5 A TEORIA DE SCHRÖDINGER DA MECÂNICA QUÂNTICA

Até aqui apresentamos evidências experimentais de que o movimento de partículas microscópicas apresenta comportamento ondulatório.

Discutimos casos simples (partícula livre, oscilador harmônico, átomo de H) que podem ser explicados pelos postulados de de Broglie, Planck e Bohr (ou Sommerfeld).

Neste capítulo, será apresentada a teoria mais geral capaz de descrever qqer sistema microscópico. As duas questões centrais do capítulo são: Como a onda se propaga, ou, como obter a função de onda? Como a função de onda nos dá informações sobre o movimento da partícula?

A primeira resposta é dada pela Eq de Schrödinger. Essa Eq é um postulado, e portanto, não pode ser deduzida de Eqs conhecidas. Mas vamos apresentar argumentos intuitivos para "justificá-la", ou "aceitá-la".

5.2 ARGUMENTOS PARA SE CHEGAR À EQ SCHRÖDINGER

* As Eqs de onda que conhecemos são Eqs diferenciais. Vamos supor que a Eq. de onda da Mec. Quântica é uma Eq. diferencial.

Em geral (3D),

$$\Psi \equiv \Psi(\vec{r}, t),$$

mas faremos tudo em 1D. Assim

$$\Psi = \Psi(x, t)$$

A Eq procurada deve envolver derivadas parciais de Ψ em relação a x e t.

* A Eq. deve estar de acordo com os postulados de de Broglie e Einstein

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad \text{e} \qquad E = h\nu$$

ou

$$p = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \qquad \text{e} \qquad E = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \hbar\omega$$

Mas, a rigor, o postulado de de Broglie só faz sentido se $\vec{p}$ for constante (como no caso de uma partícula livre), ou pelo menos ter módulo constante (como no modelo de Bohr para o H).

* Ela deve ser consistente com a Eq.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

* Ela deve ser uma Eq. dif. linear para que a soma de duas soluções também seja uma solução, dando lugar a fenômenos de interferência (como nos experimentos de Davisson e Germer ou de Thomson)



$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

Para a Eq ser linear, cada termo deve conter $\Psi(x,t)$ ou uma de suas derivadas.

A Eq. procurada é a Equação de Schrödinger (EQSCH), dada por

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

onde $i = \sqrt{-1}$

Em vez de tentar chegar nesta Eq, a partir das suposições apresentadas, como faz o livro, vou simplesmente fazer uma análise de como essas exigências são satisfeitas pela EQSCH.

* Considere uma partícula livre. Como $V=0$,

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \boxed{\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \quad (A)$$

como o momento e a energia são bem definidos,

$\Psi = \text{sen}(kx - \omega t)$ e $\Psi = \cos(kx - \omega t)$ devem ser soluções da EQSCH para a partícula livre.

* Uma ressalva: Vimos no cap 3 que uma descrição razoável de uma partícula livre é dada por um pacote de ondas: uma combinação de várias ondas planas. Mas, como a EQSCH é linear, se as ondas planas acima, $\text{sen}(kx-\omega t)$ e $\cos(kx-\omega t)$, são soluções, qqer combinação delas tbém é solução.

* Teste para $\Psi = \operatorname{sen}(kx - \omega t)$:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = k \cos(kx - \omega t) \Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \operatorname{sen}(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\omega \cos(kx - \omega t)$$

Subst na EQSCH, obtemos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \operatorname{sen}(kx - \omega t) \neq -i\hbar\omega \cos(kx - \omega t)$$

↳ pq sen( ) e cos( ) são funções diferentes

Então $\Psi = \operatorname{sen}(kx - \omega t)$ não é solução.

* E, analogamente, $\Psi = \cos(kx - \omega t)$, também não é solução.

* Mas

$$\boxed{\Psi = \cos(kx - \omega t) + i \operatorname{sen}(kx - \omega t)} \quad (B)$$

é solução. Vejamos

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -k \operatorname{sen}(kx - \omega t) + ik \cos(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \cos(kx - \omega t) - ik^2 \operatorname{sen}(kx - \omega t) = -k^2 \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \omega \operatorname{sen}(kx - \omega t) - i\omega \cos(kx - \omega t) = -i\omega \Psi$$

Subst na EQSCH, obtemos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi = \hbar\omega \Psi \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \rightarrow \text{que é (A)}$$

* Agora vamos entender por que:

(1) Na EQSCH aparece derivada primeira em relação a t e derivada segunda em relação a x pq na Eq (A) ω aparece linearmente e k ao quadrado.

(2) A sol é complexa pq derivada de seno leva a cosseno e vice-versa. Como uma das derivadas na EQSCH é de 1º ordem, somos obrigados a fazer a combinação complexa (B) para dar certo.

(3) o "i" no lado direito da EQSCH também é necessário para que a sol (B) seja de fato solução.

Reforço que não estamos "validando" a EQSCH, apenas apresentando alguns testes para tentar entendê-la um pouco. A EQSCH não pode ser deduzida, nem testada por argumentos teóricos. Ela é admitida como postulado, e os testes que a confirmam são as experiências. Ela produz resultados que são verificados experimentalmente.

* Limite de validade: a EQSCH é válida para partículas com velocidades não relativísticas.

* Ex 5.2. se $\Psi_1(x,t)$ e $\Psi_2(x,t)$ são sols da EQSCH (para um dado V) mostre que $\Psi(x,t) = C_1\Psi_1(x,t) + C_2\Psi_2(x,t)$ (combinação linear) tbem é sol.

Veja no livro.

* Ex 5.3. Mostre que

$$\Psi(x,t) = A\, e^{-\frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar}x^2}\, e^{-i\frac{1}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}t}$$

é sol para o oscilador harmônico (C = cte da mola).

Esta é a sol. para o estado de menor energia do Osc Harm. (Cap 6).

Faça as contas. É só derivar.

5.3 INTERPRETAÇÃO DE BORN PARA A FUNÇÃO DE ONDA

* Postulado de Born (1926)

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)$$

dá a densidade de probabilidade (probabilidade por comprimento) de encontrar a partícula no ponto x, no instante t.

$P(x,t)\,dx = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)\,dx$

dá a probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x+dx$, no instante t.

* Por que $\Psi^*\Psi$? Porque Ψ em geral é complexo, e P tem que ser real.

* A "lógica" do postulado. Já que Ψ governa a partícula, elas devem "andar juntas". Deve ser mais provável encontrar a partícula onde a onda é mais apreciável (onde $\Psi^*\Psi$ é maior).

* Analogia com a onda eletromagnética (OEM):

Dens energia $\propto \mathcal{E}^2$

$\Rightarrow$ densidade de fótons $\propto \mathcal{E}^2$

$\Rightarrow$ prob de encontrar um fóton $\propto \mathcal{E}^2$

* Em 3D,

$P(\vec{r},t) = \Psi^*(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t)$

$P(\vec{r},t)\,dV \rightarrow$ prob de encontrar a partícula no volume dV, centrado no ponto $\vec{r}$, no instante t.

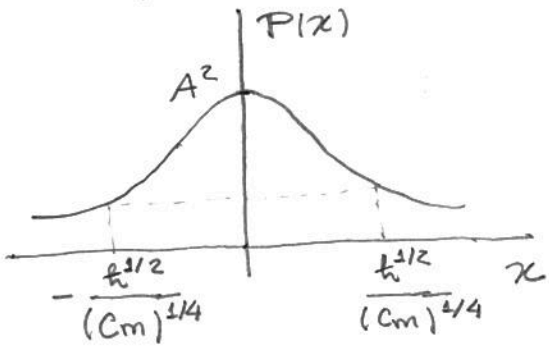
Ex. 5.5 Estado de menor energia do Osc Harm simples (sol. no Cap 6).

$$\Psi(x,t) = A e^{-\frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar}x^2} e^{-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}t}$$

Densidade de Probabilidade:

$$P = \Psi^* \Psi = A^2 e^{-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}x^2} \quad \rightarrow \text{supondo que } A \text{ é real.}$$

Note que P só depende de x: a dependência em t desapareceu.



$$x = \pm \frac{\hbar^{1/2}}{(Cm)^{1/4}} \Rightarrow P = e^{-1}A^2$$

O lugar mais provável de se encontrar a partícula é a origem ($x=0$).

Ex 5.6 Previsão clássica para o oscilador harmônico.

$$P = \frac{B'^2}{v}$$ (B'^2 é qqer cte positiva) → é mais provável encontrar a partícula onde ela fica mais tempo (passa mais devagar).

$$E = \frac{mv^2}{2} + \frac{Cx^2}{2} \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{Cx^2}{2}\right)} \rightarrow \text{módulo}$$

$$P = \frac{B'^2}{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{Cx^2}{2}\right)}} = \frac{B'^2}{\sqrt{\frac{C}{m}}\sqrt{\frac{2E}{C} - x^2}} = \frac{B^2}{\sqrt{\frac{2E}{C} - x^2}}$$

↳ A cte $\sqrt{C/m}$ pode ser embutida em B^2: $B^2 = \frac{B'^2}{\sqrt{\frac{C}{m}}}$

Os extremos do MHS são dados por

$$E = \frac{C x_m^2}{2} \Rightarrow x_m = \pm\sqrt{\frac{2E}{C}} \rightsquigarrow \text{amplitude}$$

B^2 pode ser calculado impondo que

$$\int_{-\sqrt{2E/C}}^{\sqrt{2E/C}} P(x)\,dx = 1 \Rightarrow B^2 \int_{-\sqrt{2E/C}}^{\sqrt{2E/C}} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2E}{C} - x^2}} = 1$$

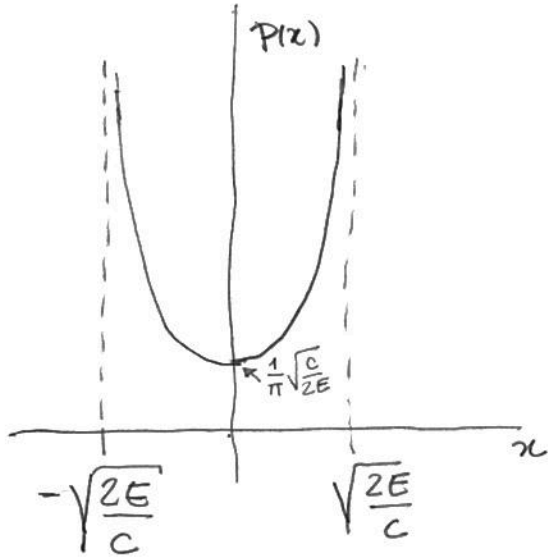
Usando o resultado

$$\int \frac{dx}{\sqrt{a^2 - x^2}} = \operatorname{sen}^{-1}\left(\frac{x}{a}\right),$$

$$B^2 \cdot \operatorname{sen}^{-1}\left(\frac{x}{\sqrt{2E/C}}\right)\Bigg|_{-\sqrt{2E/C}}^{\sqrt{2E/C}} = 1$$

$$B^2\left[\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right)\right] = 1 \Rightarrow B^2 = \frac{1}{\pi}$$

$$P(x) = \frac{1}{\pi}\,\frac{1}{\sqrt{\frac{2E}{C} - x^2}}$$



É mais provável encontrar a partícula próximo dos extremos. Muito diferente da previsão da Mec. Quântica.

Ex. 5.7 Normalização da função de onda do estado fundamental do Osc. Harm.

Vamos impor que

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

A partícula deve estar em algum lugar!

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}x^2}\,dx = 1$$

Usando

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

temos

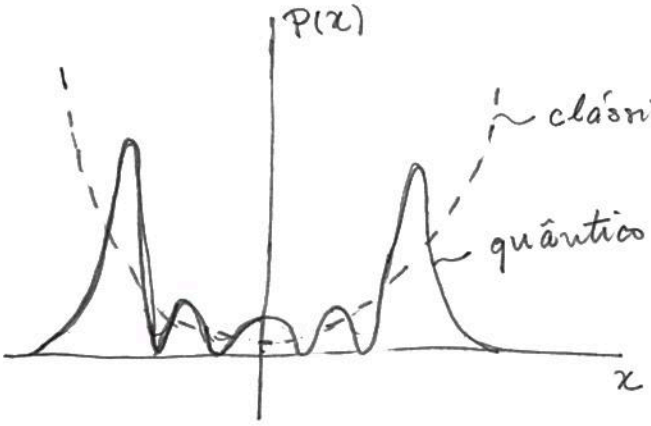
$$A^2\left(\frac{\pi\hbar}{\sqrt{Cm}}\right)^{1/2} = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}$$

A função de onda normalizada é

$$\Psi(x,t) = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}\, e^{-\frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar}x^2}\, e^{-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}t}$$

* Para saber que a partícula está neste estado, deveríamos ter realizado previamente uma medida de energia. Isso perturbaria o sistema, de forma que não poderíamos saber a posição exata da partícula. A função acima somente fornece informação estatística sobre a posição. Isso é o princípio da incerteza.

* Princípio da correspondência (de Bohr). Para sistemas macroscópicos (nºs quânticos grandes) os resultados clássico e quântico devem coincidir.



P(x) para n=4 do Osc Harm (Cap 6)

* Sobre a causalidade. Uma vez que a EQSCH só tem derivada 1º no tempo, ela é causal, no sentido que se $\Psi(x,0)$ for conhecida em $t=0$, $\Psi(x,t)$ será conhecida em qqer instante posterior t. Ocorre que $\Psi(x,0)$ não pode ser totalmente conhecida. Em geral, resultados de medidas de grandezas físicas dependem de $\Psi^*\Psi$, e não podem especificar Ψ completamente. Assim, a causalidade da EQSCH fica esvaziada!

5.4 VALORES ESPERADOS

* Valor esperado é uma média de uma série de medidas para sistemas idênticos (imaginários) descritos pela mesma função de onda.

* Valor esperado da posição

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

é uma média ponderada, onde $P(x)$ é o peso da medida x.

Para qq'er função $f(x,t)$, o valor esperado é dado por

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

Por exemplo, para $f(x) = x^2$,

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x^2\, \Psi(x,t)\, dx$$

* Valor esperado do momento.

Não é possível escrever p como função de x. Se fosse possível, poderíamos conhecer x e p ao mesmo tempo, o que violaria o princípio da incerteza.

* Para o caso particular de uma partícula livre,

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) = \hbar k \, \Psi(x,t) = p \, \Psi \quad \rightarrow \text{lembre-se que } p = \hbar k$$

Isso sugere a associação

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \rightarrow \text{operador momento}$$

Analogamente

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hbar\omega \, \Psi(x,t) = E \, \Psi(x,t),$$

o que sugere que

$$E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \rightarrow \text{operador energia.}$$

Se postularmos que essas associações são válidas no caso geral (não só para a partícula livre), a equação da mec. clássica

$$\frac{p^2}{2m} + V(x,t) = E$$

pode ser convertida na eq envolvendo operadores

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

Atuando esta eq na função de onda,

obtêm-se a EQ de Schrödinger. Assim, postular que

$$\boxed{p \longleftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} \quad \text{e} \quad \boxed{E \longleftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}$$

é equivalente a postular a EQSCH.

* O valor esperado do momento é dado por

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \Psi(x,t)\, dx$$

ou $$\boxed{\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}\, dx}$$

* Por que o operador vem no meio?

(1) Escrever

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi \frac{\partial}{\partial x}\, dx$$

não faz sentido. A derivada tem que atuar em alguma função.

(2)
$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^* \Psi]\, dx = -i\hbar \Psi^* \Psi \Big|_{-\infty}^{\infty}$$

Mas, para que tenhamos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi\, dx = 1, \longleftarrow \text{função de onda normalizada}$$

a integral tem que convergir. E ela só converge se

$$\Psi^* \Psi \to 0 \quad \text{quando} \quad x \to \pm\infty.$$

Assim, $\bar{p}$ seria sempre zero, o que não faz sentido.

* O valor esperado da energia é dado por

$$\bar{E} = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}\, dx$$

* No caso geral de uma grandeza que (classicamente) é função de x, p e t,

$$\overline{f(x,p,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, f_{op}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right) \Psi(x,t)\, dx$$

Por exemplo, a energia total é

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

de forma que

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\Psi(x,t)\, dx$$

O operador dentro do colchete é o operador energia total, que a EQSCH afirma que é igual a $i\hbar\,\partial/\partial t$. Assim, também podemos escrever

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)\right] dx$$

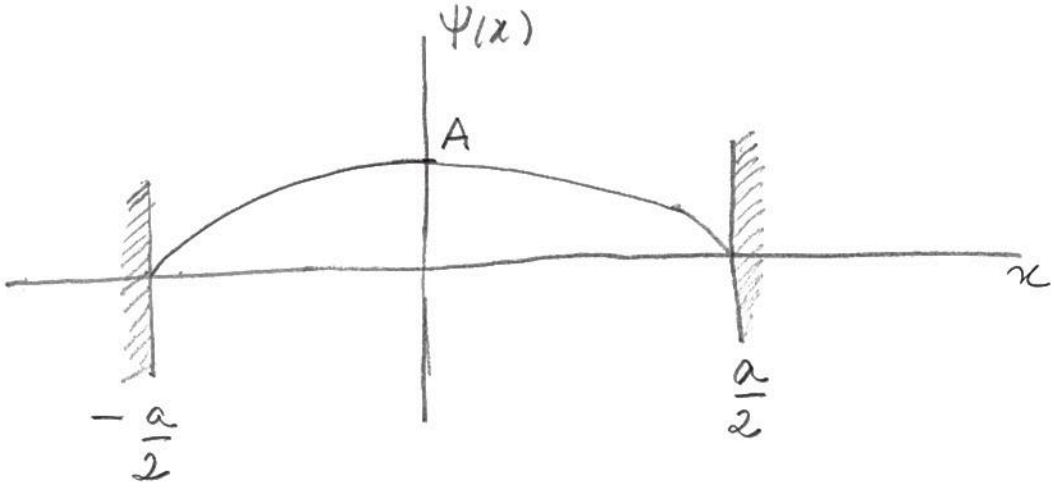
* Partícula livre em uma caixa 1D com paredes em $x = -a/2$ e $x = a/2$.

A função de onda do estado fundamental é dada por

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar} & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & x \leq -\frac{a}{2} \text{ ou } x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

se escrevermos $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$, temos

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0 & x \leq -\frac{a}{2} \text{ ou } x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$



Ex 5.9 Mostre que $\Psi(x,t)$ é sol da EQSCH e calcule E.

Dentro da caixa, $V = 0$. Assim

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 A\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} A\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi$$

Subst. na EQSCH,

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \Psi = i\hbar\left(-\frac{iE}{\hbar}\right)\Psi$$

Assim Ψ é realmente sol da EQSCH, desde que

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}}$$

* Normalização (Ex 5.10)

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

$$\Rightarrow A^2 \int_{-a/2}^{a/2} \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx = 1$$

A integral: seja $u = \frac{\pi}{a}x \rightarrow du = \frac{\pi}{a}dx$

$$I = \frac{a}{\pi}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 u\, du = \frac{a}{\pi}\frac{1}{2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}(1+\cos 2u)\,du$$

$$= \frac{a}{\pi}\cdot\frac{1}{2}\left(u + \frac{1}{2}\operatorname{sen} 2u\right)\Big|_{-\pi/2}^{\pi/2} = \frac{a}{\pi}\frac{\pi}{2} = \frac{a}{2}$$

$$A^2\frac{a}{2} = 1 \Rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar}} \qquad -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}$$

* Valores esperados (Ex 5.10)

(1) Posição:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi \, dx = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = 0$$

como o integrando é uma função ímpar de x e o intervalo é simétrico,

$$\boxed{\bar{x} = 0}$$

(2) Momento:

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar}$$

$$\bar{p} = i\hbar \frac{\pi}{a} \cdot \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

De novo, o integrando é ímpar e

$$\boxed{\bar{p} = 0}$$

(3) x^2:

$$\overline{x^2} = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} x^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

A integral: seja $u = \frac{\pi x}{a}$ $\Rightarrow$ $du = \frac{\pi}{a} dx$

$$\overline{x^2} = \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} u^2 \cos^2 u \, du$$

$$\int u^2 \cos^2 u\, du = \frac{u^3}{6} + \left(\frac{u^2}{4} - \frac{1}{8}\right)\operatorname{sen} 2u + \frac{u \cos 2u}{4}$$

↳ consultei uma tabela de integrais,

Substituindo os limites, obtemos

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} u^2 \cos^2 u\, du = \frac{\pi}{4}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right)$$

$$\overline{x^2} = \frac{2a^2}{\pi^3} \cdot \frac{\pi}{4}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) = \frac{a^2}{2\pi^2}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right)$$

$$\boxed{\overline{x^2} = 0{,}033\, a^2}$$

(4) p^2:

$$\overline{p^2} = (-i\hbar)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\, dx$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \Psi \quad \Rightarrow \quad \overline{p^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} \int_{-a/2}^{a/2} \Psi^* \Psi\, dx$$

$$\int_{-a/2}^{a/2} \Psi^* \Psi\, dx = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\overline{p^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2}}$$

Note que

$$E = \frac{\overline{p^2}}{2m}$$

como seria de se esperar para uma partícula livre (dentro de uma caixa 1D).

* Desvio médio quadrático: indica o quanto a grandeza desvia da média

$$\Delta x = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}} = \sqrt{\overline{x^2} - \overline{2x\bar{x}} + \bar{x}^2}$$

$$= \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$$

Δx pode ser interpretado como a incerteza no valor de x.

Para a partícula livre na caixa 1D,

$$\bar{x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta x = \sqrt{\overline{x^2}} = 0{,}18\, a$$

Analogamente

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \bar{p}^2} = \sqrt{\overline{p^2}} = \frac{\pi\hbar}{a}$$

* Relação de incerteza:

$$\Delta p\, \Delta x = \frac{\pi\hbar}{a} \times 0{,}18\, a = 0{,}57\,\hbar$$

está de acordo com

$$\Delta p\, \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

5.5 A EQSCH INDEPENDENTE DO TEMPO

Suponha que uma partícula esteja sujeita a uma energia potencial, $V(x)$, que seja independente do tempo. A EQSCH é

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

Esta Eq. admite sols da forma

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\,\varphi(t)$$

Vejamos:

$$\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = \varphi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

$$\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \psi(x)\frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Assim

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

Dividindo por $\psi(x)\varphi(t)$, temos

$$\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right\} = \frac{i\hbar}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Como o lado esquerdo só depende de x. e o lado direito só depende de t, ambos

devem ser iguais à mesma constante:

$$\frac{1}{\psi(x)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\right\}=G$$

$$\frac{i\hbar}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt}=G$$

* A equação temporal

$$\int\frac{d\varphi}{\varphi}=-\frac{iG}{\hbar}\int dt \quad\Rightarrow \ln\varphi=-\frac{iG}{\hbar}t+c_1$$

$$\varphi=e^{c_1}e^{-iGt/\hbar}$$

e^{c_1} é uma cte e pode ser absorvido na cte de normalização. Assim

$$\varphi(t)=e^{-iGt/\hbar}$$

* A cte de separação, G.

$$\varphi(t)=\cos\left(\frac{Gt}{\hbar}\right)-i\,\mathrm{sen}\left(\frac{Gt}{\hbar}\right)$$

$\varphi(t)$ é uma função oscilante com freq. angular $\omega=G/\hbar$. Para estar de acordo com a relação de Einstein, $E=\hbar\omega$, devemos ter $G=E$, de forma que

$$\boxed{\varphi(t)=e^{-iEt/\hbar}}$$

* Com $G = E$, a Eq. espacial torna-se

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

Esta Eq é chamada Equação de Schrödinger independente do tempo. As soluções $\psi(x)$ são chamadas autofunções.

* A função de onda $\Psi(x,t)$ é dada por

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

* A densidade de probabilidade é dada por

$$P(x) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)\psi(x) \equiv |\psi(x)|^2$$

Note que $P(x)$ não depende do tempo.

* Volte na pag 22 e note que a separação de variáveis não seria possível se V dependesse de x e t.

* Deve ficar claro que as funções na forma de variáveis separadas acima não são sols gerais da EQSCH. Elas são sols particulares. Uma sol geral é dada por uma combinação de sols particulares:

$$\Psi(x,t) = \sum_E C_E \, \psi_E(x) \, e^{-iEt/\hbar}$$

onde $\psi_E(x)$ é a sol da Eq. espacial para um dado E; os C_E's são constantes.

Se for feita uma medida de energia e o resultado for, por exemplo, E_1, a função de onda é $\Psi(x,t) = \psi_{E_1}(x) \, e^{-iE_1 t/\hbar}$, (sem o somatório). Ver final da pg 11.

5.6 PROPRIEDADES NECESSÁRIAS ÀS AUTOFUNÇÕES

* Nos cálculos de valores esperados aparece $\Psi(x,t)$ e $\partial\Psi(x,t)/\partial x$. Assim Ψ e sua derivada devem ser finitas e unívocas (bem definidas). Para isso,

> $\psi(x)$ e $\dfrac{d\psi(x)}{dx}$ devem ser finitas e unívocas

* Para que $d\psi(x)/dx$ seja finita,

> $\psi(x)$ deve ser contínua

* Da EDSCH espacial, podemos escrever

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi(x)$$

Se $V(x)$, E e $\psi(x)$ são finitos,

$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ deve ser finita

e portanto,

$\frac{d\psi(x)}{dx}$ deve ser contínua

* Como veremos no próximo capítulo, a imposição das exigências para as auto-funções resulta na quantização da energia e de outras propriedades.
* Em alguns problemas idealizados (de livro) algumas das propriedades mencionadas aqui podem não ser observadas. Por exemplo, se $V(x) = \alpha\,\delta(x)$, $d^2\psi(x)/dx^2$ seria infinita em $x=0$, e $d\psi(x)/dx$ seria descontínua.

Lista de exercícios: 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 18.

não precisa fazer