(kx-\omega t)\right]=\beta.\left[\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t)\right]$$

$$\left[-\alpha k^2+V_0\right].\cos(kx-\omega t)-\left[\beta\omega\right].\mathrm{sen}(kx-\omega t)=0$$

Para que essa expressão seja válida independentemente de x e t, os coeficientes dever ser nulos!

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \end{cases}$$

Partícula livre $V(x,t)=V_0$

$$\alpha.\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Do slide anterior!

$$\begin{cases} -\alpha k^2+V_0=0 \\ -\beta\omega=0 \end{cases}$$

$$\alpha=\frac{V_0}{k^2} \qquad \beta=0$$

Finalmente:

$$\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}+\Psi(x,t)=0$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \end{cases}$$

Partícula livre $V(x,t) = V_0$

$$\alpha.\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Do slide anterior!

$$\begin{cases} -\alpha k^2+V_0=0 \\ -\beta\omega=0 \end{cases}$$

$$\alpha=\frac{V_0}{k^2} \qquad \beta=0$$

Finalmente:

$$\frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}+\Psi(x,t)=0$$

Essa equação não atende aos requisitos, pois, para a partícula livre, ela não fixa a frequência (ω).

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\boxed{\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)+\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t)}$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\mathrm{sen}(kx-\omega t)+k.\gamma.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t)-k^2.\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t)-\omega.\gamma.\cos(kx-\omega t) \end{cases}$$

Partícula livre $V(x,t) = V_0$

$$\boxed{\alpha.\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}}$$

$$\alpha.\left[-k^2.\cos(kx-\omega t)-k^2.\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t)\right]+V_0\left[\cos(kx-\omega t)+\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t)\right]=$$
$$=\beta.\left[\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t)-\omega.\gamma.\cos(kx-\omega t)\right]$$

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)+\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\mathrm{sen}(kx-\omega t)+k.\gamma.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t)-k^2.\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t)-\omega.\gamma.\cos(kx-\omega t) \end{cases}$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

Partícula livre $V(x,t) = V_0$

$$\alpha.\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\alpha.\left[-k^2.\cos(kx-\omega t)-k^2.\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t)\right]+V_0\left[\cos(kx-\omega t)+\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t)\right]=$$
$$=\beta.\left[\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t)-\omega.\gamma.\cos(kx-\omega t)\right]$$

$$\left[-\alpha k^2+V_0+\beta\omega\gamma\right].\cos(kx-\omega t)+\left[-\alpha k^2\gamma+V_0\gamma-\beta\omega\right].\mathrm{sen}(kx-\omega t)=0$$

Para que essa expressão seja válida independentemente de x e t, os coeficientes dever ser nulos!

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)+\gamma.\text{sen}(kx-\omega t)$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\text{sen}(kx-\omega t)+k.\gamma.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t)-k^2.\gamma.\text{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\text{sen}(kx-\omega t)-\omega.\gamma.\cos(kx-\omega t) \end{cases}$$

Partícula livre $V(x,t)=V_0$

$$\alpha.\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

$$\begin{cases} -\alpha k^2+V_0+\beta\omega\gamma=0 \\ -\alpha k^2\gamma+V_0\gamma-\beta\omega=0 \end{cases} \qquad \begin{cases} -\alpha k^2+V_0=-\beta\omega\gamma \\ -\alpha k^2+V_0=\dfrac{\beta\omega}{\gamma} \end{cases} \Rightarrow -\beta\omega\gamma=\frac{\beta\omega}{\gamma} \Rightarrow \boxed{\begin{matrix}\gamma^2=-1 \\ \gamma=\pm i\end{matrix}}$$

A função $\Psi(x,t)$ deve ser complexa!

A equação de Schrödinger

Argumentos plausíveis para se chegar à equação de Schrödinger

- Vamos achar α e β usando a solução para a partícula livre:

$$\Psi(x,t)=\cos(kx-\omega t)+\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}=-k.\mathrm{sen}(kx-\omega t)+k.\gamma.\cos(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=-k^2.\cos(kx-\omega t)-k^2.\gamma.\mathrm{sen}(kx-\omega t) \\ \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\omega.\mathrm{sen}(kx-\omega t)-\omega.\gamma.\cos(kx-\omega t) \end{cases}$$

Hipótese 4
A solução para a partícula livre tem k e ω definidos!

Partícula livre $V(x,t) = V_0$

$$\alpha.\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=\beta.\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

$$-\alpha k^2+V_0+\beta\omega\gamma=0$$

$$-\alpha k^2+V_0=\mp\beta\omega i$$

$$\boxed{\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V_0=\hbar\omega}$$

$$\alpha=-\frac{\hbar^2}{2m}$$

$$\beta=\mp i\hbar$$

Pegaremos o sinal positivo!

Finalmente:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V_0\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}}$$

A equação de Schrödinger

Sobre as propriedades das funções de onda...

- A primeira propriedade da função de onda:

$$\Psi(x,t)=A\,e^{i(kx-\omega t)}=A\left[\cos(kx-\omega t)+i\,\mathrm{sen}(kx-\omega t)\right]$$

- A função de onda deve ser representada por uma função complexa! (que envolva números complexos)

- Mais sobre propriedades das funções de onda na próxima aula!

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Existe um detalhe importante na equação de Schrödinger:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}}$$ *Equação de Schrödinger*

- Se o potencial não depender do tempo, podemos assumir a função de onda: $\Psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$

- Substituindo na Eq. de Schrödinger:

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

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Existe um detalhe importante na equação de Schrödinger:

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

Equação de Schrödinger

- Se o potencial não depender do tempo, podemos assumir a função de onda: $\Psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$

- Substituindo na Eq. de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)[\psi(x).\phi(t)]=i\hbar\,\psi(x)\frac{d[\phi(t)]}{dt}$$

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Existe um detalhe importante na equação de Schrödinger:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}}$$ *Equação de Schrödinger*

- Se o potencial não depender do tempo, podemos assumir a função de onda: $\Psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$

- Substituindo na Eq. de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)[\psi(x).\phi(t)]=i\hbar\,\psi(x)\frac{d[\phi(t)]}{dt} \qquad \div\psi(x).\phi(t)$$

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Existe um detalhe importante na equação de Schrödinger:

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

Equação de Schrödinger

- Se o potencial não depender do tempo, podemos assumir a função de onda: $\Psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$

- Substituindo na Eq. de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)=i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d[.\phi(t)]}{dt}$$

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Existe um detalhe importante na equação de Schrödinger:

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

Equação de Schrödinger

- Se o potencial não depender do tempo, podemos assumir a função de onda: $\Psi(x,t)=\psi(x).\phi(t)$

- Substituindo na Eq. de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)=i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d[.\phi(t)]}{dt}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)=C \\ i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d[\phi(t)]}{dt}=C \end{cases}$$

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Note que a parte temporal não depende do potencial!
Podemos então, resolver a parte temporal como um caso geral:

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d[\phi(t)]}{dt} = C \quad \Rightarrow \quad \frac{d[\phi(t)]}{\phi(t)} = -\frac{i}{\hbar} C\, dt$$

- Que tem solução geral: $\phi(t) = e^{-itC/\hbar}$

- Abrindo a exponencial complexa:

$$\phi(t) = e^{-itC/\hbar} = \cos\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) - i\,\mathrm{sen}\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) =$$
$$= \cos\left(2\pi\frac{Ct}{h}\right) - i\,\mathrm{sen}\left(2\pi\frac{Ct}{h}\right)$$

$$\nu = \frac{C}{h} \Rightarrow C = h\nu$$

Logo, quem é C?

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Note que a parte temporal não depende do potencial!
  Podemos então, resolver a parte temporal como um caso geral:

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d[\phi(t)]}{dt} = C \quad \Rightarrow \quad \frac{d[\phi(t)]}{\phi(t)} = -\frac{i}{\hbar} C\, dt$$

- Que tem solução geral: $\phi(t) = e^{-itC/\hbar}$

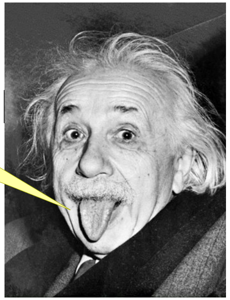
- Abrindo a exponencial complexa:

$$\phi(t) = e^{-itC/\hbar} = \cos\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) - i\,\mathrm{sen}\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) =$$

$$= \cos\left(2\pi \frac{Ct}{h}\right) - i\,\mathrm{sen}\left(2\pi \frac{Ct}{h}\right)$$

$$\nu = \frac{C}{h} \Rightarrow C = h\nu$$

$E = h\nu$



$$\boxed{C = \text{Energia}}$$

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Logo, a parte temporal tem solução independente do sistema físico
- Já a parte espacial:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)=C \\ i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d[\phi(t)]}{dt}=C \end{cases} \Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger
independente do tempo

A equação de Schrödinger

Um detalhe fantástico!

- Logo, a parte temporal tem solução independente do sistema físico
- Já a parte espacial:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+V(x)=C \\ i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d[\phi(t)]}{dt}=C \end{cases} \Rightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

- Encontramos uma versão da equação de Schrödinger que é independente do tempo
- Um grande número de sistemas podem ser estudados com a versão independente do tempo
- Neste curso, veremos somente problemas independentes do tempo

Resumo...

- A equação de Schrödinger é uma equação fundamental
- Ela define o comportamento da função de onda dado um potencial de interação
- A equação de Schrödinger é linear
  → admite interferência
- Com um potencial estático, podemos separar a função de onda em uma componente temporal e outra espacial
- A parte temporal tem solução independente do sistema
- Com a parte espacial, temos uma versão da equação de Schrödinger que é independente do tempo
- A equação diferencial define as propriedades da função de onda!

Próxima aula...

- A quantização da energia na teoria de Schrödinger
  - Análise das propriedades das funções de onda
  - Operadores e valores esperados
  - Análise qualitativa da equação de Schrödinger
  - A formação de estados quantizados