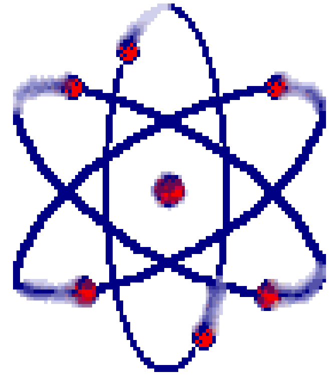
Mecânica - Quântica

Claudio Menezes R.A 22202310151
Eric Ramos Flamino R.A 22202310154

Prof. Dr. Pieter W. Westera



Mecânica Quântica

A Equação de Schrödinger Independente do Tempo

Equação da Onda de Schrödinger

A equação de onda que governa o movimento de elétrons e outras partículas com massa de repouso diferente de zero, que é análoga à equação de onda clássica, foi proposta por Schrödinger no final de 1925 e hoje é conhecida como equação de Schrödinger. Como a equação de onda clássica, a equação de Schrödinger relaciona as derivadas da função de onda em relação ao tempo e em relação ao espaço. O raciocínio seguido por Schrödinger para chegar à equação que recebeu o seu nome foi algo tortuoso, de qualquer forma, a equação de Schrödinger não pode ser demonstrada, assim como não é possível demonstrar as leis de Newton. A validade de equação de Schrödinger, como a de qualquer equação fundamental, está na concordância com os resultados experimentais.

A Equação de Schrödinger

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

A função de onda não passa de um artifício matemático; o que tem significado real é o produto $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$, que representa uma distribuição de probabilidade $P(x, t)$ ou, como também é frequentemente chamado, uma densidade de probabilidade. Para manter a analogia com as ondas e funções de onda clássicas, $\Psi(x, t)$ é às vezes chamada de amplitude de densidade de probabilidade ou simplesmente amplitude de probabilidade.

Física Volume 1, 6ª Edição, Paul Tipler Página 244

Separação das Funções do Tempo e do Espaço de $\psi(x, t)$

Schrödinger aplicou primeiro sua equação de onda a problemas simples como o do átomo de hidrogênio (no modelo de Bohr) e o do oscilador harmônico (no modelo de Planck), mostrando que a quantização da energia nesses sistemas pode ser explicada naturalmente em termos de ondas estacionárias. Essas ondas também são chamadas de *autofunções*. Nos problemas em que a energia potencial não varia com o tempo, as funções do tempo e do espaço na equação de onda podem ser separadas, o que permite escrever a equação de Schrödinger em uma forma muito mais simples. Para isso, supomos que a função $\psi(x, t)$ é o produto de uma função apenas de x por uma função apenas de t:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) \quad \textbf{6-10}$$

Situações físicas onde o potencial não varia com o tempo:
Movimento MHS, com uma constante de força fixa, onde um pêndulo, onde as grandezas envolvidas não variam no decorrer do tempo.
O átomo de hidrogênio, que tem um potencial Colombiano, que a energia eletrostática não varia com o tempo.

Vamos mostrar em seguida que a função $\Psi(x, t)$ pode ser escrita na forma da Equação 6-10 nos casos em que função potencial *não varia com o tempo*, ou seja, pode ser escrita na forma $V(x)$.

Substituindo $\Psi(x, t)$, dada pela Equação 6-10, na equação de Schrödinger, obtemos:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)\phi(t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x)\phi(t)}{\partial t} \quad \textbf{6-11}$$

Equação Parcial Diferencial de Duas Variáveis o que nos dá

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d\phi(t)}{dt} \qquad \textbf{6-12}$$

onde as derivadas agora são ordinárias e não parciais. Dividindo a Equação 6-12 por $\psi(x)\phi(t)$, temos:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} \qquad \textbf{6-13}$$

Observe que o lado esquerdo da Equação 6-13 é função apenas de x e o lado direito é função apenas de t. Isso significa que variações de t não podem afetar o valor do lado esquerdo da Equação 6-13 e variações de x não podem afetar o valor do lado direito. Assim, os dois lados da equação devem ser iguais à mesma constante C, conhecida como *constante de separação*, e vemos que a hipótese da Equação 6-10 é válida: as variáveis podem ser separadas. Com isso, substituímos uma equação diferencial parcial com duas variáveis independentes, a Equação 6-6, por duas equações diferenciais ordinárias com apenas uma variável independente cada uma:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = C \qquad \textbf{6-14}$$

$$i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = C \qquad \textbf{6-15}$$

Vamos resolver primeiro a Equação 6-15. Existem dois motivos para isso: (1) a Equação 6-15 não envolve o potencial $V(x)$; em consequência, a parte dependente do tempo $\phi(t)$ de *todas* as soluções $\Psi(x, t)$ da equação de Schrödinger tem a mesma forma quando o potencial não varia com o tempo, de modo que só precisamos fazer o cálculo uma vez; (2) a constante de separação C tem um significado especial que queremos discutir antes de resolver a Equação 6-14. A Equação 6-15 pode ser escrita na forma

$$\frac{d\phi(t)}{\phi(t)} = \frac{C}{i\hbar}dt = -\frac{iC}{\hbar}dt \qquad \textbf{6-16}$$

A solução geral da Equação 6-16 é

$$\phi(t) = e^{-iCt/\hbar} \qquad \textbf{6-17}a$$

que também pode ser escrita na forma

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

$$= \cos\left(2\pi\frac{Ct}{h}\right) - i\,\text{sen}\left(2\pi\frac{Ct}{h}\right) \qquad \textbf{6-17}b$$

Assim, $\phi(t)$, que descreve a variação com o tempo de $\Psi(x, t)$, é uma função oscilatória de frequência $f = C/h$. Entretanto, de acordo com a relação de de Broglie (Equação 5-1), a frequência da onda representada por $\Psi(x, t)$ é $f = E/h$; assim, a constante de separação C deve ser igual a E, a energia total da partícula, e, portanto,

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \qquad \textbf{6-17c}$$

para todas as soluções da Equação 6-6 que envolvem potenciais independentes do tempo. Fazendo $C = E$ na Equação 6-14 e multiplicando ambos os membros por $\psi(x)$, obtemos:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad \textbf{6-18}$$

A Equação 6-18 é conhecida como *equação de Schrödinger independente do tempo.*

A equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão é uma equação diferencial ordinária com apenas uma variável independente e, portanto, é muito mais fácil de lidar que a forma geral da equação de Schrödinger (Equação 6-6). A condição de normalização da Equação 6-9 pode ser expressa em termos de $\psi(x)$, já que a variação com o tempo desaparece quando calculamos o quadrado do valor absoluto da função de onda:

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)e^{+iEt/\hbar}\psi(x)e^{-iEt/\hbar} = \psi^*(x)\psi(x) \qquad \textbf{6-19}$$

e, portanto, a Equação 6-9 se reduz a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \qquad \textbf{6-20}$$

Condições que uma Função de Onda Deve Satisfazer

A forma da função de onda $\psi(x)$ que satisfaz a Equação 6-18 depende da forma da função energia potencial $V(x)$. Nas próximas seções, vamos discutir alguns problemas simples, mas importantes, nos quais $V(x)$ é especificada. Os potenciais usados nesses exemplos serão aproximações de potenciais encontrados na natureza, simplificados para facilitar os cálculos matemáticos. Em alguns casos, a derivada da energia potencial pode ser descontínua, isto é, $V(x)$ pode ter uma forma em uma região do espaço e outra forma em uma região vizinha. [Esta é uma aproximação válida de situações reais nas quais $V(x)$ varia rapidamente em uma pequena região do espaço, como a superfície de um metal.] O método usado nesses casos consiste em resolver separadamente a equação de Schrödinger para cada região e exigir que as soluções sejam iguais nos pontos de transição.

Como a probabilidade de encontrar uma partícula não pode variar descontinuamente de um ponto para o ponto vizinho, a função de onda $\psi(x)$ deve ser contínua.[9] Como a equação de Schrödinger envolve a derivada segunda $d^2\psi/dx^2 = \psi''(x)$, a derivada primeira, $d\psi/dx = \psi'(x)$ [que é a inclinação de $\psi(x)$], também deve ser contínua. Assim, o gráfico de $\psi(x)$ em função de x não deve apresentar variações bruscas. [Nos casos especiais em que a energia potencial é infinita em uma certa região do espaço, esta restrição não existe. Como nenhuma partícula pode ter energia potencial infinita, $\psi(x)$ deve ser nula nas regiões onde $V(x)$ é infinita. Isso significa que, na fronteira de uma região na qual a energia potencial é infinita, $\psi'(x)$ deve ser descontínua para que $\psi(x)$ se anule bruscamente.]

Se $\psi(x)$ ou $d\psi/dx$ não fosse finita ou unívoca, o mesmo aconteceria com $\Psi(x, t)$ ou $d\Psi/dx$. Como veremos daqui a pouco, as previsões da mecânica ondulatória com relação aos resultados de medições envolvem essas duas grandezas e, portanto, funções de onda com essas propriedades não seriam aceitáveis, já que grandezas mensuráveis, como momento angular e posição, jamais são infinitas ou plurívocas. Uma restrição final quanto à forma da função de onda $\psi(x)$ é que $\psi(x)$ deve tender a zero quando $x \to \pm\infty$ com rapidez suficiente para que a normalização seja preservada. Vamos resumir, para futuras consultas, as condições que uma função de onda $\psi(x)$ deve satisfazer:

1. $\psi(x)$ deve existir, ser contínua e satisfazer a equação de Schrödinger.
2. $d\psi/dx$ deve existir e ser contínua.
3. $\psi(x)$ e $d\psi/dx$ devem ser finitas.
4. $\psi(x)$ e $d\psi/dx$ devem ser unívocas.
5. ψ deve tender a zero com suficiente rapidez, quando $x \to \pm\infty$, para que a integral de normalização, Equação 6-20, convirja.

EXEMPLO **Uma Solução da Equação de Schrödinger** Mostre que, para uma partícula livre, de massa m, que se move em uma dimensão, a função $\psi(x) = A \text{ sen } kx + B \cos kx$ é uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo para qualquer valor das constantes A e B.

SOLUÇÃO

Para uma partícula livre, $V(x) = 0$ e, portanto, a energia total é igual à energia cinética; assim, $p = \hbar k = (2mE)^{1/2}$. Derivando $\psi(x)$, obtemos:

$$\frac{d\psi}{dx} = kA \cos kx - kB \text{ sen } kx$$

Derivando novamente, temos:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= -k^2 A \text{ sen } kx - k^2 B \cos kx \\ &= -k^2 (A \text{ sen } kx + B \cos kx) = -k^2 \psi(x)\end{aligned}$$

Substituindo na Equação 6-18,

$$\frac{-\hbar^2}{2m}[(-k^2)(A \text{ sen } kx + B \cos kx)] = E(A \text{ sen } kx + B \cos kx)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x) = E\psi(x)$$

Como $\hbar^2 k^2 = 2mE$, temos:

$$E\psi(x) = E\psi(x)$$

e, portanto, a função dada é uma solução da Equação 6-18.

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad \textbf{6-18}$$

6-3. Em uma região do espaço, uma partícula possui uma função de onda dada por $\omega(x) = Ae^{-x^2/2L^2}$ e uma energia dada por $\hbar^2/2mL^2$, em que L é um comprimento. (*a*) Determine a energia potencial em função de x e faça um gráfico de V em função de x. (*b*) Que tipo de potencial clássico tem essa forma?

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

Dado: $\omega(x) = Ae^{-x^2/2L^2}$

$$E = \hbar^2/2mL^2$$

a) $$\frac{d}{dx}\left(Ae^{-x^2/2L^2}\right) = -\frac{A\cancel{2}x}{\cancel{2}L^2}e^{-x^2/2L^2}$$

$$= \boxed{-\frac{Axe^{-x^2/2L^2}}{L^2}}$$

$$\frac{d}{dx}\left(-\frac{A}{L^2} x e^{-x^2/2L^2}\right) = -\frac{A}{L^2}\frac{d}{dx}\left(x e^{-x^2/2L^2}\right)$$

$$= 1 \cdot e^{-x^2/2L^2} + \left(-x \frac{\cancel{2}x}{\cancel{2}L^2} e^{-x^2/2L^2}\right)$$

$$= -\frac{A}{L^2} e^{-x^2/2L^2}\left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right) = \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$$

Substuimdo na Eq. da Shöerdinger

$$+\frac{\hbar^2}{2mL^2} A \cancel{e^{-x^2/2L^2}}\left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right) + V(x) A \cancel{e^{-x^2/2L^2}} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} A \cancel{e^{-x^2/2L^2}}$$

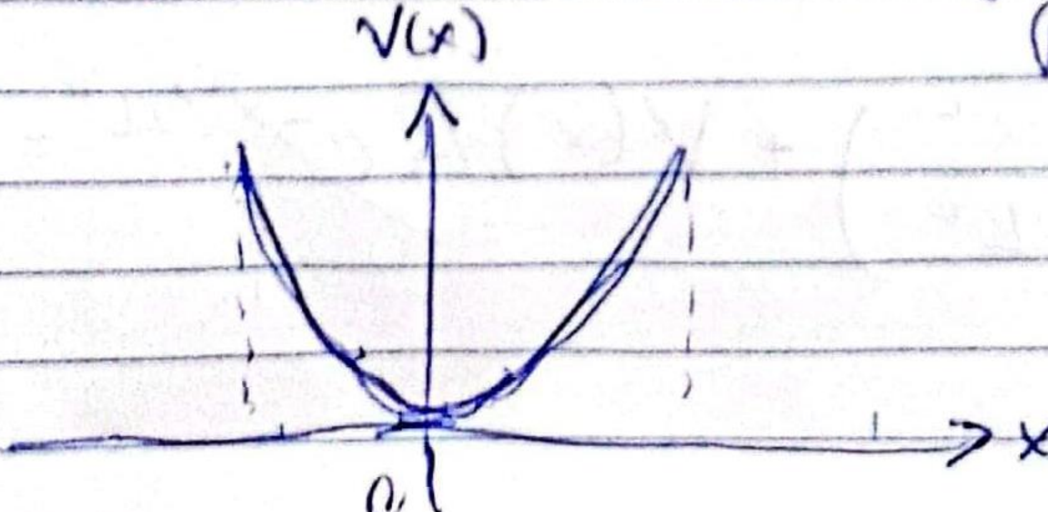
$$\frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(1-\frac{x^2}{L^2}\right)+V(x)=\frac{\hbar}{2mL^2}$$

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2mL^2}-\frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(1-\frac{x^2}{L^2}\right)$$

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(\cancel{1} - \cancel{1} + \frac{x^2}{L^2}\right)$$

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2mL^4}\, x^2$$

Parábola



* Fazendo $\hbar^2/mL^4 = K$, temos

$$V(x) = \frac{Kx^2}{2}$$

Energia potencial do oscilador harmônico

Referências Bibliográficas:

1 - **Eisberg, R.,Resnick, R., *Física Quantica*, Rio de Janeiro, Campus 1979.**

2- Tipler, Paul A., 1933- Física moderna / Paul A. Tipler e Ralph A. Llewellyn; tradução e revisão técnica Ronaldo Sérgio de Biasi. - 6. ed. - [Reimpr.]- Rio de Janeiro : LTC, 2017.