A equação de Schrodinger

Aula 8

Prof. Márcio Sampaio Gomes Filho

Observação

- Esses slides são um complemento à aula ministrada em sala;
- Explicações/desenvolvimentos serão feitas no quadro.

Informação

- Página do curso: `https://marciosampaio.github.io/fisica-quantica-2025.1.html`

O que vimos até aqui (comentários)

- Primeria parte do curso.

O que vimos até aqui (comentários)

- Primeria parte do curso.
- Usando as relações de Planck e de De Broglie, conseguimos explicar algumas observações experimentais. Quais?

O que vimos até aqui (comentários)

- Primeria parte do curso.
- Usando as relações de Planck e de De Broglie, conseguimos explicar algumas observações experimentais. Quais?
- Agora, segunda parte do curso, a mecânica quântica (moderna).
  - Teoria de Schrodinger (vamos estudar!)
  - Teoria de Heisenberg

O que vimos até aqui (comentários)

- Primeria parte do curso.
- Usando as relações de Planck e de De Broglie, conseguimos explicar algumas observações experimentais. Quais?
- Agora, segunda parte do curso, a mecânica quântica (moderna).
  - Teoria de Schrodinger (vamos estudar!)
  - Teoria de Heisenberg
- Mas, antes vamos retormar alguns conceitos das últimas aulas.

Ondas de matéria

Em qualquer discussão a respeito de ondas, sempre surge a questão: o que está ondulando?

- No caso de ondas mecânicas, a grandeza que "ondula" é o deslocamento de um ponto do sistema em cada ponto x no tempo t.
- No caso de ondas sonoras, a grandeza que ondula é a pressão.
- No caso das ondas eletromagnéticas, são os campos elétrico e magnético que ondulam.
- No caso de uma onda de máteria?

Pacotes de ondas de matéria

- No caso de uma onda de máteria?
  - No caso das ondas de matéria o que está "ondulando" é uma grandeza, $\Psi(x,t)$ chamada **função de onda**, que está relacionada com a **probabilidade de observar** a partícula em cada ponto x do espaço no instante t.

Pacotes de ondas de matéria

Considere, por exemplo, uma **onda** associada a **um elétron** com uma única frequência ν e um único comprimento de onda λ.

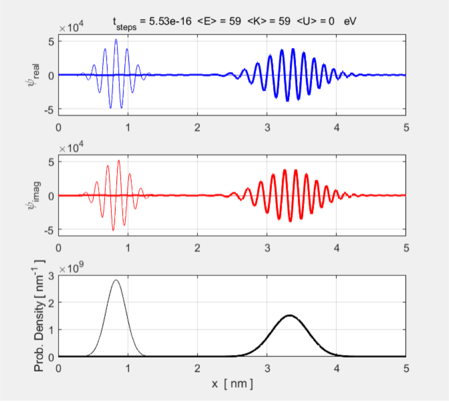
- Uma onda desse tipo pode ser representada de várias formas diferentes, por exemplo:

$$\Psi(x,t) = A\cos(kx - \omega t) \tag{1}$$

ou ainda

$$\Psi(x,t) = A\exp[i(kx - \omega t)] \tag{2}$$

Pacote de ondas



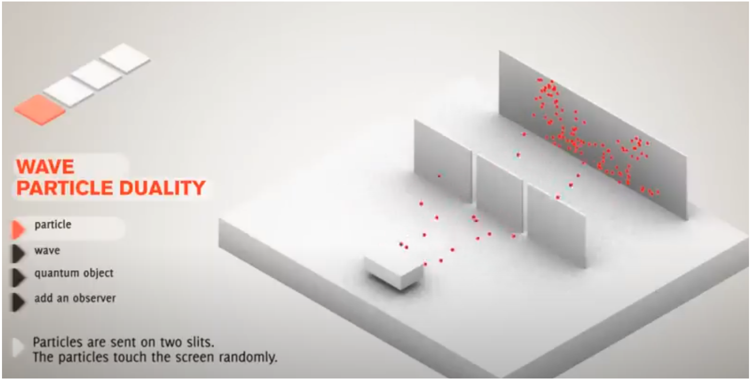
https://d-arora.github.io/Doing-Physics-With-Matlab/mpDocs/se_fdtdA.htm

Pacote de ondas de matéria

- A velocidade de fase é igual à metade da velocidade do elétron.
- A velocidade de grupo é igual a velocidade do elétron.
- Portanto, o pacote de ondas $\Psi(x, t)$ se propaga com a velocidade do elétron!

Interpretação probabilística da função de onda

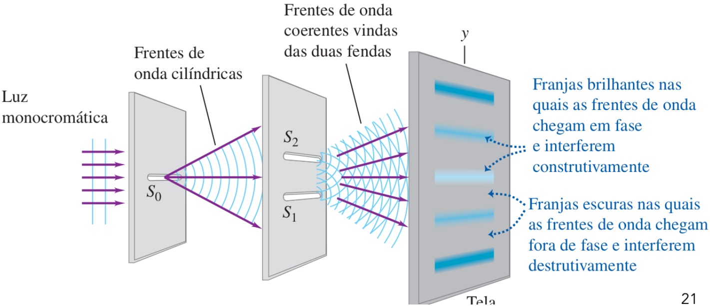
- Experimento da dupla-fenda



https://www.youtube.com/watch?v=Xmq_FJd1oUQ

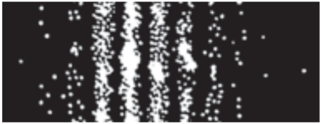
Interpretação probabilística da função de onda

❖ Experimento da dupla-fenda (luz monocromática)



Após 21 fótons atingirem a tela

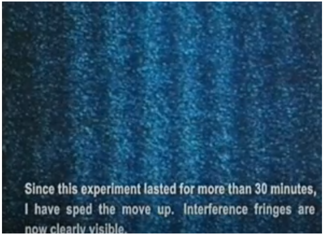
Após 1.000 fótons atingirem a tela



Após 10.000 fótons atingirem a tela

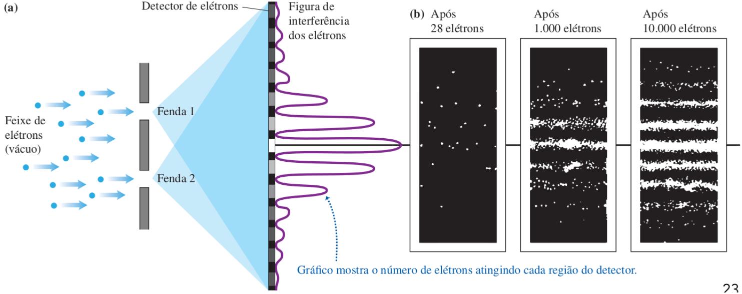
- Intensidade reduzida: série discreta de colisões (único fóton);
- Depois de um longo tempo: padrão de interferência (típico de onda);
- Figura: Representa uma distribuição estatística que nos informa quantos fótons, na média, atingem cada local.

Experimento da dupla-fenda com elétros



https://www.youtube.com/watch?v=ZJ-0PBRuthc

Experimento da dupla-fenda com elétros



Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 1: Estado Físico de um sistema microscópico é descrito por uma função, dita Funcão de onda $\Psi(x, t)$.

- x: ponto qualquer do espaço (em uma dimensão espacial!);
- t: instante de tempo;

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 1: Estado Físico de um sistema microscópico é descrito por uma função, dita Funcão de onda $\Psi(x, t)$.

- x: ponto qualquer do espaço (em uma dimensão espacial!);
- t: instante de tempo;
- Em geral, é uma função complexa;

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 1: Estado Físico de um sistema microscópico é descrito por uma função, dita Funcão de onda $\Psi(x, t)$.

- x: ponto qualquer do espaço (em uma dimensão espacial!);
- t: instante de tempo;
- Em geral, é uma função complexa;
- É uma função monovalorada;

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 1: Estado Físico de um sistema microscópico é descrito por uma função, dita Funcão de onda $\Psi(x, t)$.

- x: ponto qualquer do espaço (em uma dimensão espacial!);
- t: instante de tempo;
- Em geral, é uma função complexa;
- É uma função monovalorada;
- Pertencem a um conjunto de funções ditas de quadrado integrável (L^2), isto é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 \, dx \tag{3}$$

  existe e é finita.

- A probabilidade de encontrar a partícula representada por Ψ no intervalo dx em torno da coordenada x, no instante t é

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx, \qquad (4)$$

onde $\Psi^*(x,t)$ é o complexo conjulgado de $\Psi(x,t)$ é obtido substituindo i por $-i$ na função $\Psi(x,t)$.

- A probabilidade de encontrar a partícula representada por Ψ no intervalo dx em torno da coordenada x, no instante t é

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 dx, \qquad (4)$$

onde $\Psi^*(x,t)$ é o complexo conjulgado de $\Psi(x,t)$ é obtido substituindo i por $-i$ na função $\Psi(x,t)$.

- Observe que $|\Psi(x,t)|^2$ em si não é uma probabilidade.
- Por outro lado, $|\Psi(x,t)|^2 dx$ é a probabilidade de encontrarmos a partícula entre a posição x e a posição $x + dx$ no tempo t. Se diminuirmos a distância dx , torna-se menos provável que a partícula será encontrada dentro desse comprimento, de modo que a probabilidade diminui.

- Um nome mais adequado para $|\Psi(x,t)|^2$ é a função de distribuição de probabilidade, uma vez que descreve como a probabilidade de encontrar a partícula em diferentes locais é distribuída no espaço. Outro nome comum para $|\Psi(x,t)|^2$ é **densidade de probabilidade**.
- Posição mais provável da partícula é o valor de x para o qual $|\Psi(x,t)|^2$ é máxima.

Condição de normalização

- A probabilidade de encontrar a partícula na região do espaço compreendida entre os pontos $x = a$ e $x = b$ é dada por:

$$P(a, b, t) = \int_a^b \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)\, dx \tag{5}$$

Condição de normalização

- Em particular, probabilidade de encontrar a partícula em qualquer ponto do espaço, i.e. entre $x = -\infty$ e $x = +\infty$ é dada por:

$$P(-\infty, +\infty, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\,dx$$
$$= 1$$

- Como a partícula deve estar em algum lugar do espaço, devemos ter a probabilidade igual a 1 (100%).

Condição de normalização

- A função de onda deve satisfazer a condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)(x,t)\Psi(x,t)\, dx = 1$$

- Em particular, a função de onda $\Psi(x,t)$ deve se aproximar de zero suficientemente rápido quando $x \to \pm\infty$, de modo que a integral acima permaneça finita. Se não, a probabilidade torna-se ilimitada.

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 2: A evolução da função de onda de uma partícula de massa m, movendo-se em **uma dimensão** sob a influência de um potencial $V(x,t)$, obedece a equação de Schrodinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) \qquad (6)$$

- $V(x,t)$: função de energia potencial onde se encontra imersa a partícula considerada. Por exemplo, potencial elétrico de um núcleo, potencial elétrico de várias cargas, potencial molecular de Lennard-Jones, etc...
- $i = \sqrt{-1}$: número imaginário

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 2: A evolução da função de onda de uma partícula de massa m, movendo-se em **uma dimensão** sob a influência de um potencial $V(x,t)$, obedece a equação de Schrodinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) \qquad (6)$$

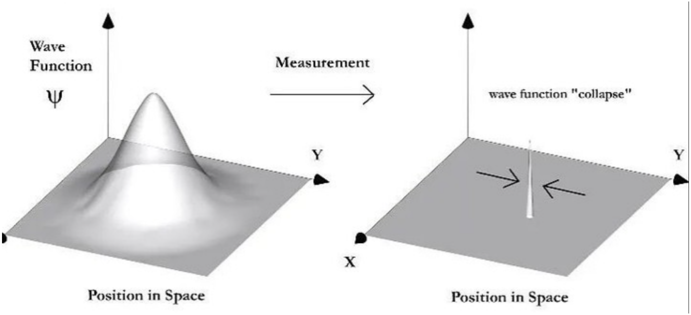
- $V(x,t)$: função de energia potencial onde se encontra imersa a partícula considerada. Por exemplo, potencial elétrico de um núcleo, potencial elétrico de várias cargas, potencial molecular de Lennard-Jones, etc...
- $i = \sqrt{-1}$: número imaginário
- A equação de Schrödinger é uma **Equação Diferencial Parcial (EDP) de segunda ordem** que permite obter a função de onda.

- A equação de Schrodinger é a equação fundamental da teoria quântica.
- Essa equação, não pode ser demonstrada: ela é um dos postulados ou axiomas da teoria.
- Para determinar se a equação de Schrodinger representa o comportamento dos sistemas quânticos, devemos comparar as predições da equação com os experimentos.

Postulados da Mecânica Quântica

Postulado 3: Imediatamente após a posição da partícula ser medida, com uma incerteza Δx, a função de onda é alterada pela medida, de tal forma que:

$$\Psi(x,t) \quad \longmapsto \quad \overline{\Psi}(x,t) \tag{7}$$



 https://www.threads.net/@spacetoday/post/DDevVBYRMkB

Exercício: Normalização da função de onda.

Exercício: Comentários sobre números complexos.