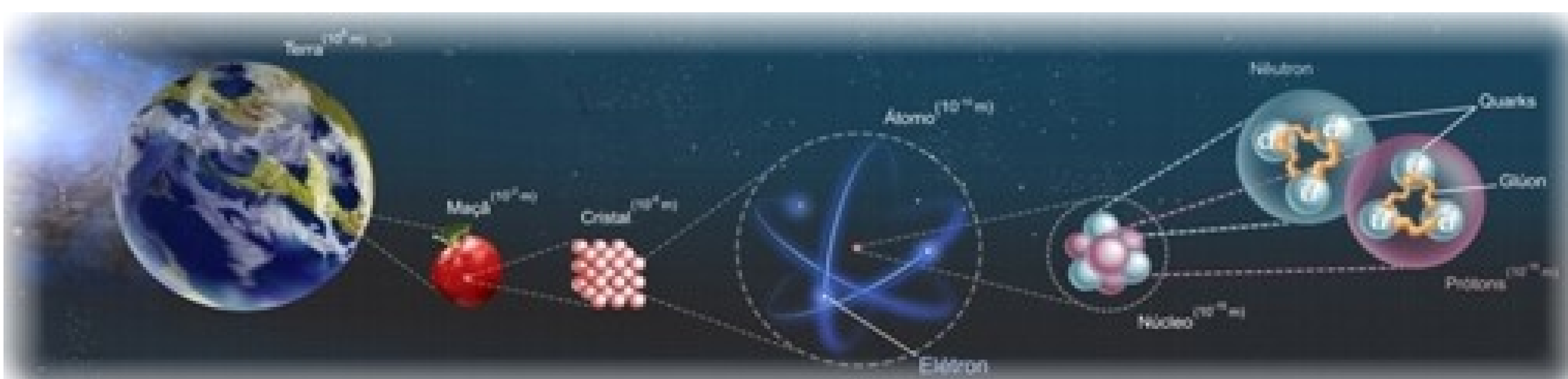
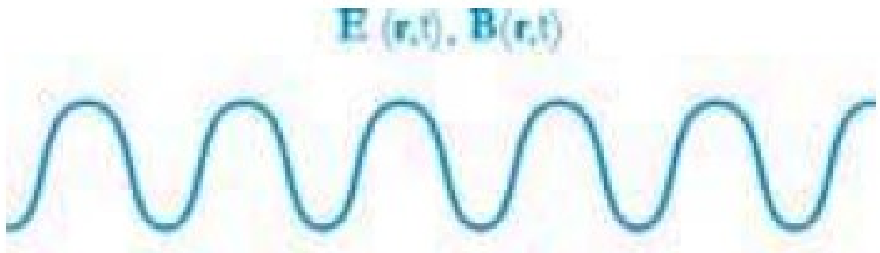
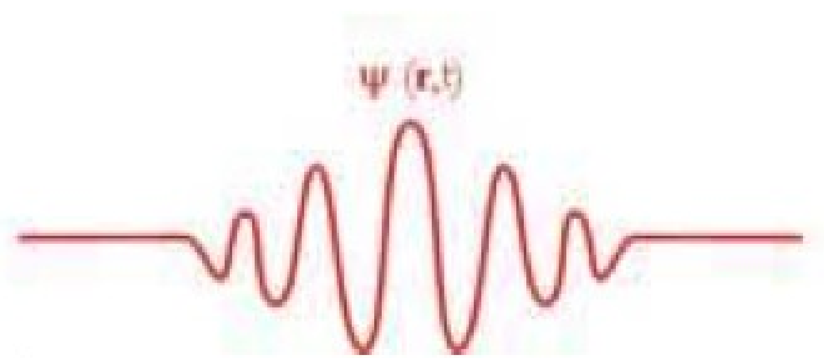
Estrutura da Matéria
2018-2 – Prof. Célio
Aula 4 – Funções de Onda



Funções de Onda





A função de onda está para as ondas de matéria assim como os campos elétrico e magnético estão para a radiação eletromagnética.

Funções de Onda

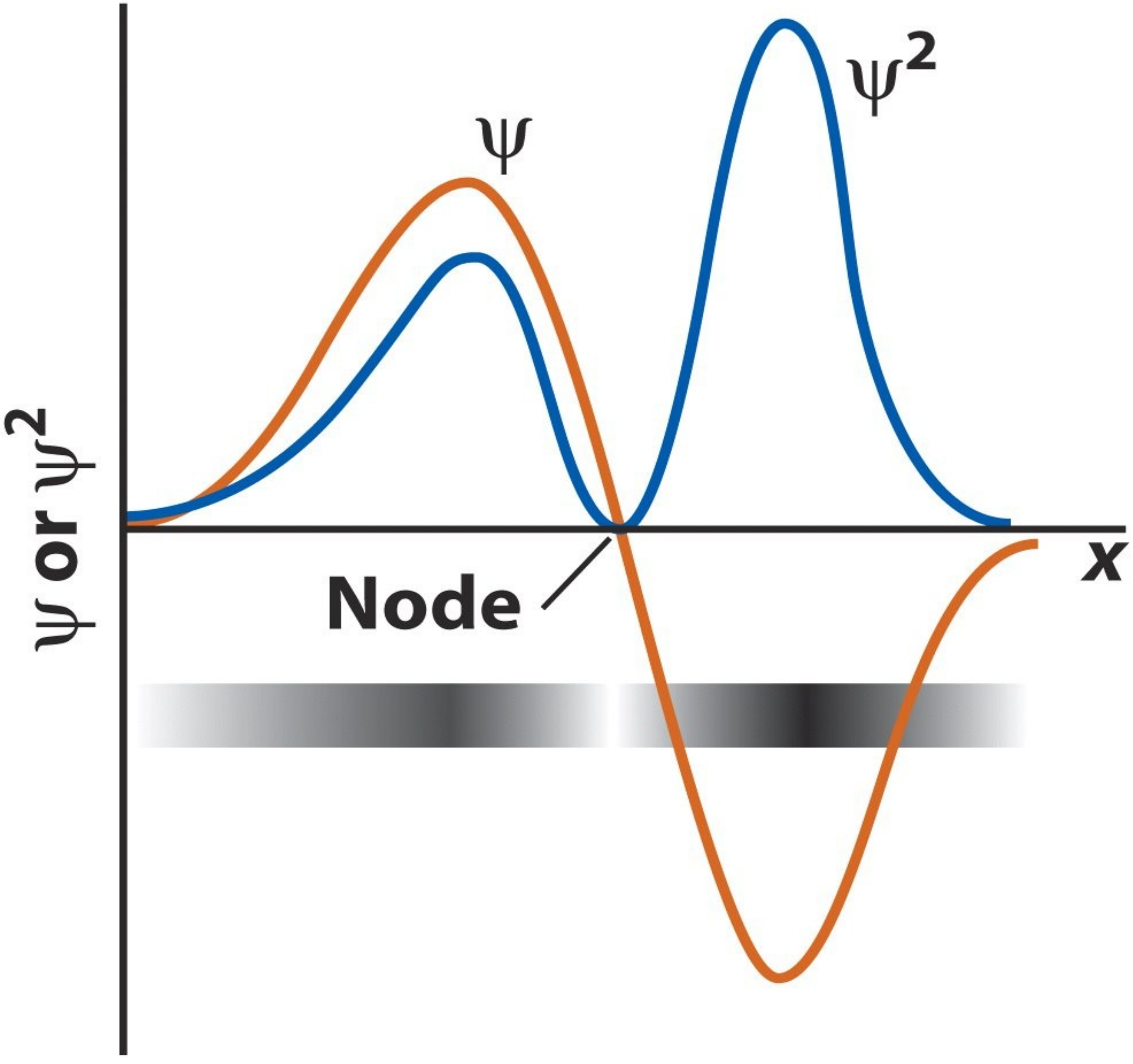
Assim como campos elétricos, $\vec{E}(\vec{r},t)$, e magnéticos, $\vec{B}(\vec{r},t)$, estão associados a distribuição de cargas, $\psi(\vec{r},t)$ é um campo associado à distribuição de matéria (em nível elementar).

$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$ nos dá as propriedades mecânicas da partícula associada a $\psi(\vec{r},t)$. É interpretado como a distribuição de probabilidade da partícula estar em dada posição, com dado momento e dada energia.

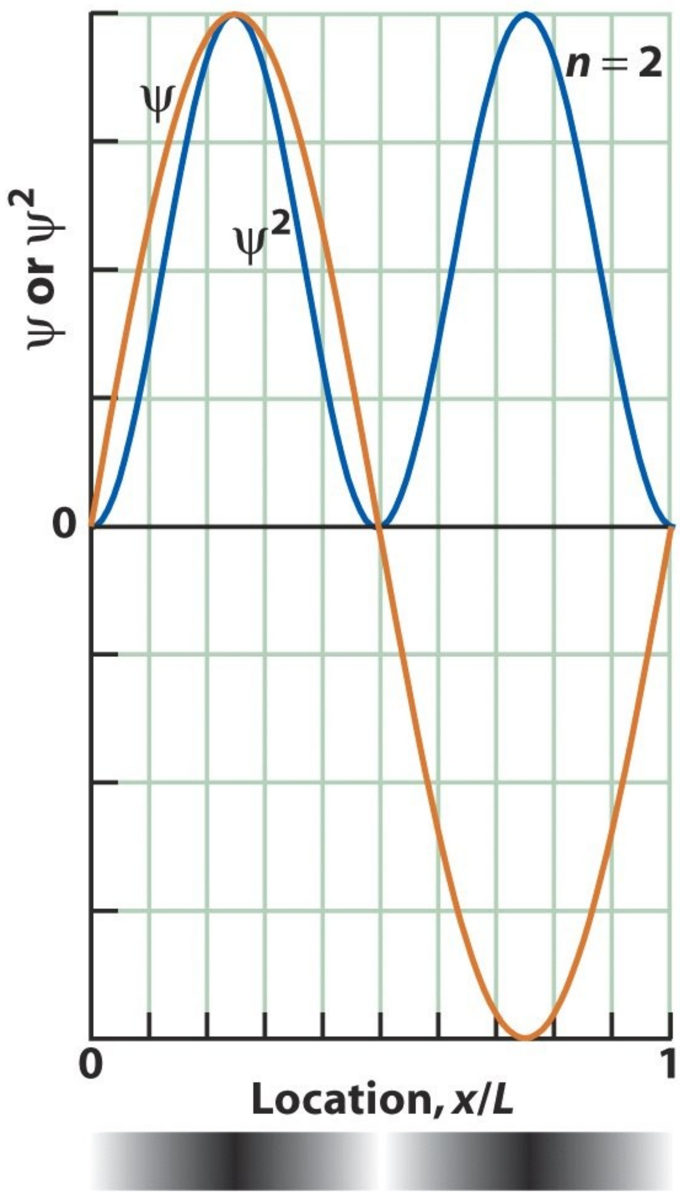
$\psi^*(\vec{r},t)$ é o complexo conjugado de $\psi(\vec{r},t)$.

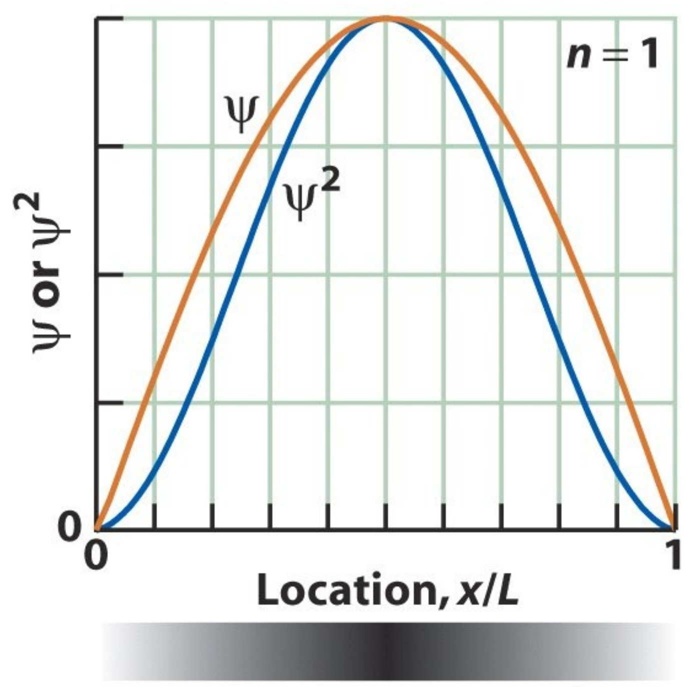
Seja o número complexo x+iy $\Rightarrow$ x-iy é o complexo conjugado.
$i^2 = -1$. (x+iy)(x-iy)=x^2+$i$xy-$i$yx-i^2y^2=x^2+y^2.

Densidade de Probabilidade



Partícula em uma “caixa”





Clássico e Quântico

Classicamente, para uma partícula livre: $x = x_0 + vt$. Se $x_0 = 0$ e $v = 10$ m/s, em $t = 1$ s temos $x = 10$ m, exatamente!

Quanticamente, temos a probabilidade de se encontrar a partícula, e.g., entre 9 e 11 m da origem. **A probabilidade é intrinseca à descrição do fenômeno.**

Medidas

- Imaginemos uma situação envolvendo somente 3 valores de energias possíveis, E_1, E_2, E_3. Essa energias são chamadas auto-energias;
- Temos auto-funções associadas a cada auto-energia: ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3;
- ϕ_i é uma forma particular de ψ adquirida no momento em que a medida é realizada. Descreve posição, momento, energia etc no instante e logo após à medida;
- Se E_2 foi medido $\Rightarrow$ o sistema estava no estado $\psi = \phi_2$;
- Antes da medida $\psi = a_1\phi_1 + a_2\phi_2 + a_3\phi_3$;
- a_i é amplitude de probabilidade de encontrar o sistema no auto-estado $\psi = \phi_i \Rightarrow |\psi|^2 = |a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 = 1.$

Energia Média

Não podemos prever com exatidão qual das 3 energias será medida, mas podemos calcular o valor médio esperado para várias medidas.

$$\langle E \rangle = E_1|a_1|^2 + E_2|a_2|^2 + E_3|a_3|^2$$

Exercícios: $E_1 = 0.5$ eV, $E_2 = 3.0$ eV, $E_3 = 7.2$ eV.

1. ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 igualmente prováveis. Qual a energia do sistema?

   $\langle E \rangle = \frac{1}{3} \times 0.5 + \frac{1}{3} \times 3.0 + \frac{1}{3} \times 7.2 = 3.57$ eV

2. As probabilidades de encontrar o sistema em cada um de seus auto-estados é 1/2, 1/5 e 3/10. Qual o valor esperado, ou seja, o valor médio para várias medidas de energia?

   $\langle E \rangle = \frac{1}{2} \times 0.5 + \frac{1}{5} \times 3.0 + \frac{3}{10} \times 7.2 = 3.01$ eV

Observe que a soma das probabilidades é igual a 1.

Partícula Livre

$$\psi(x) = e^{ikx} = \cos(kx) + i\sin(kx)$$

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

$$E_{\text{cin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{p}{m}\right)^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Mas $|\psi(x)|^2 = e^{ikx}e^{-ikx} = 1$

$\Rightarrow$ a partícula está em todos os lugares, i.e., igualmente distribuída em todo o espaço.

Realisticamente, qual a probabilidade de se encontrar a partícula em um dado volume?

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Rightarrow |\psi|^2 = \frac{1}{V}$$

Partícula livre: exemplo

A probabilidade de encontrar a partícula em um volume ΔV será

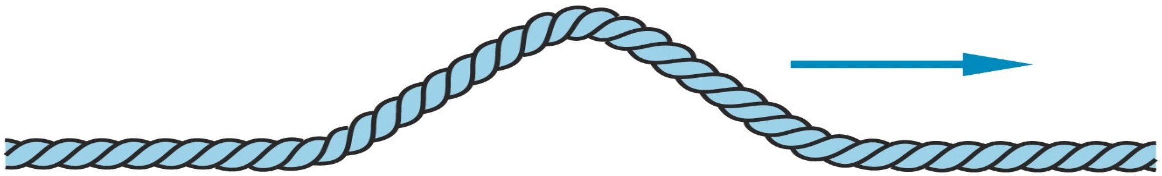
$$|\psi(\vec{r})|^2 \Delta V = \frac{\Delta V}{V}\,.$$

Ex. $V = 1\ \mathrm{m}^3$, $\Delta V = 0.01\ \mathrm{m}^3$
$\Rightarrow P = \frac{0.01}{1} = 1\%\,.$
Se $\Delta V = V \Rightarrow P = 1$
Formalmente, uma partícula livre é descrita por

$$\psi(x) = e^{ik_1 x} + e^{ik_2 x} + e^{ik_3 x} + \ldots + e^{ik_N x}\,,$$

para que seja bem localizada no espaço.

Ondas



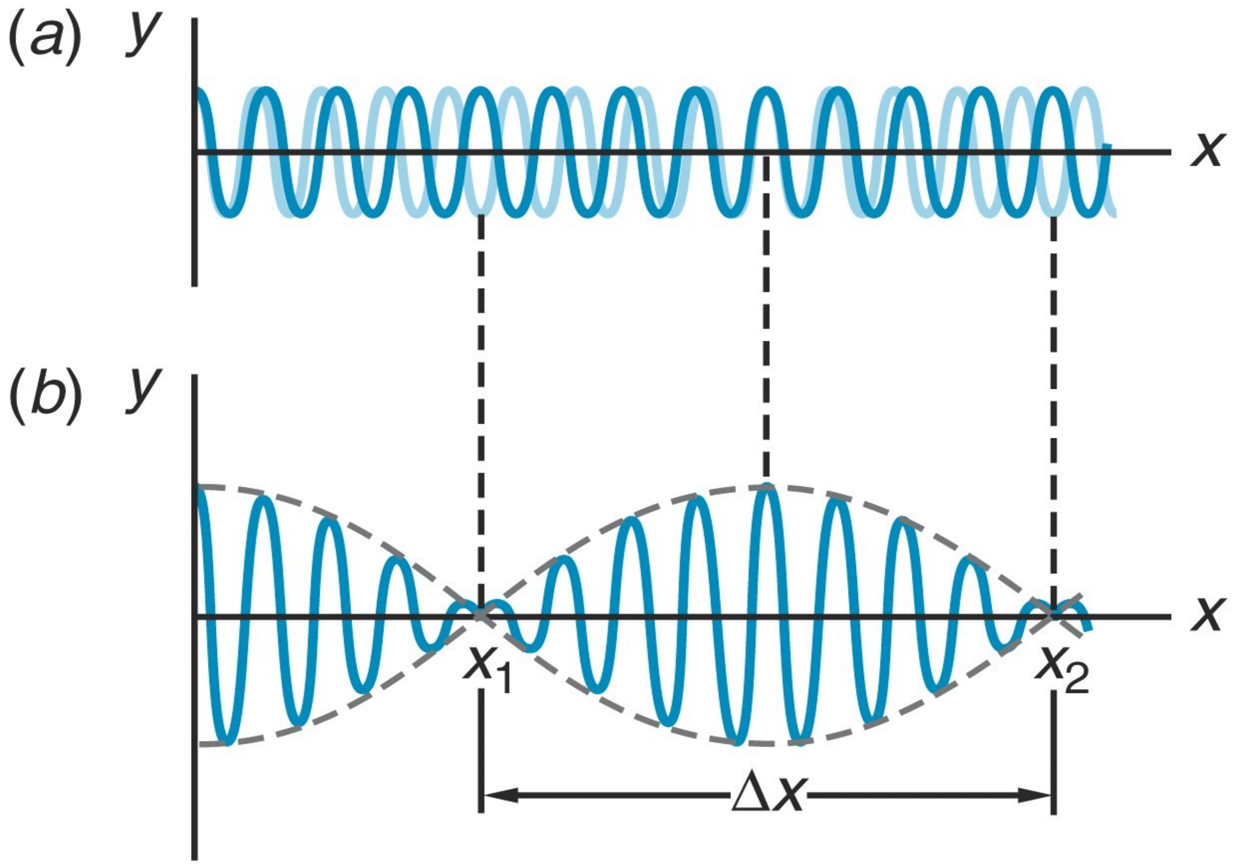
$$
\begin{aligned}
y &= y_0 \cos(kx - wt) \\
&= y_0 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - 2\pi f t\right) \\
&= y_0 \cos 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right) \\
&= y_0 \cos \frac{2\pi}{\lambda}(x - vt)
\end{aligned}
$$

$$
\frac{1}{T} = \frac{v}{\lambda} \Rightarrow v = \lambda f
$$

Pacotes de onda

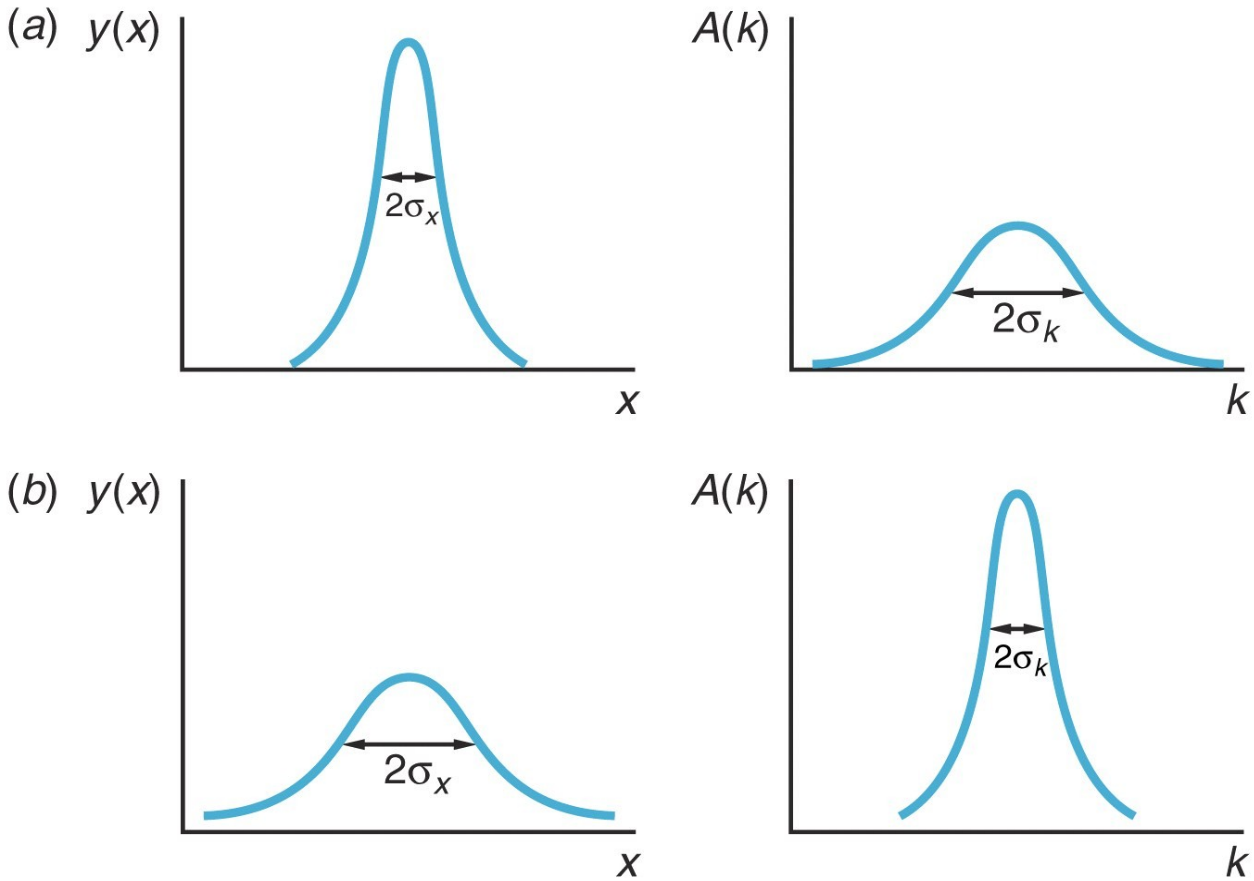
$$y(x,t) = y_0\cos(k_1x - w_1t) + y_0\cos(k_2x - w_2t)$$
$$= 2y_0\cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta w}{2}t\right)\cos(\frac{k_1+k_2}{2}x - \frac{w_1+w_2}{2}t)$$

$$\Delta k\Delta x \approx 1$$
$$\Delta w\Delta t \approx 1$$



Princípio de Indeterminação

$$\lambda = \frac{h}{p}$$
$$\frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$$
$$k = \frac{p}{\hbar}$$
$$\Rightarrow \Delta k \Delta x \approx 1$$
$$\Delta p \Delta x \approx \hbar$$



$$E = hf$$
$$= h\frac{w}{2\pi} = \hbar w$$
$$\Rightarrow \Delta w \Delta t \approx 1$$
$$\frac{\Delta E}{\hbar}\Delta t \approx 1$$
$$\Delta E \Delta t \approx \hbar$$

$$\sigma_x \sigma_k = \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$$ → Ver Tipler

Bibliografia

- Ivan S. Oliveira, Física Moderna para iniciados, interessados e aficionados, vol. 1, cap. 3, ed. Livraria da Física (2005).