Resumo das últimas aulas

1) • Experimentos <u>NÃO</u> podem ser explicados p/ física clássica

→ Nestes experimentos partículas clássicas como o elétron (Compton, fotoelétrico) se comportam com ondas clássicas ou <u>vice-versa</u>

2) • Formulação Moderna da Mec. Clássica:
~~Hamilton~~ Lagrange eq.
Hamilton eq.
Hamilton-Jacobi
(NEWton)
→ SÃO TODAS Equivalentes

(*)

~~3)~~ 4 • Parenteses de Poisson → Comutadores de Heisenberg

~~4)~~ 5 • Formalismo de Hamilton-Jacobi → Eq. Schrödinger

($\lambda \to 0$) Aprox. pequenos λ...

~~5)~~ 3 • Óptica ondulatória ⟷ Óptica Geométrica

→ Óptica ondulatória se reduz à Opt. Geométrica qdo Δn (índice refração) ocorrer p/ distancias muito maiores que λ.

Prelúdio
Aula 3 ⇒ Formulação Física & Matemática

26/3/20

Formulação Física do Problema

⇒ O que estamos tentando fazer aqui ??...

→ Discussão anterior mostrou que o ponto chave a ser incluído na Mec. clássica p/ explicar observações experimentais é INCLUIR PATICULA-ONDA dualidade

↳ Isso já ocorre parcialmente na formulação H-J.

↳ Se tomarmos a descrição de uma partícula clássica na formulação de Hamilton-Jacobi e perguntar:

"Qual Eq. de Onda Levaria à eq. de HJ no limite de pequeno comprimento de onda?"

⇒ A RESPOSTA SERIA a Eq. de Schroedinger

→ Problema sugerido:

Pesquise a respeito dos argumentos que Schrödinger usou p/ derivar a eq. de onda. Verifique que para isso ele motivou-se p/ descrição de HJ.

↳ Ele imaginou um processo ondulatório descrito p/ uma função de onda ψ com fase S!

Processo ondulatório verdadeiro

* Aulas 4 e 5 +6 Nivaldo Lemos no YouTube

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S} = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}(-Et + W(x,y,z))}}_{-i\omega t} \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$\hookrightarrow = e^{-i\omega t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}W}$$

$$\hookrightarrow E = \omega\hbar$$

(Relação Planck)

Qual eq. deve governar (Eq. de onda) a dinâmica dessa partícula descrita p/ função de onda ψ ??

Partindo de $\psi = e^{+\frac{i}{\hbar}(Et + W(x,y,z))}$

S : fase

Aplicando-se a eq. de onda clássica

$$\nabla^2\psi - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0 \quad \text{(eq. onda clássica)}$$

(v^2)

p/ satisfazer a veloc. de fase

$$v = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}$$

(Porque??)

$E = \frac{p^2}{2m} + V$ ← Partícula num potencial V

De Broglie $p = \frac{h}{\lambda}$; $E = \frac{p^2}{2m}$

$(E-V) = \frac{p^2}{2m}$ → $\boxed{p^2 = 2m.(E-V)}$ → $p^2 = \frac{h^2}{\lambda^2} \Rightarrow \lambda^2 = \frac{h^2}{2m(E-V)}$

$E = \nu h$

$\lambda . \nu = v$

$$\frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}} \cdot \frac{E}{h} = v \rightarrow v = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}$$

$$\boxed{\nabla^2\psi - \frac{2m(E-V)}{E^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}}$$

Além disso

- $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \left(-\frac{E^2}{\hbar^2}\right) \cdot \psi$ (Apenas multiplica por $\left(-E^2/\hbar^2\right)$)
- $\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi \Rightarrow E\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}$

Assim:

$$\nabla^2\psi - \frac{2m(E-V)}{\cancel{E^2}}\cdot\left(-\frac{\cancel{E^2}}{\hbar^2}\right) = 0$$

Multiplic por $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right) \Rightarrow$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi}_{\text{Eq. Sch. Independ. do tempo}} = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

tilibra

⇒ Ou seja, seguindo os argumentos de Schödinger em 1926. obtém-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \rightarrow E\psi$$

Eq. de Schödinger

que descreve os resultados da física atômica (ao aplicar p/ o átomo H - reproduz o espectro observado.)

ANALOGIA DE Schödinger:

$$\begin{array}{ccc} \text{Mec. clássica} & \longleftrightarrow & \text{Óptica Geométrica} \\ \uparrow (\lambda\to 0) & & \uparrow (\lambda\to 0) \\ \text{Mecanica Ondulatória (Mec. Quântica)} & \longleftrightarrow & \text{Óptica Ondulatória} \end{array}$$

($\lambda \to 0$)
(λ pequeno)

(PARTÍCULAS)

$$\begin{array}{ccc} \text{Óptica Geométrica} & \longleftrightarrow & \text{Mecânica Clássica} \\ (\lambda\to 0)\uparrow\ \updownarrow & & (\lambda\to 0)\uparrow\ \updownarrow \\ \text{Óptica ondulatória} & \longleftrightarrow & \text{Mec. ondulatória} \end{array}$$

(ONDAS)

EM PALAVRAS:

"A Mec. clássica pode ser pensada como o limite de $\lambda \to 0$ da Mec. Ondulatória, de forma ANÁLOGA a como a Opt. Geom. é o limite da Ópt. Ondulatória"

Resumo: Clássico → Quântico

Hamilton-Jacobi

↓

Aprox. de ($\lambda \to 0$) do mundo físico

↓

Mundo físico completo

⇓

Mec. ondulatória: (Eq. de Schrödinger)

Eq. Hamilton + Parênteses Poisson

↓

Observáveis físicos (operadores) não comutam

⇓

Subst. P. Poisson p/ comutadores

⇓

Mec. ondulatória: Eq. de Heisenberg *(MATRICIAL)

||

Note que... Se adotarmos como postulado que a Eq. de Schrödinger está correta e que a func. de onda de uma partícula clássica é dada por $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}$ e Aplic. na Eq. Sch.

↳ Subst. em $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}$ ⇒ Qual S satisfaz

↓

resulta em:

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S = 0$$

↑ constante

Limite ($\hbar \to 0$): Eq.

Aula 3 "the BIG Picture" 26/3/20

⇒ What are we trying to do??

Mec. Classica → Partículas • Resolução problemas (Eq. diferenciais) de partículas (1 ou mais) sob a influência de forças (potenciais)

• Soluções descrevem trajetórias

• Normalmente questões de restrições de momento e energia ñ costuma fazer parte do mundo das partículas

ONDAS ↓ Questões de sobre soluções permitidas ou proibidas são relevantes p/ ondas

Ex. apenas certos modos do campo E&M numa cavidade

Objetivo ⇒ Descrever as formulações (definição formal) e a matemática necessária p/ resolver problemas na Mec. Quântica

Here we go...

Formulação Matemática da MQ: (Parte 1)

Eq. de Scrödinger

$\hbar = 1{,}054572 \times 10^{-34}$ J.s

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (1D)$$

CASO 1D

$$\Downarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (3D)$$

ψ: representa a função de onda da partícula-onda de de Broglie, cuja dinâmica é dada p. Eq. Sch.

Note ainda que: $\quad$ qdo: $\psi = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et + W(x,y,z))}$

→ função do tempo

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

$$\underbrace{\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right]}_{\hat{H}\text{: op. Hamitonian}} \psi = E\psi$$

$$-\hbar\left(\frac{p^2}{2m}\right) \leftarrow \text{Energia cinética}$$

Eq. Schrödinge INDEPENDENTE DO TEMPO (ESIT)

Além disso, note também as seguintes ANALOGIAS (equivalências)

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \partial_y^2 f + \partial_z^2 f$$

Abreviação (notacão compacta)

Podemos fazer:

$$p_x \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\ ) = -i\hbar\partial_x \Rightarrow p_x^2 = -\hbar^2\partial_x^2$$

$$p_y \rightarrow -i\hbar\partial_y(\ )$$

$$p_z \rightarrow -i\hbar\partial_z(\ )$$

$$\Downarrow$$

$$p^2 = -\hbar^2\nabla^2(\ )$$

$$E \rightarrow i\hbar\partial_t(\ )$$

operadores = Observáveis físicos

Exemplo 1: calcule o λ associado (a) fóton (b) elétron (c) neutron com energia de $\underline{1\,eV}$.

(a) $\lambda_f = \dfrac{hc}{E} \cong \dfrac{6.6\times10^{-34}\cdot 3.10^{8}}{1,6\times10^{-19}} = 1,24 \cdot 10^{-6}\,m = 1,24\,\mu m$

(b) $\lambda_e = \dfrac{h}{\sqrt{2m_eE}} = \dfrac{6.6\times10^{-34}}{\left[2\cdot(0,9\times10^{-30}\,kg)\,(1,6\times10^{-19})\right]^{1/2}} = 12,3\,\mathring{A}$

$\lambda_e \cong 12\,\mathring{A}$ $\quad (10^{-10}\,m)$

(c) $\lambda_n = \lambda_e\left(\dfrac{m_e}{m_n}\right)^{1/2} = \lambda_e\cdot\left(\dfrac{1}{1824}\right)^{1/2} = 0,28\,\mathring{A}$

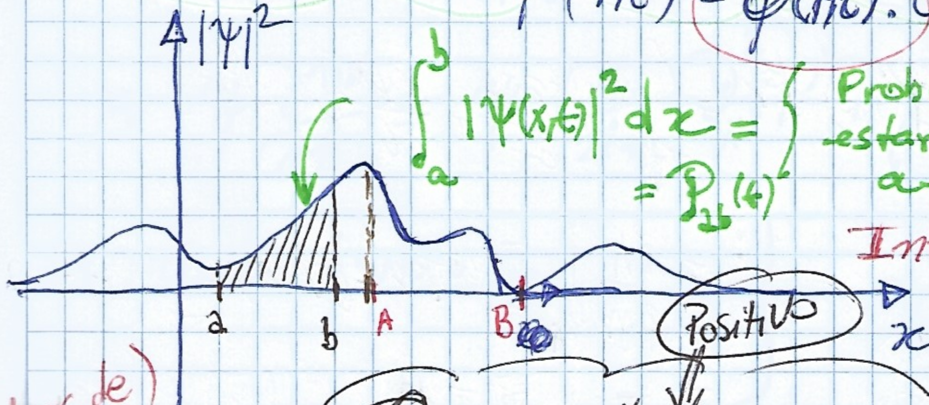
- Função de Onda: propriedades e Características

- Amplitude, fase, $\left\{\begin{array}{l}\underline{\lambda}\ \text{(comprimento de onda)}\\ \underline{\omega} \rightarrow \text{(frequência} \rightarrow \text{Energia)}\end{array}\right.$

→ AMPLitude

$$\psi(r,t) = \phi(r,t)\cdot e^{i\frac{Et}{\hbar}}$$

→ Em geral é função complexe $\{\in \mathbb{C}\}$



$\int_a^b |\psi(x,t)|^2\,dx = P_{ab}(t)$ = Probabilidade de estar no intervalo a-b, no inst. t

Interpretação Estatística de Born

(dens. de) Prob. de estar no ponto r → $\left\{ P(r,t) = \psi^*(r,t)\cdot\psi(r,t) \right\}$

Positivo

(r) ← posição r

A: MAIOR Prob

B: MENOR Prob (improvável!)