Física Moderna I
Aula 16

Marcelo G Munhoz
Edifício HEPIC, sala 202, ramal 916940
munhoz@if.usp.br

Equação de Schroedinger em três dimensões

- Até o momento, consideramos apenas uma dimensão (x) para a equação de Schroedinger
- Obviamente, esta é apenas uma aproximação, pois sistemas físicos reais devem ser tratados em 3 dimensões

Equação de Schroedinger em três dimensões

- Nesse caso, a equação de Schroedinger é dada por:

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

onde:

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

Equação de Schroedinger em três dimensões

- Essa equação também pode ser separada em uma parte que depende apenas da posição caso o potencial não dependa do tempo, como no caso unidimensional:

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

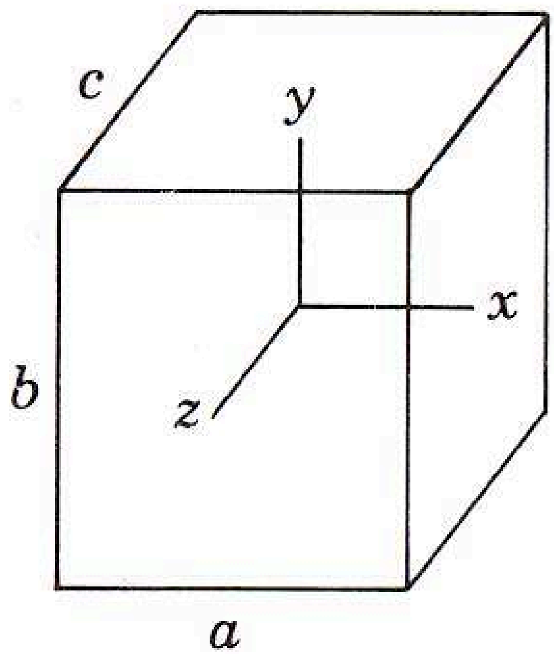
  onde:

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

Partícula na caixa retangular

- Vamos considerar uma partícula livre “presa” em uma caixa retangular

- Este problema é equivalente ao poço infinito, porém em três dimensões



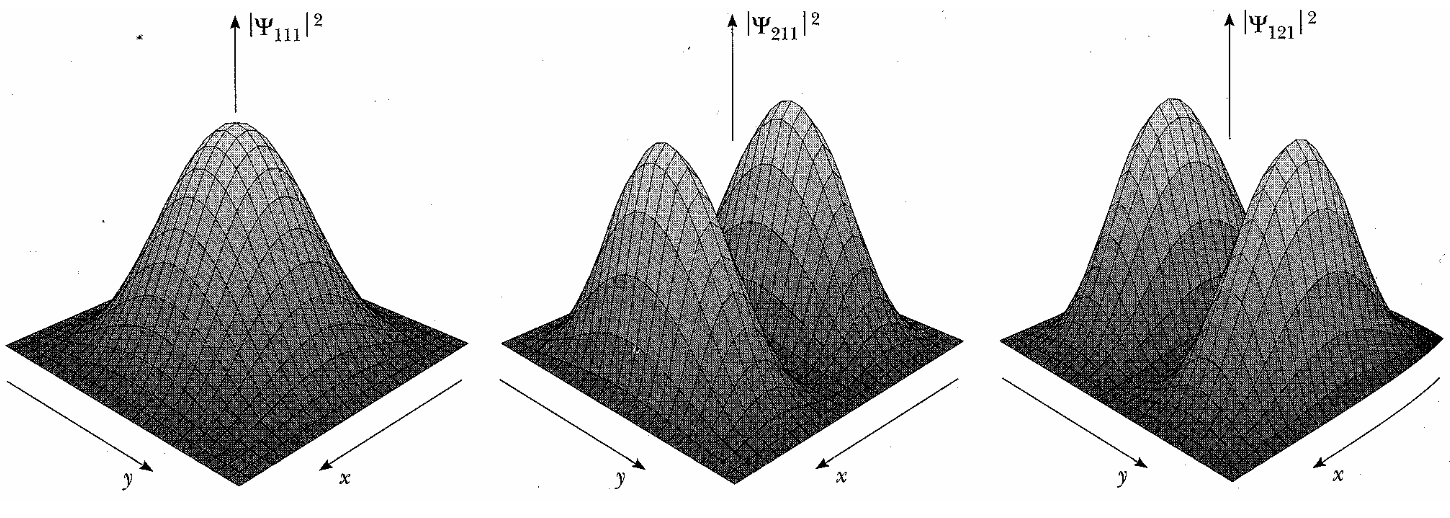
Partícula na caixa retangular

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

$n_1 , n_2 , n_3 = 1,3,5,...$

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

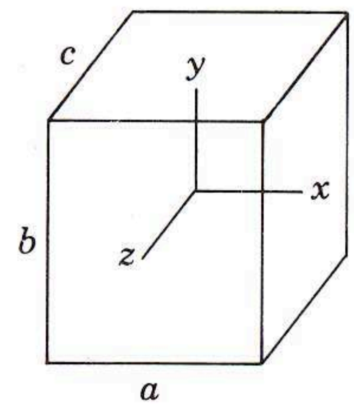
$n_1 , n_2 , n_3 = 2,4,6,...$

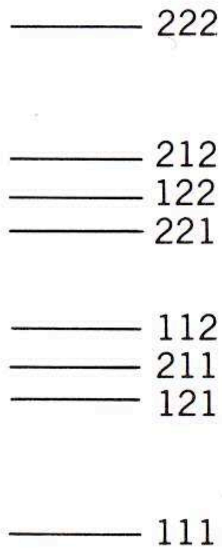


Partícula na caixa retangular

- Além da quantização de energia, uma outra propriedade interessante surge neste problema

- No caso da caixa retangular com os 3 lados diferentes, cada combinação de números quânticos (n_1 , n_2 , n_3), resulta em uma valor diferente de energia



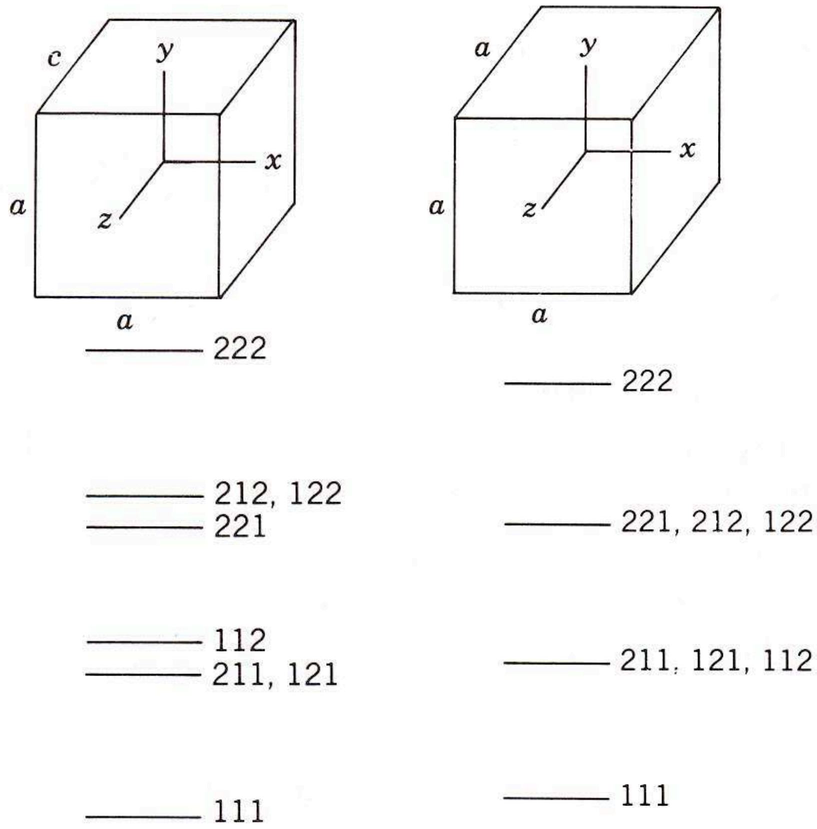


$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

Partícula na 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

- Isso é chamado de **degenerescência**



Equação de Schroedinger em três dimensões

- Para alguns problemas, a solução é mais simples se a equação de Schroedinger for escrita em coordenadas esféricas
- Isso ocorre, por exemplo, para o caso do potencial Coulombiano, que depende apenas do raio r e não depende de φ ou θ

Equação de Schroedinger em três dimensões

- A solução da parte angular da equação de Schroedinger em três dimensões em coordenadas esféricas é dada pelos chamados **esféricos harmônicos**:

$$Y_{lm_l}(\theta,\phi) = \Theta_{lm_l}(\theta)\cdot\Phi_{m_l}(\phi)$$

onde: $\Phi_{m_l}(\phi) = e^{im_l\phi}$

$$\Theta_{lm_l}(\theta) = sen^{|m_l|}\theta\cdot F_{l|m_l|}(cos\theta)$$

com $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ e $m_l = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$

Equação de Schroedinger em três dimensões

$\ell = 0$	$m = 0$	$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$\ell = 1$	$m = 1$	$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{i\phi}$
	$m = 0$	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$
	$m = -1$	$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, e^{-i\phi}$
$\ell = 2$	$m = 2$	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta\, e^{2i\phi}$
	$m = 1$	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta\, e^{i\phi}$
Harmônicos esféricos	$m = 0$	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$
	$m = -1$	$Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta\, e^{-i\phi}$
	$m = -2$	$Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta\, e^{-2i\phi}$