Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 24 -

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 114
rizzutto@if.usp.br

1o. Semestre de 2014
Monitor: Gabriel M. de Souza Santos

Página do curso:
http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=2905

06/06/2014

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em uma caixa V(x) = 0 (poço infinito)”

Exemplo seria uma molécula

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

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

para n=1,3,5,...

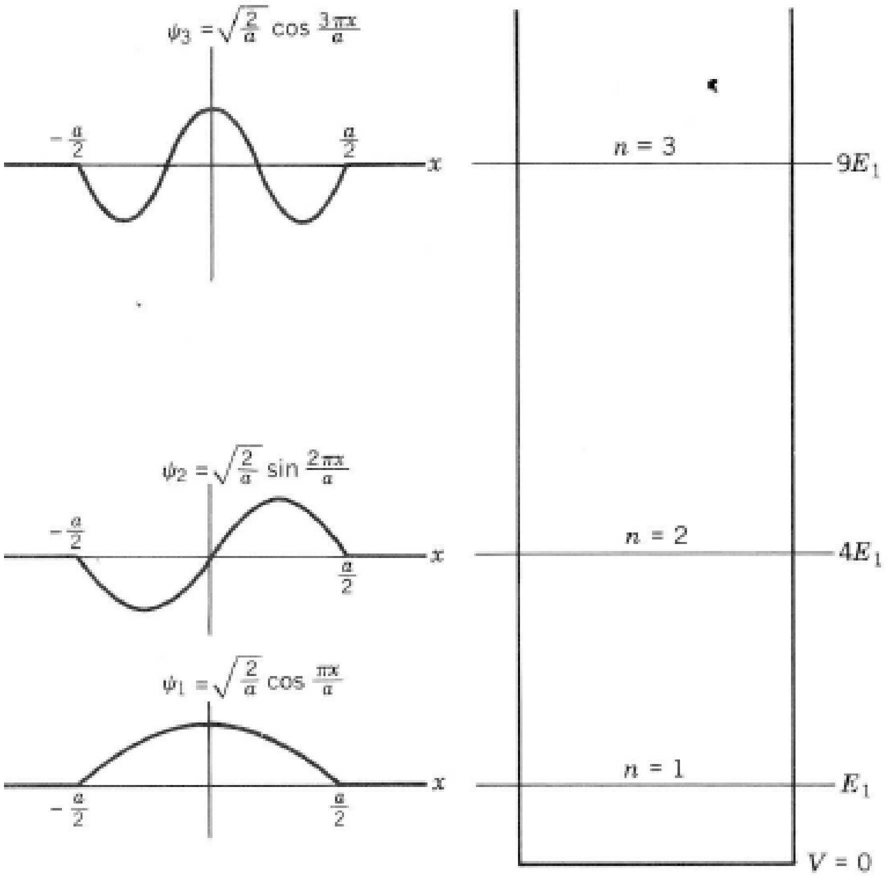
$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot sen\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

para n=2,4,6,...

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

para n=1,2,3,4,...

$$E = \frac{h^2}{8ma^2}n^2$$

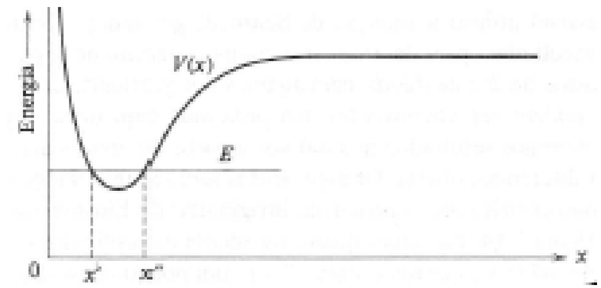


A menor energia possível não é zero!

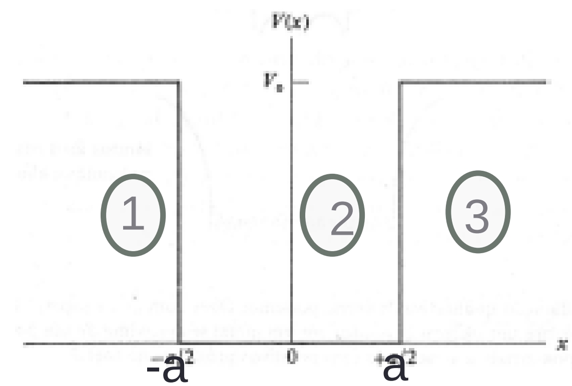
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

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



- Uma situação mais realista do que o poço infinito
- Potencial representaria uma partícula presa (chamado estado ligado:
  - nêutron em um estado ligado no núcleo
  - Elétron em um átomo e que pode se desprender (átomo ionizado)



$$V(x) = \begin{cases} Vo & x < -a \quad \text{região 1} \\ 0 & -a < x < a \quad \text{região 2} \\ Vo & x < -a \quad \text{região 1} \end{cases}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

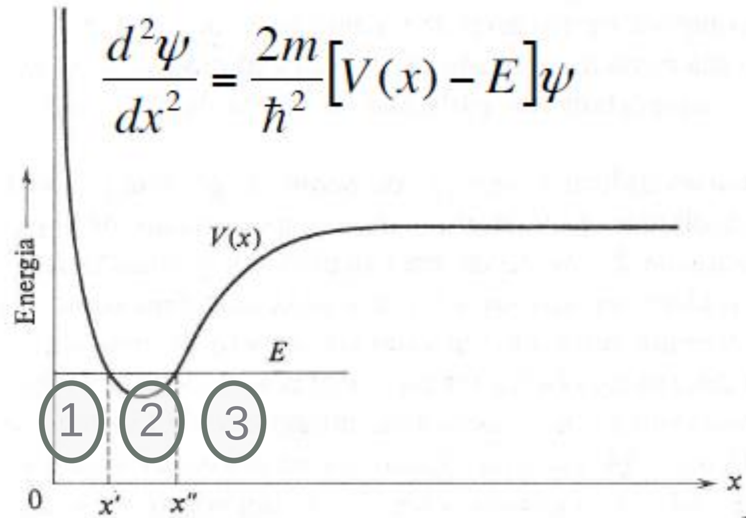
"Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger"

Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

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

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

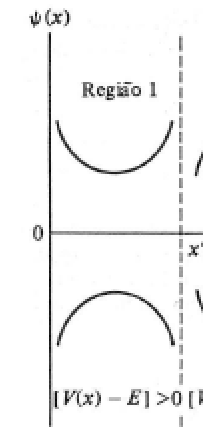
$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x)-E\right]\psi$$



1) V(x) > E: temos que $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ **tem mesmo sinal de** $\psi(x)$

Se $\psi(x)>0$ **concavidade é voltada para cima (côncava)**

Se $\psi(x)<0$ **concavidade é voltada para baixo (convexa)**



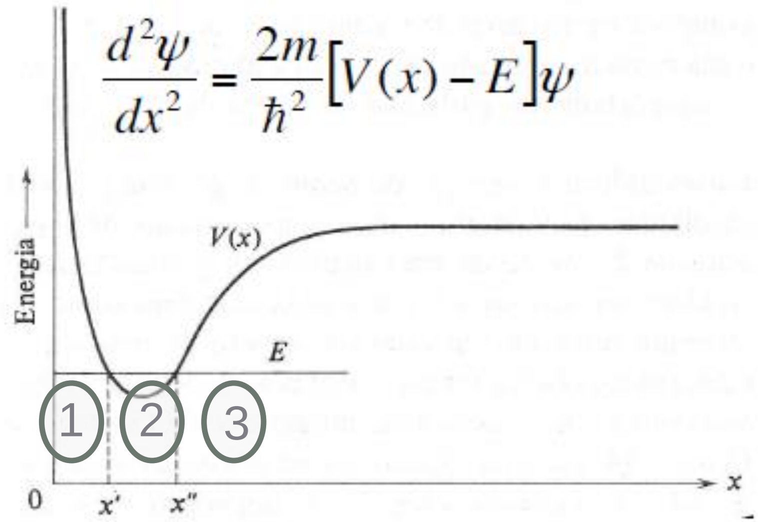
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

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

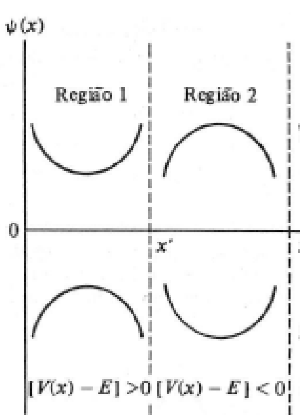
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x)-E\right]\psi(x)$$



2) V(x) < E: temos que $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ **tem sinal contrário** $\psi(x)$

Se $\psi(x)<0$ **concavidade é voltada para baixo**

Se $\psi(x)>0$ **concavidade é voltada para cima**



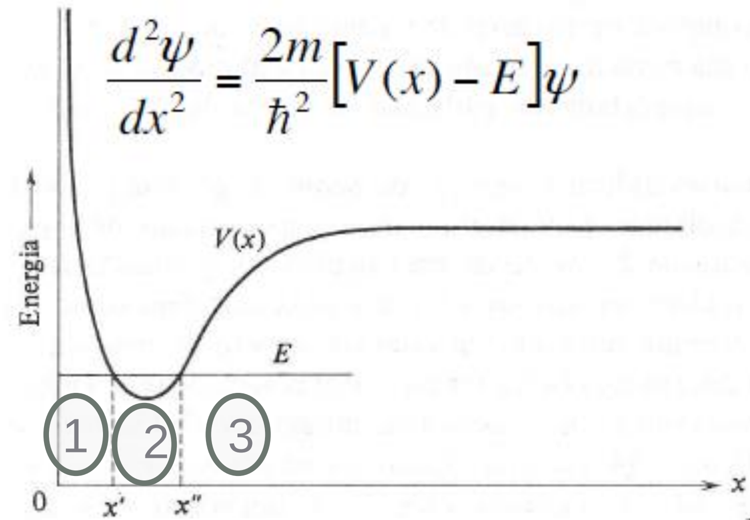
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger"

Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

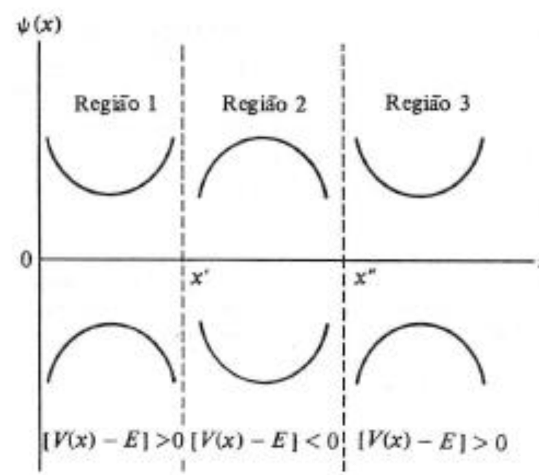
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

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



3) V(x) > E: temos que $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$

tem mesmo sinal $\psi(x)$



Temos certos valores de energia como solução para essa equação

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

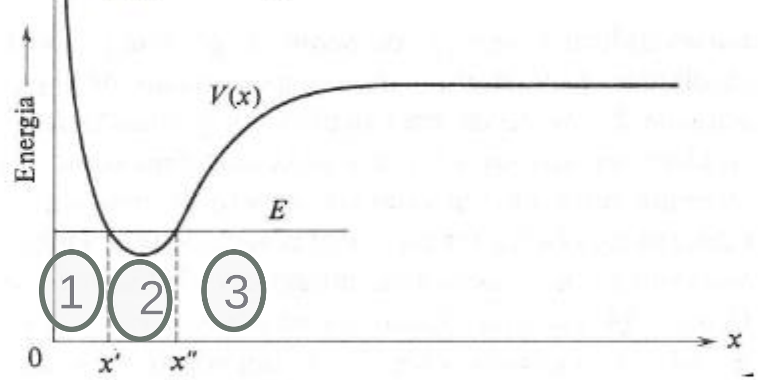
“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

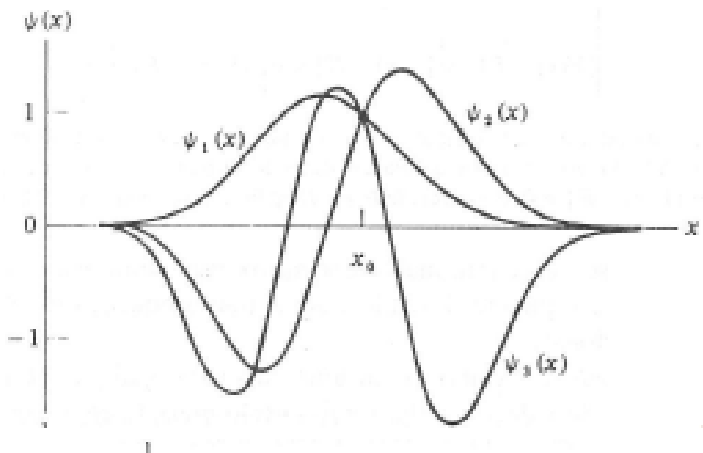
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

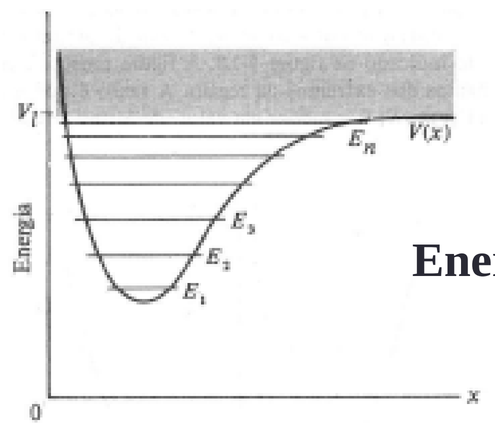
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x)-E\right]\psi(x)$$

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



Temos certos valores de energia como solução para essa equação





Energia quantizada

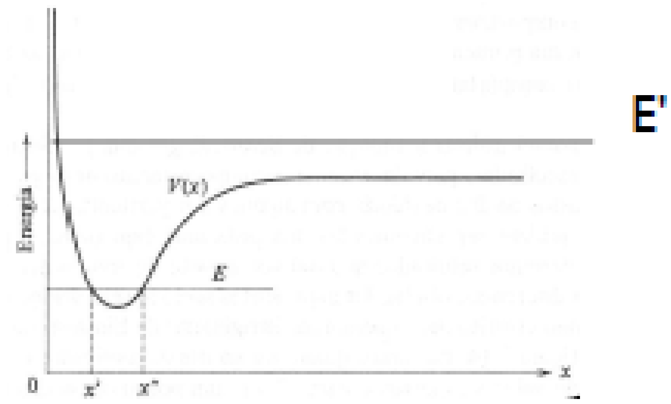
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

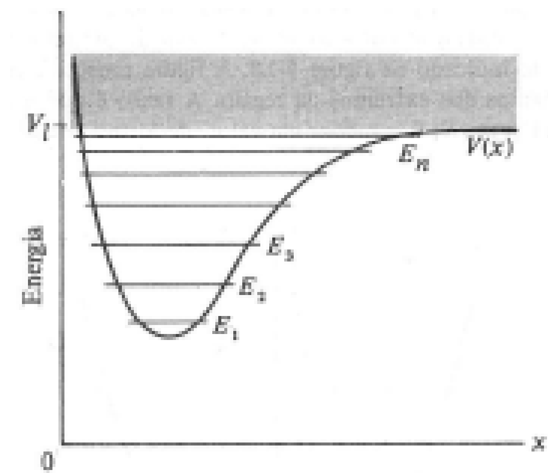
Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

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

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



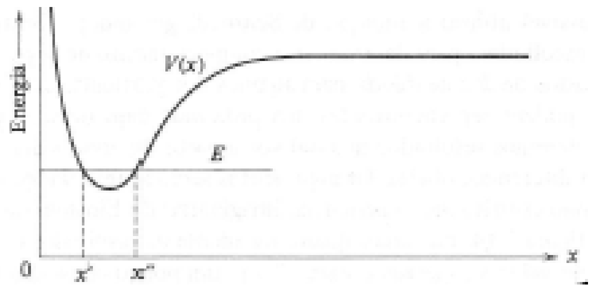
Quando E > V(x) para qualquer valor de x> x´ é possível encontra uma solução para $\psi(x)$ **para qualquer valor de energia, formando uma distribuição continua de valores de energia do sistema**



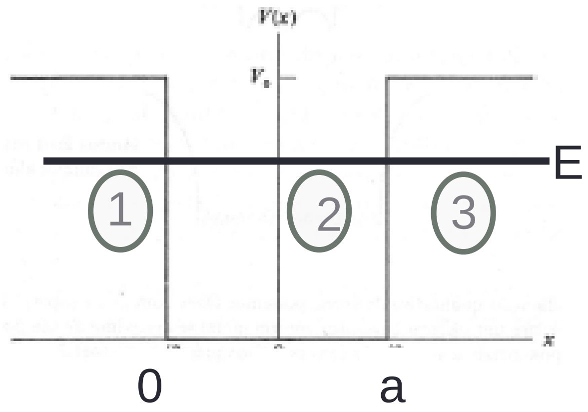
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V_0\psi(x)=E\psi(x)$$



- Uma situação mais realista do que o poço infinito
- Potencial representaria uma partícula presa (chamado estado ligado:
  - nêutron em um estado ligado no núcleo
  - Elétron em um átomo e que pode se desprender (átomo ionizado)



$$V(x)=\begin{cases} \text{Vo} & x<0 & \text{região 1} \\ 0 & 0<x<a & \text{região 2} \\ \text{Vo} & x>a & \text{região 3}\end{cases}$$

Região 1 e 3

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi(x) \qquad k_1=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

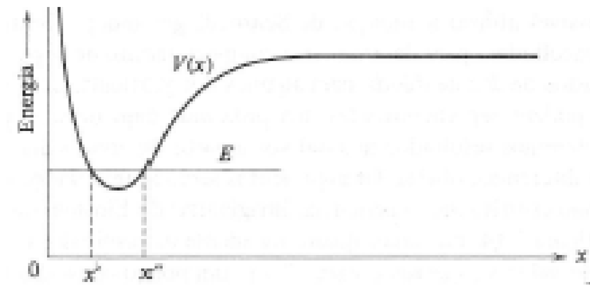
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=k_1{}^2\psi(x)$$

$$\psi_1(x)=Ae^{k_1x}+Be^{-k_1x} \qquad \psi_3(x)=Fe^{k_1x}+Ge^{-k_1x}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

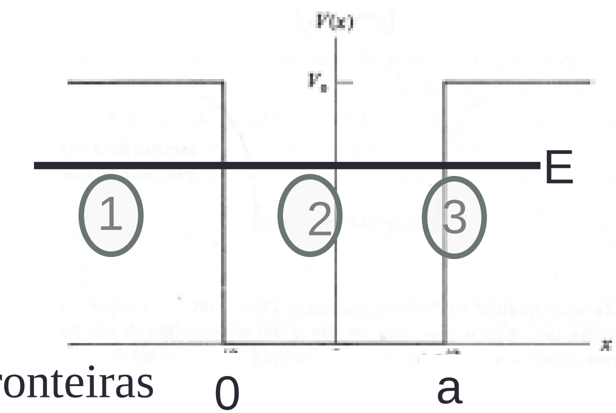
$$V(x)=\begin{cases} V_o & x<0 & \text{região 1} \\ 0 & 0<x<a & \text{região 2} \\ V_o & x>a & \text{região 3} \end{cases}$$



Região 2 – dentro do poço

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) \qquad k_2=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x)=Csenk_2x+D\cos k_2x$$



Aqui não conseguimos exigir que a função de onda se anule nas fronteiras

$$\psi_1(x)=Ae^{k_1x}+Be^{-k_1x} \qquad \psi_3(x)=Fe^{k_1x}+Ge^{-k_1x}$$

1) Condição de finitude

$$x\to\infty,\psi(x)\to 0$$

$$x\to-\infty,\psi(x)\to 0$$

F=0

B=0

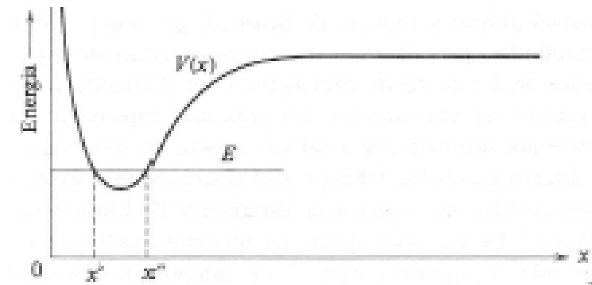
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

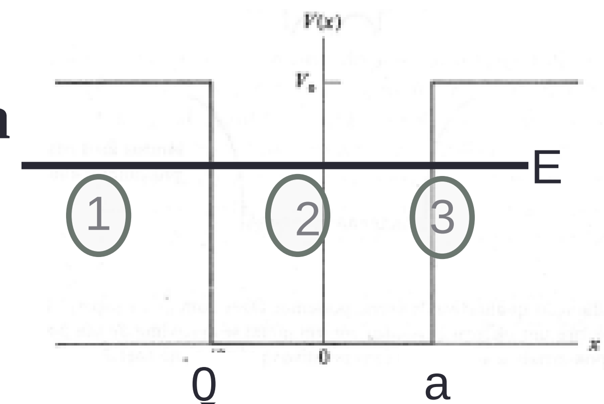
$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ Região 3

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$



$$\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}\,k_2 x + D\cos k_2 x$$ Região 2

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$\psi_{1(x=0)} = \psi_{2(x=0)}$$

$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_{2(x=a)} = \frac{d}{dx}\psi_{3(x=a)}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

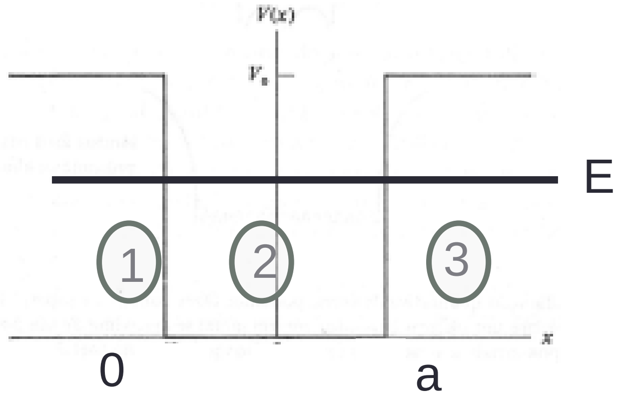
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ Região 3

$$\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}\,k_2 x + D\cos k_2 x$$ Região 2

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



2) Condição de continuidade a função

$$\psi_{1(x=0)} = \psi_{2(x=0)}$$

$$Ae^0 = C\,\mathrm{sen}\,0 + D\cos 0$$

$$\boxed{A = D}$$

$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

$$C\,\mathrm{sen}\,k_2 a + D\cos k_2 a = Ge^{-k_1 a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

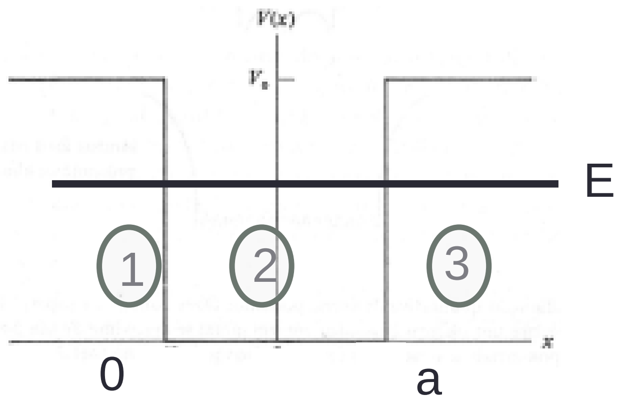
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x} \quad \text{Região 3}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = C\,sen k_2 x + D\cos k_2 x \quad \text{Região 2}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



2) Condição de continuidade da derivada da função

$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

$$k_1 A = Ck_2\cos 0 - Dk_2 sen 0$$

$$\boxed{k_1 A = Ck_2}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_{2(x=a)} = \frac{d}{dx}\psi_{3(x=a)}$$

$$Ck_2\cos k_2 a - Dk_2 sen k_2 a = -k_1 G e^{-k_1 a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

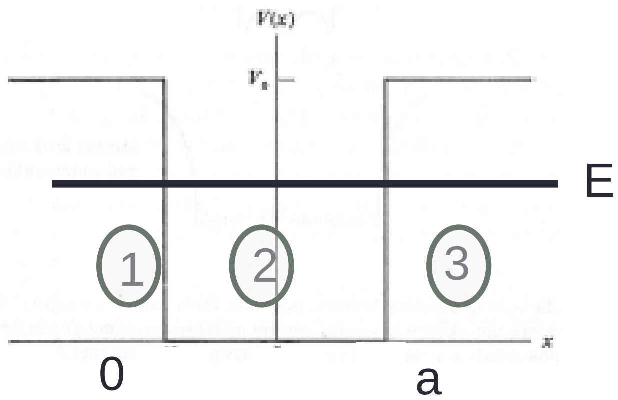
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ Região 3

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Csenk_2 x + D\cos k_2 x$$ Região 2

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



$$\boxed{A = D}$$

$$\boxed{k_1 A = Ck_2}$$

$$Csenk_2 a + D\cos k_2 a = Ge^{-k_1 a}$$

$$Ck_2 \cos k_2 a - Dk_2 senk_2 a = -k_1 Ge^{-k_1 a}$$

$$\boxed{\frac{k_1}{k_2} = \frac{C}{D}}$$

$$\frac{\frac{k_1}{k_2}\cos k_2 a - senk_2 a}{\frac{k_1}{k_2} senk_2 a + \cos k_2 a} = \boxed{-\frac{k_1}{k_2}}$$

Isto esta relacionado a profundidade do poço (Vo) e com a largura do poço (a)
E esta relação só pode ser satisfeita para certos valores de E. A solução não pode ser resolvida explicitamente para E. Deve ser obtida pelo método geométrico.