

Física Quântica

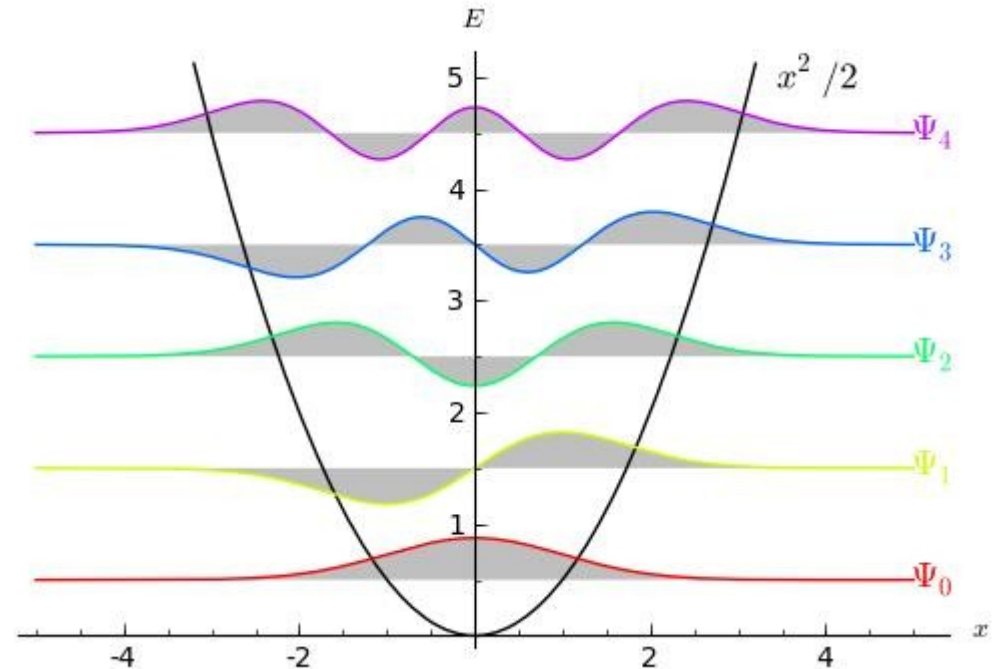
Aula 6: Operadores, Equação de Schrödinger

Pieter Westera

pieter.westera@ufabc.edu.br



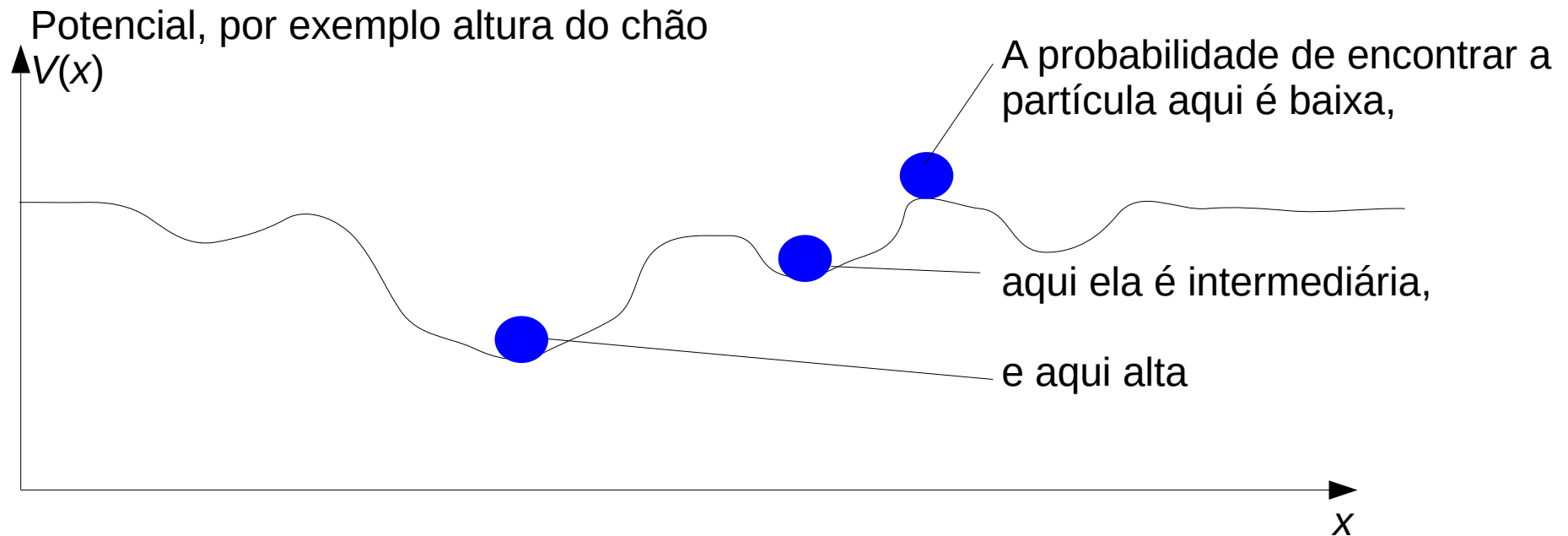
Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html>

Como determinar a função de onda?

Física Clássica



A **probabilidade** de encontrar a partícula numa dada posição x depende do **potencial** naquela posição, $V(x)$.

O **potencial** $V(x)$ é a **energia potencial** que a partícula teria na **posição** x . Ele é uma função da posição e tem um valor mesmo sem que a partícula se encontre lá.

Um exemplo: A Partícula Livre

(Função de onda “caindo do céu” para ser usada em exemplos)

É uma partícula submetida a nenhuma força:

$$F(x, t) = -dV(x, t)/dx = 0 \Rightarrow V(x, t) = \text{const.} = 0$$

A função de onda correspondente é

$$\Psi(x, t) = C \cdot e^{i(kx - \omega t)} \text{ (Dedução mais tarde nesta disciplina)}$$

que descreve uma onda com número de onda k e frequência angular ω propagando-se na direção x .

Com k negativo, ela representa uma onda propagando-se na direção $-x$.

!!! Esta função de onda descreve uma onda pura, que se estende pelo espaço inteiro e não é normalizável. Uma partícula real é um pacote deste tipo de ondas, como visto duas aulas atrás.

Operadores

Função f_{op} , que **age sobre** $\Psi(x, t)$ (ou $\psi(x)$), tal que o resultado $f_{\text{op}} \Psi(x, t)$ é uma nova função de x (e t), preferencialmente uma função útil.

Os **operadores** usados nesta disciplina são da forma **produto** de alguma **grandeza física** $f(x, t)$ e a **função de onda**:

$$f_{\text{op}} \Psi(x, t) = f(x, t) \cdot \Psi(x, t)$$

Exemplos:

Operador momento linear: $p_{\text{op}} = \hbar/i \cdot \partial/\partial x$,

o que significa $p_{\text{op}} \Psi(x, t) = \hbar/i \cdot \partial\Psi/\partial x = p(x, t)\Psi(x, t)$

No exemplo da partícula livre temos

$$\begin{aligned} p_{\text{op}} \Psi(x, t) &= \hbar/i \cdot \partial\Psi/\partial x = \hbar/i \cdot \partial(C \cdot e^{i(kx - \omega t)})/\partial x = \hbar/i \cdot C \cdot ik \cdot e^{i(kx - \omega t)} \\ &= \hbar k \cdot C \cdot e^{i(kx - \omega t)} = p(x, t)\Psi(x, t), \end{aligned}$$

de acordo com a relação de deBroglie $p = \hbar k$

Operadores

Exemplos:

Operador hamiltoniano (dependente do tempo), isto é, energia total:

$$H_{\text{op}} \text{ ou } \hat{H} = i\hbar \cdot \partial/\partial t$$

$$\Rightarrow H_{\text{op}} \Psi(x,t) = i\hbar \cdot \partial\Psi/\partial t = E(x,t)\Psi(x,t) = E \cdot \Psi(x,t) \quad (E \text{ independe de } x \text{ e } t)$$

No exemplo da partícula livre:

$$\begin{aligned} H_{\text{op}} \Psi(x,t) &= i\hbar \cdot \partial\Psi/\partial t = i\hbar \cdot \partial(C \cdot e^{i(kx-\omega t)})/\partial t = i\hbar \cdot C \cdot (-i\omega) \cdot e^{i(kx-\omega t)} \\ &= \hbar\omega \cdot C \cdot e^{i(kx-\omega t)} = E \cdot \Psi(x,t), \end{aligned}$$

de acordo com a relação de deBroglie $E = \hbar\omega$

Operador energia cinética (m = massa da partícula): $-\hbar^2/2m \cdot \partial^2/\partial x^2$

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi/\partial x^2 = E_{\text{cin}}(x,t)\Psi(x,t)$$

No exemplo da partícula livre:

$$\begin{aligned} -\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi/\partial x^2 &= -\hbar^2/2m \cdot \partial^2(C \cdot e^{i(kx-\omega t)})/\partial x^2 = -\hbar^2/2m \cdot C \cdot (ik)^2 \cdot e^{i(kx-\omega t)} \\ &= \hbar^2 k^2/2m \cdot C \cdot e^{i(kx-\omega t)} = p^2/2m \cdot \Psi(x,t) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E_{\text{cin}}(x,t) = p^2/2m \quad \text{como já sabíamos}$$

Operadores

Exemplos:

Alguns operadores não podem ser escritos de maneira diferente, do que “grandeza multiplicado por”, por exemplo

Operador posição: $x_{\text{op}} = x$.

Operador (energia) potencial: $V(x)$.

=> Operador hamiltoniano independente do tempo:

H_{op} ou $\hat{H} = -\hbar^2/2m \cdot \partial^2/\partial x^2 + V(x)$.

Operadores

Lista de operadores

Posição: $x_{\text{op}} = x$.

Momento linear: $p_{\text{op}} = \hbar/i \cdot \partial/\partial x$

Caso 3D: $p_{x,\text{op}} = \hbar/i \cdot \partial/\partial x$, $p_{y,\text{op}} = \hbar/i \cdot \partial/\partial y$, $p_{z,\text{op}} = \hbar/i \cdot \partial/\partial z$
 $\mathbf{p}_{\text{op}} = \hbar/i \cdot \nabla$

Hamiltoniano independente do tempo: H_{op} ou $\hat{H} = -\hbar^2/2m \cdot \partial^2/\partial x^2 + V(x)$.

Caso 3D: $H_{\text{op}} = -\hbar^2/2m \cdot \nabla^2 + V(x, y, z)$.

Hamiltoniano dependente do tempo: H_{op} ou $\hat{H} = i\hbar \cdot \partial/\partial t$

Momento angular em quadrado (coordenadas esféricas):

$$(L^2)_{\text{op}} = -\hbar^2 \cdot (1/\sin \theta \cdot \partial/\partial \theta (\sin \theta \cdot \partial/\partial \theta) + 1/\sin^2 \theta \cdot \partial^2/\partial \varphi^2)$$

Componente z do momento angular: $L_{z,\text{op}} = \hbar/i \cdot \partial/\partial \varphi = -i\hbar \cdot \partial/\partial \varphi$
 $= \hbar/i \cdot (y \cdot \partial/\partial z - z \cdot \partial/\partial y)$

Valores Esperados

O valor esperado para uma grandeza física f relacionada a uma partícula/onda descrita por uma função de onda $\psi(x)$ é a **média ponderada** de todos os valores possíveis desta grandeza, os pesos sendo as **probabilidades** de ocorrência destes valores:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} P(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \psi(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* f(x) \psi(x) dx$$

ex. valor esperado para a posição da partícula (isto é, $f(x) = x$):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x \psi(x) dx$$

Para grandezas dadas por **operadores**, $f(x)\psi(x) = f_{\text{op}} \psi(x)$:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* f_{\text{op}} \psi(x) dx$$

ex. valor esperado para o momento linear da partícula:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* p_{\text{op}} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \cdot \hbar/i \cdot \partial\psi/\partial x dx$$

!!! O **valor esperado não** necessariamente coincide com o **valor mais provável**!

Autofunções e Autovalores

Uma função de onda ψ é chamada **autofunção** do **operador** f_{op} , se $f_{\text{op}} \psi$ é um **múltiplo** de ψ :

$$f_{\text{op}} \psi = \text{const.} \cdot \psi$$

A **constante** é chamada **autovalor** do operador, e seu valor corresponde ao **valor** (constante) da **grandeza representada** pelo **operador**.

Exemplo:

A função de onda da partícula livre, $\psi = C \cdot e^{i(kx - \omega t)}$, é autofunção do operador momento linear, já que

$$p_{\text{op}} \psi = \hbar/i \cdot \partial(C \cdot e^{i(kx - \omega t)})/\partial x = \hbar/i \cdot ik \cdot C \cdot e^{i(kx - \omega t)} = \hbar k \cdot \psi = \text{const.} \cdot \psi,$$

e o valor constante do momento linear é $p = \hbar k$.

A Equação de Schrödinger

Como achar a Função de Onda, dado o potencial $V(x, t)$?

Para **partículas** (grandeza de interesse: a posição $x(t)$):

2ª Lei de Newton: $a = F/m$ ou $\partial^2 x / \partial t^2 = -1/m \cdot \partial V / \partial x$

Para **ondas** (Grandeza de interesse $a(x, t)$ ou λ , ω e φ):

Equação de onda: $\partial^2 a / \partial x^2 = 1/v^2 \cdot \partial^2 a / \partial t^2$

Para **funções de onda** (Grandeza de interesse $\Psi(x, t)$):

Equação de Schrödinger (dependente do tempo):

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2 \Psi(x, t) / \partial x^2 + V(x, t) \cdot \Psi(x, t) = i\hbar \cdot \partial \Psi(x, t) / \partial t$$

(Esta não usaremos muito)



Erwin Schrödinger

A Equação de Schrödinger

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2 \Psi(x, t)/\partial x^2 + V(x, t) \cdot \Psi(x, t) = i\hbar \cdot \partial \Psi(x, t)/\partial t$$

Como exemplo conferimos, se esta equação é satisfeita pra Partícula livre, $V(x, t) = 0$, $\Psi(x, t) = C \cdot e^{i(kx - \omega t)}$:

Lado esquerdo:

$$\begin{aligned} -\hbar^2/2m \cdot \partial^2 \Psi(x, t)/\partial x^2 + V(x, t) \cdot \Psi(x, t) &= -\hbar^2/2m \cdot \partial^2 (C \cdot e^{i(kx - \omega t)})/\partial x^2 + 0 \\ &= -\hbar^2/2m \cdot C \cdot (ik)^2 \cdot e^{i(kx - \omega t)} = \hbar^2 k^2/2m \cdot \Psi(x, t) = p^2/2m \cdot \Psi(x, t) \end{aligned}$$

Lado direito:

$$i\hbar \cdot \partial \Psi/\partial t = i\hbar \cdot \partial (C \cdot e^{i(kx - \omega t)})/\partial t = i\hbar \cdot C \cdot (-i\omega) \cdot e^{i(kx - \omega t)} = \hbar\omega \cdot \Psi(x, t)$$

Os dois lados são iguais, se $E = p^2/2m = \hbar\omega$,
o que é o caso pra partícula livre.

QED

A Equação de Schrödinger

Em muitos casos, o **potencial não** depende do **tempo** $V = V(x)$. Nestes casos, podemos **separar** $\Psi(x, t)$ em uma função que depende **apenas** da **posição**, e uma que depende **só** do **tempo**:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \varphi(t), \text{ onde } \varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

! O módulo de $\varphi(t)$ é sempre 1, tal que $\varphi(t)$ não influencia na distribuição de probabilidade:

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x) \cdot \varphi(t)|^2 = |\psi(x)|^2 \cdot |\varphi(t)|^2 = 1 \cdot |\psi(x)|^2 =: P(x)$$

$$\text{e } \partial\varphi(t)/\partial t = \partial(e^{-iEt/\hbar})/\partial t = -iE/\hbar \cdot e^{-iEt/\hbar} = -iE/\hbar \cdot \varphi(t)$$

A Equação de Schrödinger vira:

$$\begin{aligned} -\hbar^2/2m \cdot \partial^2(\psi(x) \cdot \varphi(t))/\partial x^2 + V(x) \cdot \psi(x) \cdot \varphi(t) &= i\hbar \cdot \partial(\psi(x) \cdot \varphi(t))/\partial t \\ \Rightarrow \cancel{\varphi(t)} \hbar^2/2m \cdot \partial^2(\psi(x))/\partial x^2 + \cancel{\varphi(t)} \cdot V(x) \cdot \psi(x) &= \psi(x) \cdot i\hbar \cdot \partial\cancel{\varphi(t)}/\partial t = \psi(x) \cdot i\hbar \cdot \cancel{(-iE/\hbar \cdot \varphi(t))} \end{aligned}$$

A Equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\psi(x)/\partial x^2 + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$



Erwin Schrödinger

A Equação de Schrödinger

$$-\hbar^2/2m \cdot d^2\psi(x)/dx^2 + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Já que o potencial da partícula livre, $V(x, t) = V(x) = 0$ é constante, deve ser possível escrever a sua função de onda desta maneira:

$$\psi(x, t) = C \cdot e^{i(kx - \omega t)} = C \cdot e^{ikx} \cdot e^{-i\omega t} = C \cdot e^{ikx} \cdot e^{-iEt/\hbar} = \psi(x) \cdot \varphi(t),$$

onde $\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ como deve ser, e

$$\psi(x) = C \cdot e^{ikx}$$

Esta última função satisfaz a Equação de Schrödinger independente do tempo?

Lado esquerdo:

$$\begin{aligned} -\hbar^2/2m \cdot d^2\psi(x)/dx^2 + V(x) \cdot \psi(x) &= -\hbar^2/2m \cdot d^2(C \cdot e^{ikx})/dx^2 + 0 \\ &= -\hbar^2/2m \cdot C \cdot (ik)^2 \cdot e^{ikx} = \hbar^2 k^2/2m \cdot C \cdot e^{ikx} = \hbar^2 k^2/2m \cdot \psi(x), \end{aligned}$$

o que equivale ao lado direito, se $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$.

QED

A Equação de Schrödinger

A Equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\hbar^2/2m \cdot d^2\psi(x)/dx^2 + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

O lado esquerdo desta equação é justamente o **operador hamiltoniano** independente do tempo **aplicado** em ψ , e podemos escrever a equação de Schrödinger independente do tempo como

$$H_{\text{op}} \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

A **resolução** da **Equação de Schrödinger independente do tempo** para um **dado potencial** $V(x)$ é, então, nada outro que a determinação das **autofunções** do **operador hamiltoniano** independente do tempo (as **funções de onda** procuradas), e dos **autovalores** (os **valores de energia**) **correspondentes**.



Erwin Schrödinger

A Equação de Schrödinger

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

Normalmente, há **mais** de uma solução $\psi_i(\mathbf{x})$, $i = 1, \dots$

Isto significa que existem várias funções de onda possíveis, (análogo às diferentes órbitas no átomo de Bohr).

Cada função de onda ψ_i tem seu próprio valor de energia E_i .

A Equação de Schrödinger

Quando as **energias** de duas funções de onda, $\psi_i(x)$ e $\psi_j(x)$, onde $i \neq j$, são **iguais**, $E_i = E_j$, se diz que este nível de energia é **degenerado**.

Neste caso, a **Equação de Schrödinger** é **linear**, isto é:
Se, para um dado **potencial** $V(x)$, ψ_1 e ψ_2 são **soluções** com a **mesma energia**,

$$-\hbar^2/2m \cdot d^2\psi_1(x)/dx^2 + V(x) \cdot \psi_1(x) = E \cdot \psi_1(x) \text{ e}$$

$$-\hbar^2/2m \cdot d^2\psi_2(x)/dx^2 + V(x) \cdot \psi_2(x) = E \cdot \psi_2(x),$$

então qualquer **combinação linear** de ψ_1 e ψ_2 ,
 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ **também** é **solução** com
a **mesma energia**:

$$-\hbar^2/2m \cdot d^2\psi(x)/dx^2 + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

É um bom exercício mostrar isto em casa.



Erwin Schrödinger

Condições, que uma função de onda tem que satisfazer

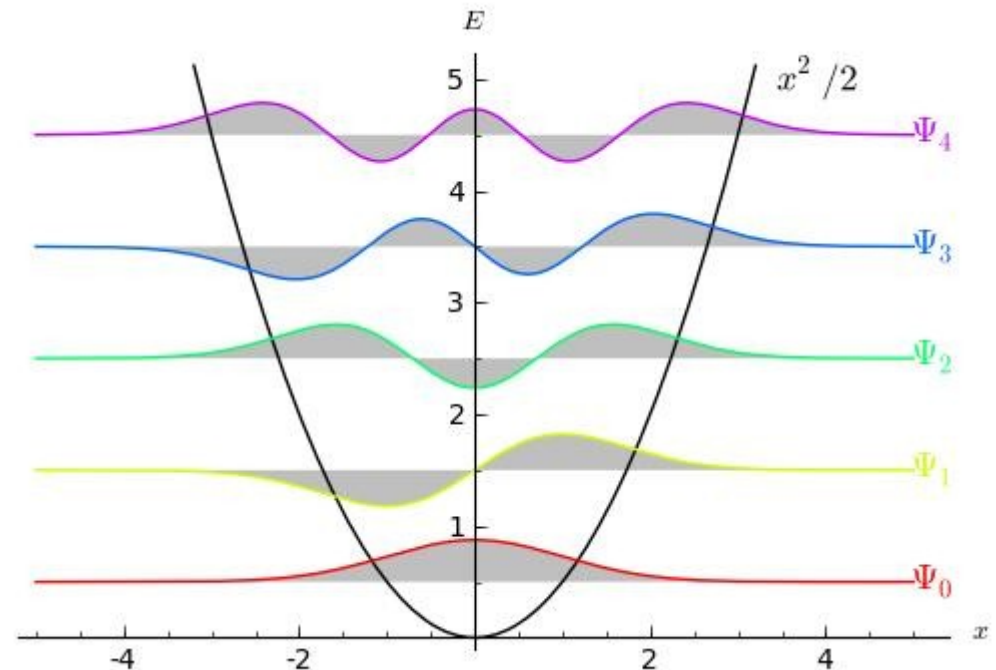
- $\psi(x)$ tem que satisfazer a **Equação de Schrödinger**
- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser **contínuas** (exceção: pode ter quinas em posições de transição para regiões com potenciais infinitos)
- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser **finitas**
- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser **unívocas**
- condição de **normalização**: $\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \psi(x)dx = 1$

Física Quântica

FIM PARA HOJE



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html>