função de onda e probabilidade (§41.6)

Com o princípio de incerteza, vimos que não será mais possível indicar a posição e o momento de uma partícula simultaneamente. Assim a noção de trajetória perde sentido.

No lugar disto, uma função, chamada FUNÇÃO DE ONDA $\Psi(x,t)$ será associada a uma partícula, da mesma maneira a onda numa corda é representada por uma função $y(x,t)$.

Mas enquanto o significado físico de $y(x,t)$ é concreto (deslocamento de y de um pedaço de corda em x no instante t), o significado físico de $\Psi(x,t)$ é menos intuitivo.

Em 1926, Max Born (não Bohr!) postulou:

$|\Psi|^2 dV \equiv \Psi^* \Psi \, dV \propto$ proporcional a probabilidade de encontrar a partícula em dV

Precisamente, escolhendo Ψ tal que

$$\int |\Psi|^2 dV = 1$$

(dizemos que Ψ é normalizado)

temos

$$\boxed{|\Psi|^2 dV = \text{proba. de encontrar a partícula em } dV \ (\text{p/ } \Psi \text{ normalizado})}$$

[$|\Psi|^2$ função de distribuição de probabilidade]

A justificativa para este postulado pode ser feita assim. O movimento da partícula é associada à propagação da onda (cf. de Broglie) de modo que deve ter uma conexão espacial entre elas: a partícula deve se encontrar em algum lugar onde a amplitude de Ψ é substancial. Por razões matemáticas ou físicas, a proba. de estar em dV não pode ser $\Psi \, dV$, $|\Psi| \, dV$ etc, mas $|\Psi|^2 dV$ funciona.

O Princípio da incerteza é a razão pela qual temos que falar em probabilidade, não em "certeza".

Em 1 dimensão: $\Psi = \Psi(x,t)$ $\qquad d\tau = dx$

3 dimensões: $\Psi = \Psi(x,y,z,t)$ $\qquad d\tau = dx\,dy\,dz$.

A função de onda contem todas as informações para calcular as propriedades da partícula, por ex.

$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\Psi|^2 dx$: valor esperado de x.

mais geralmente:

$$\boxed{\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,|\Psi|^2 dx : \text{valor esperado de } f \text{ (não depende de } x)}$$

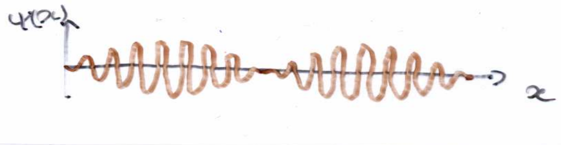
Em certos casos (por ex. um elétron num estado de energia dado em um átomo) $|\Psi|^2$ não depende do tempo. Dizemos que a partícula está num estado estacionário. Exemplo: $\Psi(x,t) = \psi(x)\,e^{-i\omega t}$.
(ψ só depende de x)

Função de onda da partícula livre

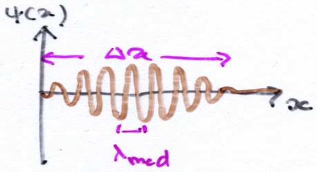
Supomos p fixo. A onda tem $\lambda = h/p$. Mas $\Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$ (Princípio da incerteza). Tal estado pode ser representado por uma onda senoidal, sem início nem fim, é estacionária

: não é uma representação muito boa de uma partícula em geral

Se fizermos a superposição de 2 ondas deste tipo com λ's ligeiramente diferentes:



Fazendo a superposição de um grande número de ondas senoidais, podemos obter:



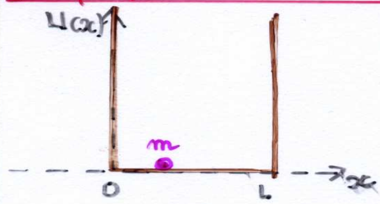
$$\psi(x) = \int_0^{\infty} A(\lambda) \cos \frac{2\pi}{\lambda} x \, d\lambda$$

(integral de Fourier = generalização da "série de Fourier")*

Este pulso ondulatório se chama pacote de onda. Ele representa uma partícula livre localizada em algum ponto de Δx e com momento conhecido com $\Delta p \neq 0$.

* Qualquer função "bem comportada" pode ser escrita como soma de cos e sen, de modo que basta estudar os cos e sen.

Função de onda de uma partícula numa caixa (ou poço de altura infinita) (§42.2)



Classicamente a partícula vai e vem entre as "paredes" localizadas em $x=0$ e $x=L$, conservando sua energia E.* Qualquer valor de E, inclusive zero é possível. A probabilidade de encontrar a partícula em qualquer ponto entre 0 e L, não depende do ponto (pois como a velocidade é constante, a partícula passa o mesmo tempo em qualquer x).

[* Fisicamente atua uma força $F = -dU/dx = \infty$ em 0 e L. Isto por exemplo representa um elétron ao longo de uma molécula retilínea]

Quanticamente, a descrição é diferente.

E e $|\vec{p}|$ não dependem do tempo

$\Rightarrow |\Psi|^2$ não depende do tempo

$\Rightarrow$ basta estudar $\psi(x)$ $\quad (|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2)$

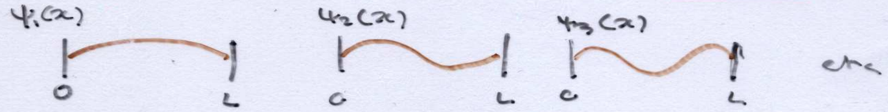
Como $|\vec{p}|$ é bem definido, a discussão anterior sugere usar $\psi(x) = A \operatorname{sen} kx$ para $0 \leq x \leq L$ com $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ e $\lambda = \frac{h}{p}$

Esperamos $\psi(x=0)=0$ e $\psi(x=L)=0$ (e $\psi(x)=0$ se $x<0$ ou $>L$). Assim a probabilidade de achar a partícula fora da caixa é nula.

Com $\psi(x) = A \operatorname{sen} kx$ temos $\psi(x=0)$ automaticamente.
$\psi(x=L) = A \operatorname{sen} kL = 0 \iff kL = n\pi$ com $n=1,2,3$ etc.

$$\iff k = \frac{n\pi}{L} \iff \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{n}$$

Assim:
para satisfazer $\psi(x=L)=0$, precisa $\underline{\underline{n\frac{\lambda}{2} = L}}$



Podemos normalizar estas funções de onda:

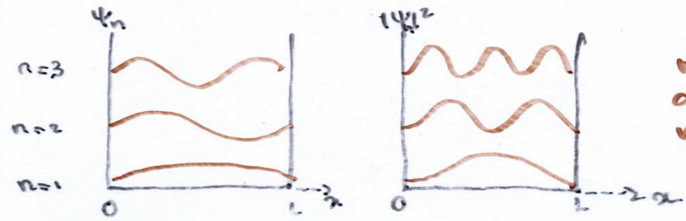
$$1 = \int |\psi_n(x)|\, dx = A^2 \int_0^L \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{L}\, dx = \frac{A^2}{2}\int_0^L \left[1 - \cos 2\frac{n\pi x}{L}\right] dx = \frac{A^2 L}{2}$$

$$\iff A = \sqrt{2/L} \implies \boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, \operatorname{sen} \frac{2n\pi x}{L}}$$

A propabilidade de encontrar a partícula num certo dx em torno de x é:

$$|\psi|^2 dx = \frac{2}{L} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{L}\, dx$$

isto depende de x e pode ser nulo em certos pontos contraramente ao caso clássico.



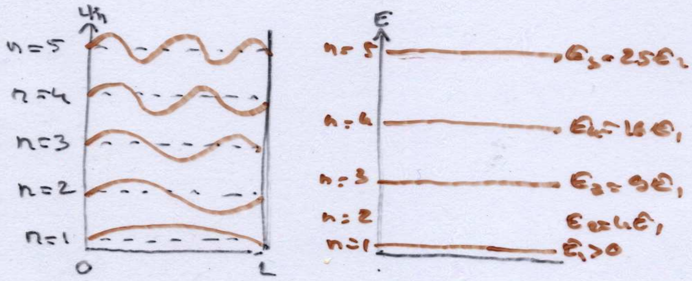
Se $n \to \infty$, ψ_n oscila muito $\Rightarrow |\psi_n|^2$ não depende de x, como no caso clássico.

Cada uma destas funções de onda corresponde a uma energia bem definida da partícula.

$$\boxed{E_n} = \frac{p^2}{2m} = \left(\frac{h}{\lambda_n}\right)^2 \frac{1}{2m} = \left(\frac{nh}{2L}\right)^2 \frac{1}{2m} = \boxed{\frac{n^2h^2}{8mL^2} \qquad n=1,2\ldots}$$

Assim quanticamente só certas energias são permitid e a menor delas, $E_1 > 0$. Isto significa que a partícula não pode estar em repouso entre 0 e L. (Isto é esperado na base do princípio de incerteza.)

Para n grande, $\frac{E_{n+1}-E_n}{E_n} = \frac{1}{n^2}\left[(n+1)^2-n^2\right] \to 0$ i.e. as energias não parecem discretas.



Obs:

Ondas confinadas de qualquer tipo apresentam discretização das frequências e energias.

A maneira sistemática de obter funções de ondas e energias é resolvendo uma equação, chamada equação de Schrödinger.

2010

Questão 3

Um estado quântico de uma partícula com energia E é descrito pela função de onda normalizada

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp(-iEt/\hbar).$$

(a) (1,0 ponto) Qual é o significado de $|\Psi(x, y, z, t)|^2$? O estado considerado é estacionário? Justifique.

(b) (0,5 ponto) Num átomo de hidrogênio, sejam

$$\Psi_{1s} = \psi_{1s} \exp(-iE_1 t/\hbar) \quad \text{e} \quad \Psi_{2p} = \psi_{2p} \exp(-iE_2 t/\hbar)$$

as funções de onda do orbital $1s$ e um dos orbitais $2p$. De acordo com os postulados de Bohr, qual é a frequência f do fóton emitido quando o elétron efetua uma transição do orbital $2p$ para o orbital $1s$?

(c) (1,0 ponto) A função de onda do estado fundamental do hidrogênio é dada por

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0},$$

onde r é a distância ao núcleo e a_0 é o raio de Bohr. Calcule a probabilidade do elétron ser encontrado a uma distância do núcleo maior do que a_0.

Dado: $\int x^2 e^{-x} dx = -(x^2 + 2x + 2)e^{-x}$.

7

2006

Questão 2

Considere um elétron de carga $-e$ que se move num potencial coulombiano nuclear de carga $+Ze$ ($Z = 1$ para o átomo de hidrogênio, $Z = 2$ para o átomo de Hélio uma vez ionizado, etc.). A função de onda do elétron no estado fundamental é dada por

$$\psi(r) = Ce^{-Zr/a_0},$$

onde a_0 é o raio de Bohr.

(a) (1,0 ponto) Determine a constante C de modo que a função de onda seja normalizada.

(b) (1,0 ponto) Calcule a probabilidade de se encontrar o elétron a uma distância maior que a_0/Z do núcleo.

(c) (0,5 pontos) Calcule o valor esperado (ou valor médio) da coordenada radial $\langle r \rangle$.

Dados:

$$\int x^2 e^{-x} dx = (-x^2 - 2x - 2)e^{-x}\,, \qquad \int x^3 e^{-x} dx = (-x^3 - 3x^2 - 6x - 6)e^{-x}$$

8