Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 26 -

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

13/06/2014

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula sujeita ao potencial dos oscilador harmônico simples”
É muito importante na física pois é um modelo de qualquer sistema que envolva oscilações:

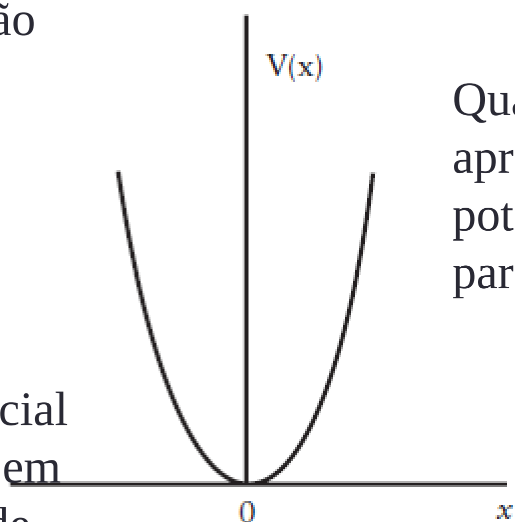
- **Vibração de uma molécula em gases e sólidos**
- **Moléculas diatômicas**
- **Átomos na estrutura cristalina**
- **Partículas no núcleo atômico**

Partícula sujeita a uma força de restauração F=-Kx
Cuja energia potencial é:

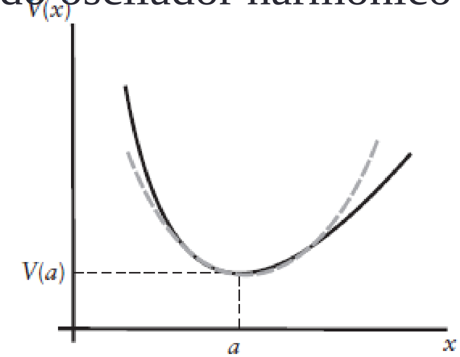
$$V(x)=\frac{1}{2}Kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2 x$$

Frequência angular de vibração

$$\omega=\left(\frac{K}{m}\right)^{1/2}=2\pi f$$



Quanticamente sempre podemos aproximar o ponto de equilíbrio de um potencial qualquer, V(x), pelo potencial parabólico do oscilador harmônico

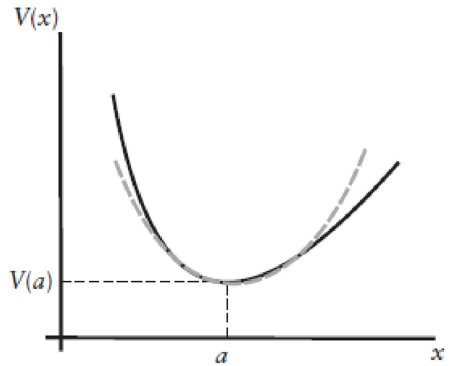


Classicamente temos um potencial deste tipo onde a partícula fica em equilíbrio na origem (x=0), onde V(x) é mínimo e a força é nula

$$F_x=-\frac{dV}{dx}=0$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Em torno do ponto x=a temos que V(x) tem um mínimo



$$\frac{d^2V}{dx^2} > 0$$ No ponto de equilíbrio estável

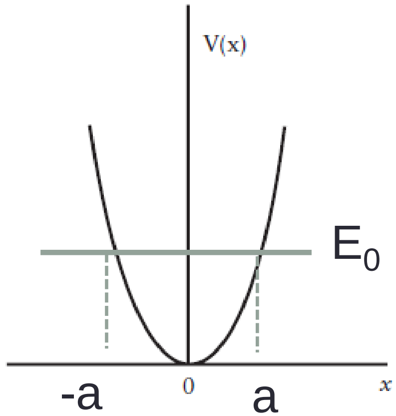
$$\frac{d^2V}{dx^2} < 0$$ No ponto de equilíbrio instável

Próximo ao ponto de equilíbrio estável (como a), V(x) pode ser ajustada a uma parábola

Equação de Schrödinger

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

Queremos estudar agora a descrição quântica quando a partícula é afastada da posição de equilíbrio passa a oscilar entre x=-a e x=a



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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

Vamos analisá-la antes de resolve-la

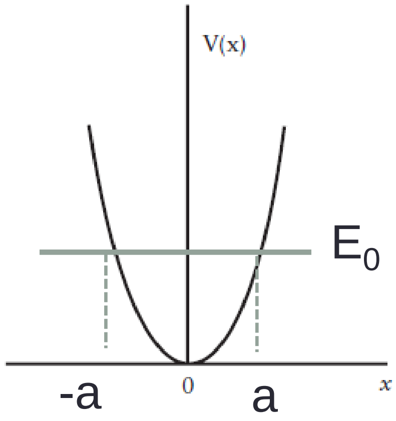
Como a partícula está confinada dentro do potencial pelas paredes, centrada em x=0, eu tenho zero probabilidade de encontra-la em x=infinito

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

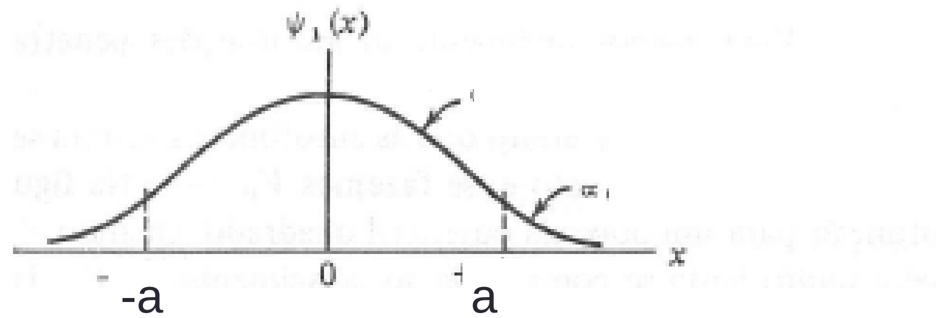
Sobre a energia:
Energia pode ser zero? Se E=0 então em x=0 V=0 então Ec=0
Mas se x=0 e p=0 o princípio de incerteza é violado já que conheço exatamente a posição e momento

$$E\neq 0$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



Sabemos que a função de onda não é zero em x= +a ou em x = -a, há uma pequena probabilidade de encontrar a partícula fora dos paredes do potencial,
A função de onda decai rapidamente para zero do outro lado da barreira

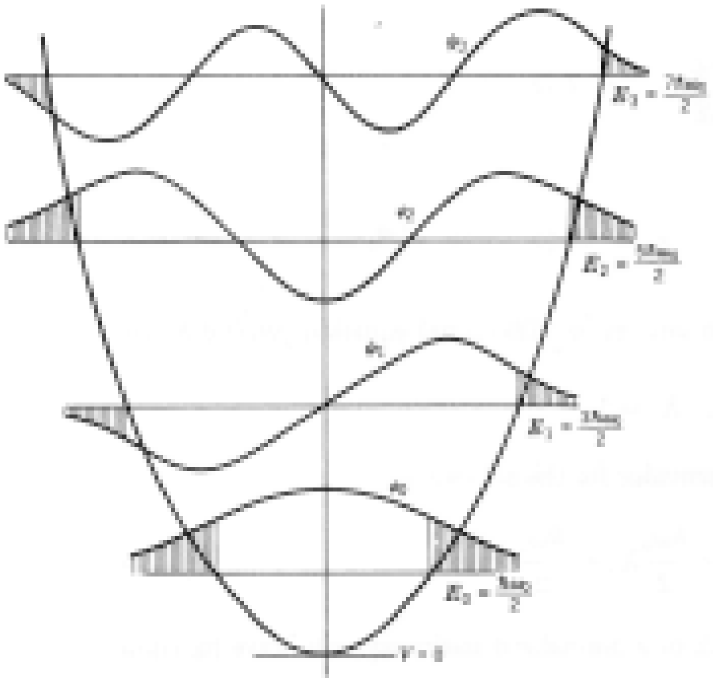


$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{C}{2}x^2\psi(x)=E\psi(x) \qquad \beta^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

x<<<0 próximo do equilíbrio

$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\beta^2\psi(x) \qquad \psi(x)=A\cos\beta x+A\,\mathrm{sen}\,\beta x}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



$$E_n = (n + 1/2)h\nu \qquad \text{n=0,1,2,3....}$$

Podemos escrever a solução da função de onda como:

$$\psi_n(x) = H_n[u(x)]e^{-\frac{u(x)^2}{2}}$$

$$u(x) = \left[\frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}\right]x$$

Onde H_n são polinômios de ordem n, com n>=0

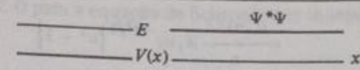
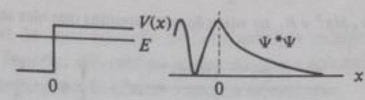
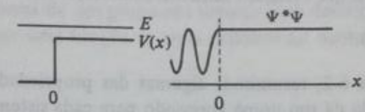
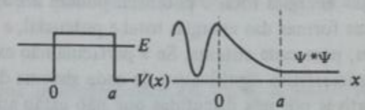
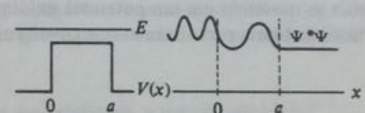
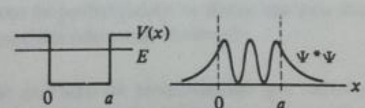
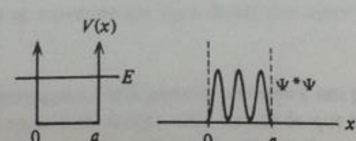
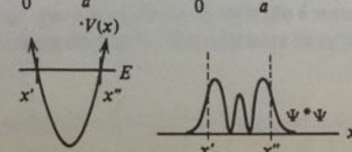
As funções H_n são relacionadas aos polinômios de Hermite que são tabelados tabulado

$$H_0[u(x)] = 1$$
$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$
$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$
$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$

$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}} \qquad \psi_2 = A_2(1 - 2u^2)e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_1 = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}} \qquad \psi_3 = A_3(3u - 2u^3)e^{-\frac{u^2}{2}}$$

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

Nome do Sistema	Exemplo Físico	Energias Total e Potencial / Densidade de Probabilidade	Característica Significativa
Potencial nulo	Próton em um feixe de um cíclotron		Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal		Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo		Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula α tentando escapar de barreira coulombiana		Efeito túnel
Barreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados		Nenhuma reflexão em certas energias
Poço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo		Quantização da energia
Poço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa		Aproximação para um poço de potencial finito
Potencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando		Energia de ponto zero

Equação de Schrödinger em três dimensões

Até o momento com consideramos apenas uma dimensão (x)
Na realidade para o sistema físico temos 3 dimensões

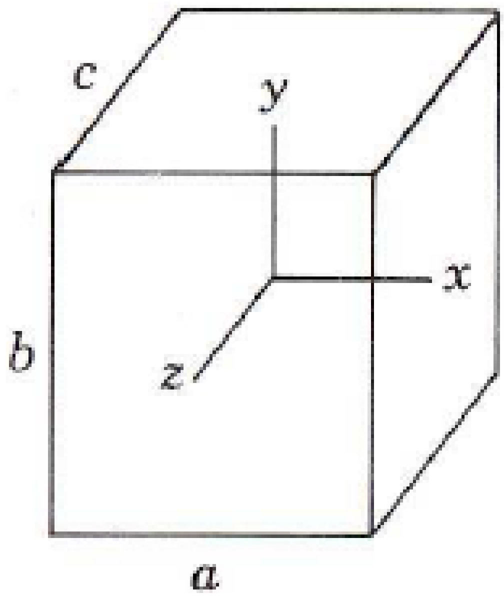
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Podemos fazer separação de variáveis:

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

Partícula em uma caixa retangular



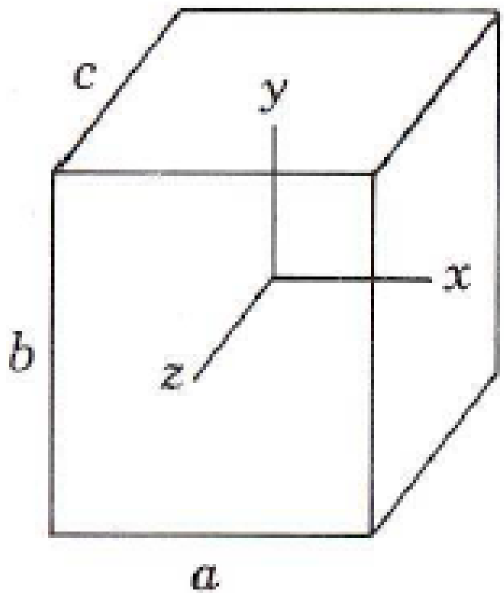
- Vamos considerar uma partícula livre "presa" em uma caixa retangular
- Este problema é equivalente ao poço infinito, porém em três dimensões

$$\psi_n(x) = A\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right), A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

n=1,3,5...

$$\psi(x) = \sqrt{2/a}\sqrt{2/b}\sqrt{2/c} \cdot cos\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \cdot cos\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right) \cdot cos\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right)$$

Partícula em uma caixa retangular



- Vamos considerar uma partícula livre "presa" em uma caixa retangular
- Este problema é equivalente ao poço infinito, porém em três dimensões

$$\psi_n(x) = A sen\left(\frac{n\pi}{a}x\right), A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

n=2,4,6....

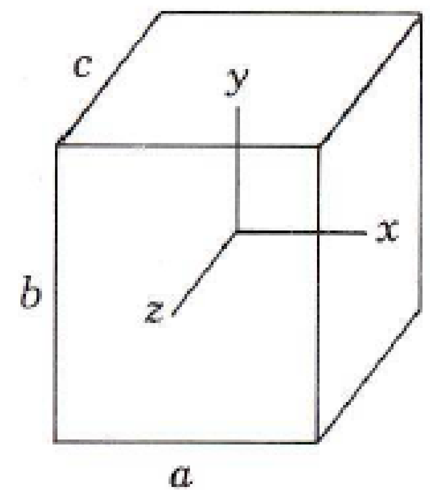
$$\psi(x) = \sqrt{2/a}\sqrt{2/b}\sqrt{2/c} \cdot sen\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \cdot sen\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right) \cdot sen\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right)$$

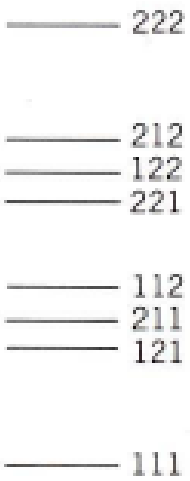
Partícula em uma caixa retangular

Temos a quantização de energia

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

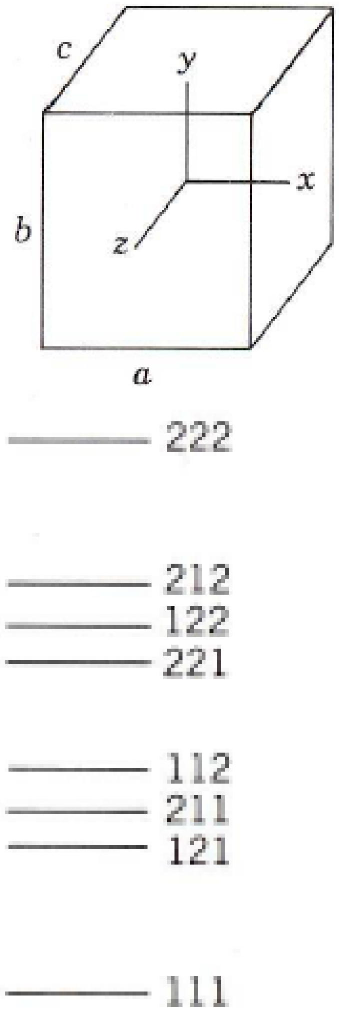
$$E = E_{n1} + E_{n2} + E_{n3}$$

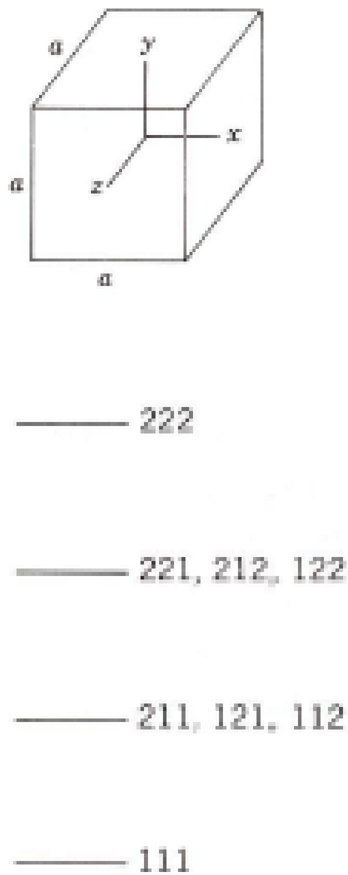




$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

Partícula em uma caixa retangular





Porém, se os lados do retângulo forem iguais, isto é, existir uma **simetria** no problema, diferentes combinações de números quânticos (n_1 , n_2 , n_3) podem levar ao mesmo valor de energia

degenerescência