

Universidade de São Paulo

Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 22

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br

2o. Semestre de 2017

Página do curso:

<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=53869>

01/11/2017

A equação de Schrödinger independente do tempo

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

Método da separação de variáveis transforma uma eq. diferencial parcial em um conjunto de eqs. diferenciais ordinárias. Solução deve ser produto de funções: $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$

Caso o potencial $V(x,t)$ não dependa do tempo, seja apenas $V(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

Observáveis e operadores

- Um observável é uma propriedade da partícula que pode ser medida. Exemplo: posição, momento, Ec, K
- Na mecânica quântica associamos um operador a estes observáveis
- Com um operador podemos calcular o valor médio de um correspondente observável

O operador energia total:
chamamos de Hamiltoniano

$$[H]\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi$$

[H] envolve somente a
coordenada x

[E] depende somente do
tempo

Observável	símbolo	Operador associado
posição	x	x
momento	p	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
Energia Pot	U	U(x)
Energia Cin	K	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
Hamiltoniano	H	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$
Energia total	E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Valores esperados

Conteúdo básico:

1. Valor médio de uma função de x :

$$\bar{f}(x) = \langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{f}(x) \psi(x) dx$$

2. Desvio padrão de uma variável:

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \Delta x$$

A incerteza quântica de uma determinada variável pode ser encontrada a partir dos valores esperados

3. Momento da partícula: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

4. Energia: $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Condição de normalização: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$

Propriedades das autofunções

Por representarem propriedades de um sistema físico, as autofunções devem apresentar características que reflitam isso.

Assim:

$$\psi(x) \text{ deve ser finita} \quad (1)$$

$$\psi(x) \text{ deve ser unívoca} \quad (2)$$

$$\psi(x) \text{ deve ser contínua} \quad (3)$$

$$d\psi(x)/dx \text{ deve ser finita} \quad (4)$$

$$d\psi(x)/dx \text{ deve ser unívoca} \quad (5)$$

$$d\psi(x)/dx \text{ deve ser contínua} \quad (6)$$

Autovalores e autofunções

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

$$\hat{p}\Psi(x, t) = (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\Psi(x, t)$$

$$\hat{p}\Psi(x, t) = (-i\hbar)(ik)Ae^{i(kx - \omega t)}$$

$$\hat{p}\Psi(x, t) = \hbar k\Psi(x, t)$$

$$\Psi(x, t) = \text{autofunção}$$

$$\hbar k = \text{autovalor}$$

O potencial nulo: $V(x) = 0, \forall x$.

Partícula livre, pois $F(x) = -dV(x)/dx = 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x); \text{ e } \Psi(x,t) = \psi(x)e^{\frac{iE}{\hbar}t}$$

válido para qualquer valor de $E \geq 0$.

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

$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ deve ser a solução geral

Partícula livre

Momento da partícula:

$$\bar{p} = \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx$$

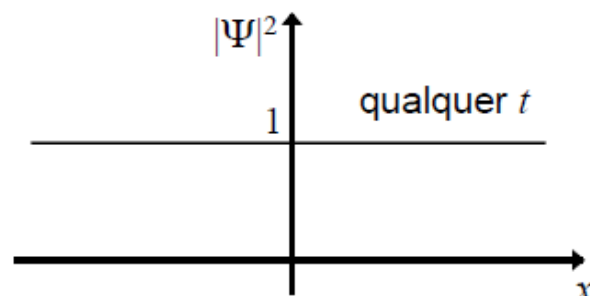
Mas $-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar ik\psi(x) = \hbar k\psi(x) = +\sqrt{2mE}\psi(x)$

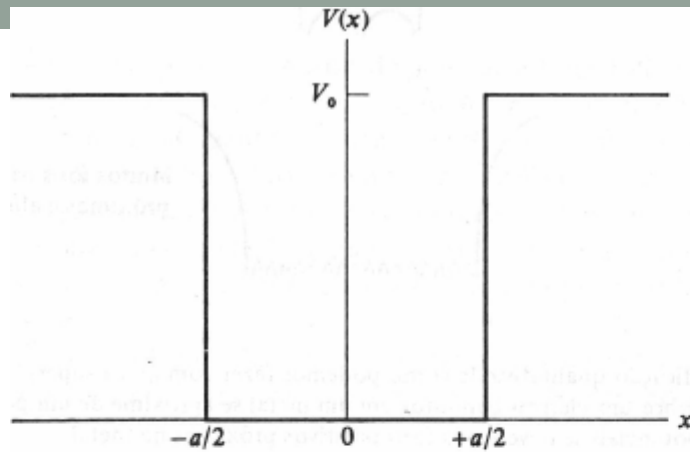
Portanto, $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \sqrt{2mE} \psi(x) dx = \sqrt{2mE} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \sqrt{2mE}$

No outro caso, $\Psi(x,t) = e^{-i(kx+\omega t)}$, teremos: $\langle p \rangle = -\sqrt{2mE}$

Posição da partícula: $\Psi^*\Psi = A^* e^{-i(kx-\omega t)} Ae^{i(kx-\omega t)} = A^* A$

Nesse caso, $\Delta x = \infty$. Mas $\Delta p = 0$.





Poços de potencial: $E < V_0$

Dentro, $-a/2 < x < a/2$:

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\text{com: } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar}$$

Ondas com a mesma amplitude nos 2 sentidos.

$$A = B \Rightarrow \psi(x) = B' \cos k_1 x \Rightarrow \Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

A autofunção terá nós fixos nos pontos onde $\cos k_1 x = 0$.

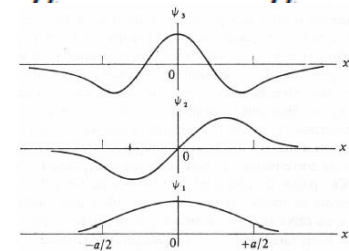
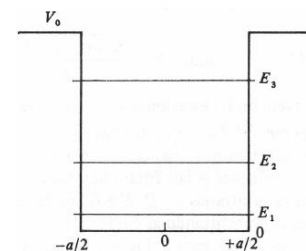
$$A = -B \Rightarrow \psi(x) = A' \sin k_1 x \Rightarrow \Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

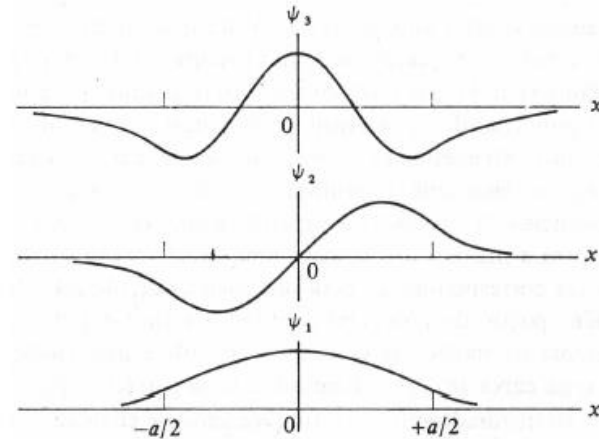
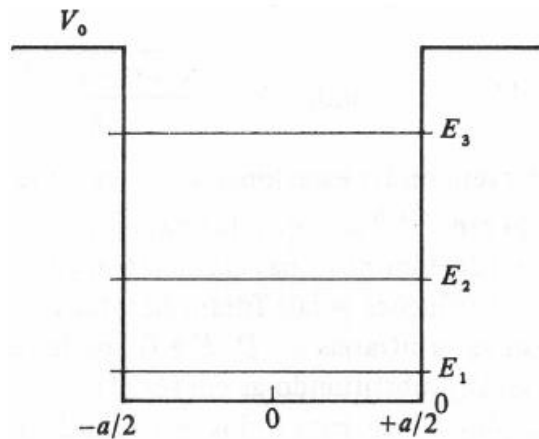
Se ambas são soluções \Rightarrow solução geral será uma combinação linear: $\psi(x) = A' \sin k_1 x + B' \cos k_1 x$

Regiões fora do poço:

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{para } x < -a/2. \quad \text{Com: } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar}$$

$$\psi(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x} \quad \text{para } x > a/2$$





5) Normalização: neste caso, o limite de integração reduz-se ao intervalo $[-a/2, a/2]$, única região em que as funções de onda são não nulas.

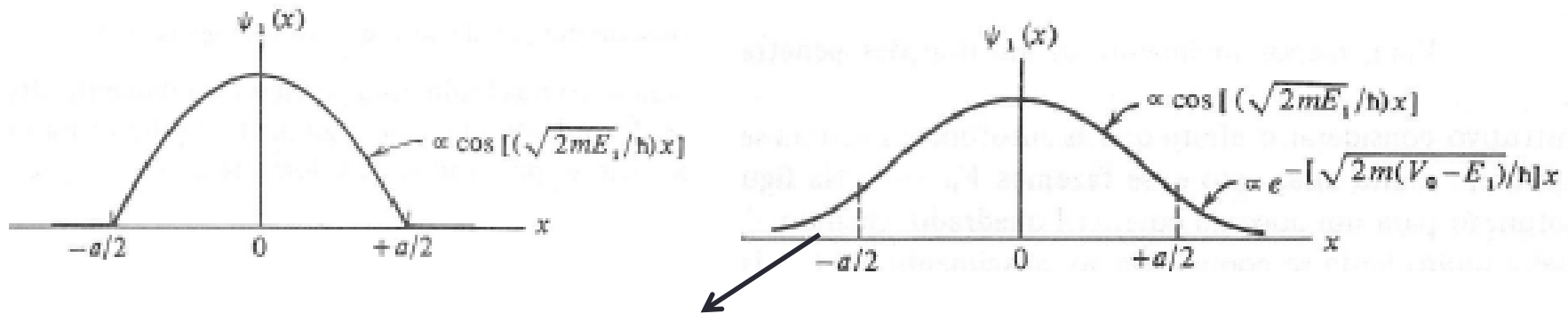
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n|^2 dx = \int_{-a/2}^{a/2} \frac{2}{a} \cos^2 \frac{n\pi x}{a} dx =$$

$$= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx = \frac{1}{a} \left(x + \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a} \right) \Big|_{-a/2}^{a/2} = 1$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço quadrado”

Comparando o primeiro estado do sistema do poço infinito com o poço finito



O fato da função de onda não ser zero nas paredes aumenta o comprimento de onda de De Broglie na parede (em comparação com o poço infinito), e isto torna menor a energia e o momento da partícula. Esta observação pode ser usada para aproximar as energias permitidas para a partícula ligada. A função de onda penetra na região exterior, numa escala de comprimento definido pela **profundidade de penetração** δ dado por:

$$\delta = \frac{1}{k_1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

A função de onda no exterior é essencialmente zero além da distância δ , em ambos os lados do poço de potencial

$$E_n \approx \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(L + 2\delta)^2}$$

Energia da partícula ligada no poço finito

Estados Ligados e não Ligados

Um estado no qual $\psi(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty, e, x \rightarrow -\infty$

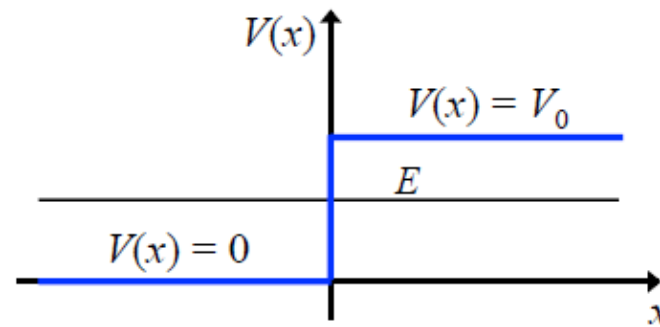
se denomina **estado ligado**. Para um estado ligado, a probabilidade de encontrar a partícula se concentra em sua maior parte em uma região finita do espaço.

Para um estado **não ligado**, a função de onda ψ não tende a zero conforme $x \rightarrow \pm\infty$ e não é normalizável.

- **Para a partícula em um poço retangular:**
 - os estados com $E < V_0$ são ligados e
 - os estados com $E > V_0$ são não ligados.
- **Para a partícula na caixa de paredes infinitas,** todos os estados são ligados,
- **Para a partícula livre,** todos os estados são não ligados.

O potencial degrau I – $E < V_0$

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se } x > 0 \\ 0, & \text{se } x \leq 0 \end{cases}$$



$$x < 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi; \quad x > 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

Penetração
da barreira

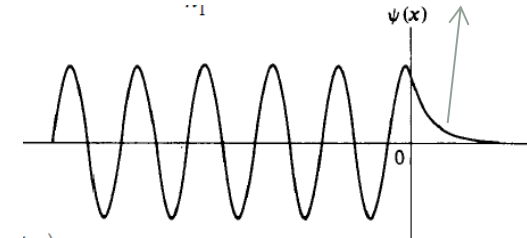
Região $x \leq 0$: solução para a partícula livre: $\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

$$\text{com: } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\delta = \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Solução geral, para $x > 0$: $\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$

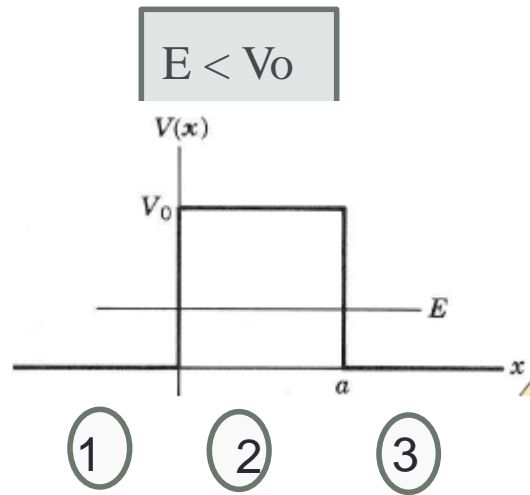
Determinar as constantes A, B, C e D , que satisfaçam os requisitos para ψ e $d\psi/dx$: finitas, unívocas e contínuas.



$$\psi(x) \text{ finita } \forall x \Rightarrow C = 0.$$

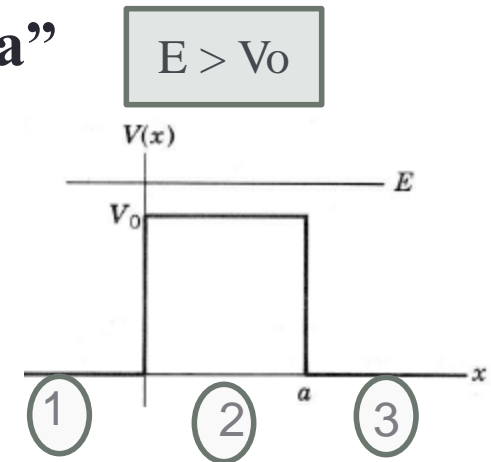
$$\text{Continuidade no ponto } x = 0 \quad \psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x}, & x \leq 0 \\ De^{-k_2x}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



“Barreira de Potencia”

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

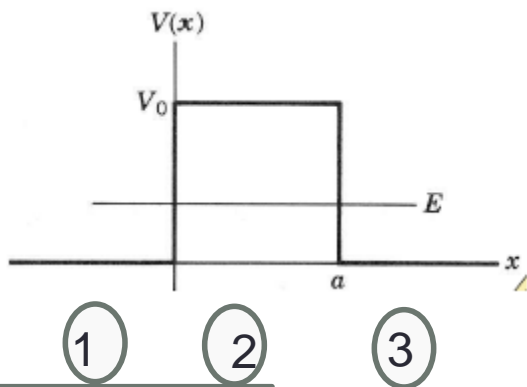


Região 1 $x < 0$

1) Caso $E < V_0$

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

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Solução da partícula livre}$$



Região 2 $0 < x < a$

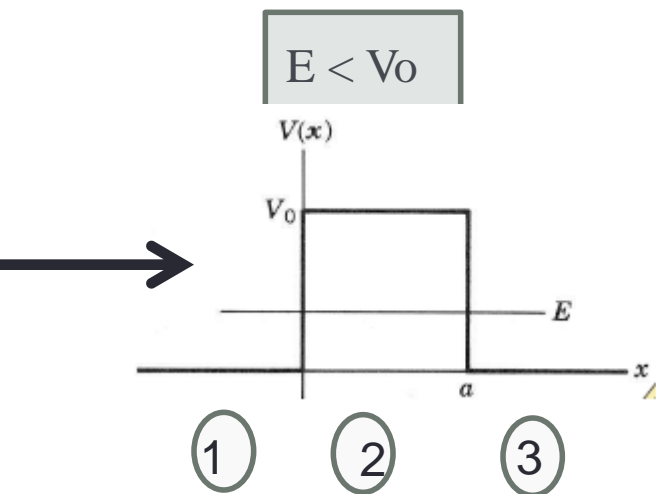
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)\psi(x)$$

Região 3 $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



“Barreira de Potencia”

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Região 1 $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

Região 2 $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

Região 3 $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

Não tem onda vinda da
direita $G = 0$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Barreira de Potencia”

Região 1 $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2 $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Região 3 $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

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

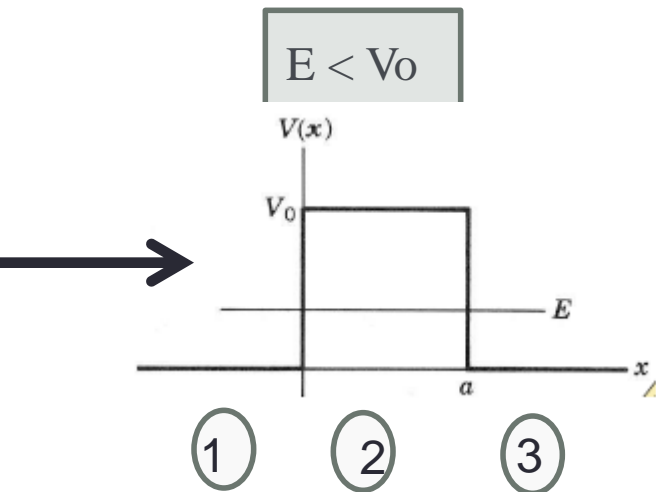
$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Barreira de Potencia”



Coeficiente de Transmissão:

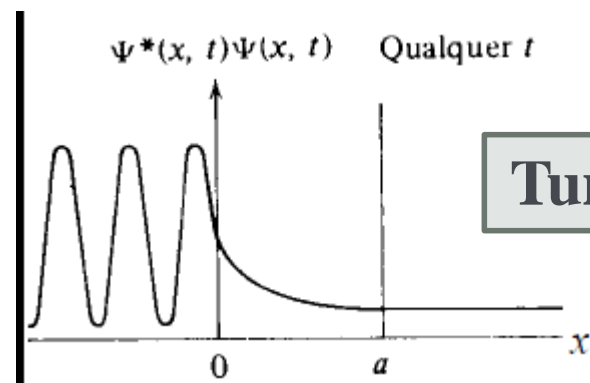
$$T = \frac{\dot{j}_{transmitida}}{\dot{j}_{incidente}} = \frac{v_{trans} F^* F}{v_{inc} A^* A}$$

$$v_{inc} = \frac{p_{inc}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$v_{trans} = \frac{p_{trans}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$T = \frac{F^* F}{A^* A} = \left[1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

Ao chegar a fronteira das regiões 2 e 3 a função de onda volta a apresentar o comportamento senoidal – probabilidade de encontrar a partícula do outro lado da barreira



Na situação em que $k_2 a \gg 1$

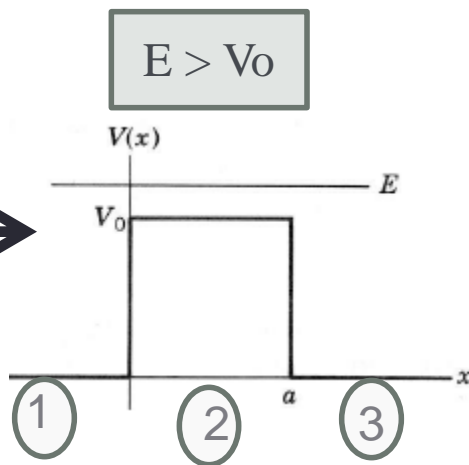
$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_2 a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Barreira de Potencia”

Coeficiente de Transmissão:

$$T = \frac{C^* C}{A^* A}$$



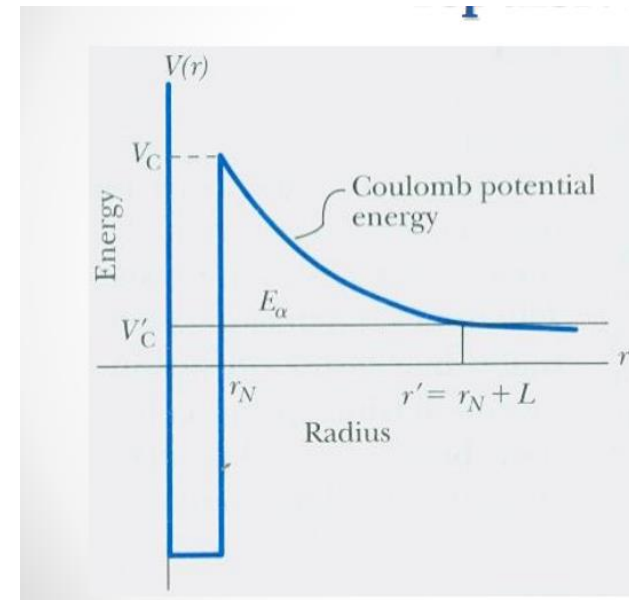
$$T = \frac{C^* C}{A^* A} = \left[1 + \frac{\text{sen}^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} + 1 \right)} \right]^{-1}$$

Tunelamento

- Este fenômeno, a penetração numa região classicamente proibida, é chamado de tunelamento quântico”.
- Penetração de barreiras por partículas, e é uma consequência da natureza ondulatória das partículas

O decaimento alfa é um fenômeno que consiste na emissão espontânea de uma partícula alfa por um núcleo atômico instável (radioativo). Partícula alfa é constituída por dois prótons dois nêutrons ligados pela força nuclear forte. É um produto de desintegração de algumas espécies de núcleos como Ra, Th, U

Alfa no interior do núcleo: potencial nuclear atrativo (poço) + coulombiano repulsivo



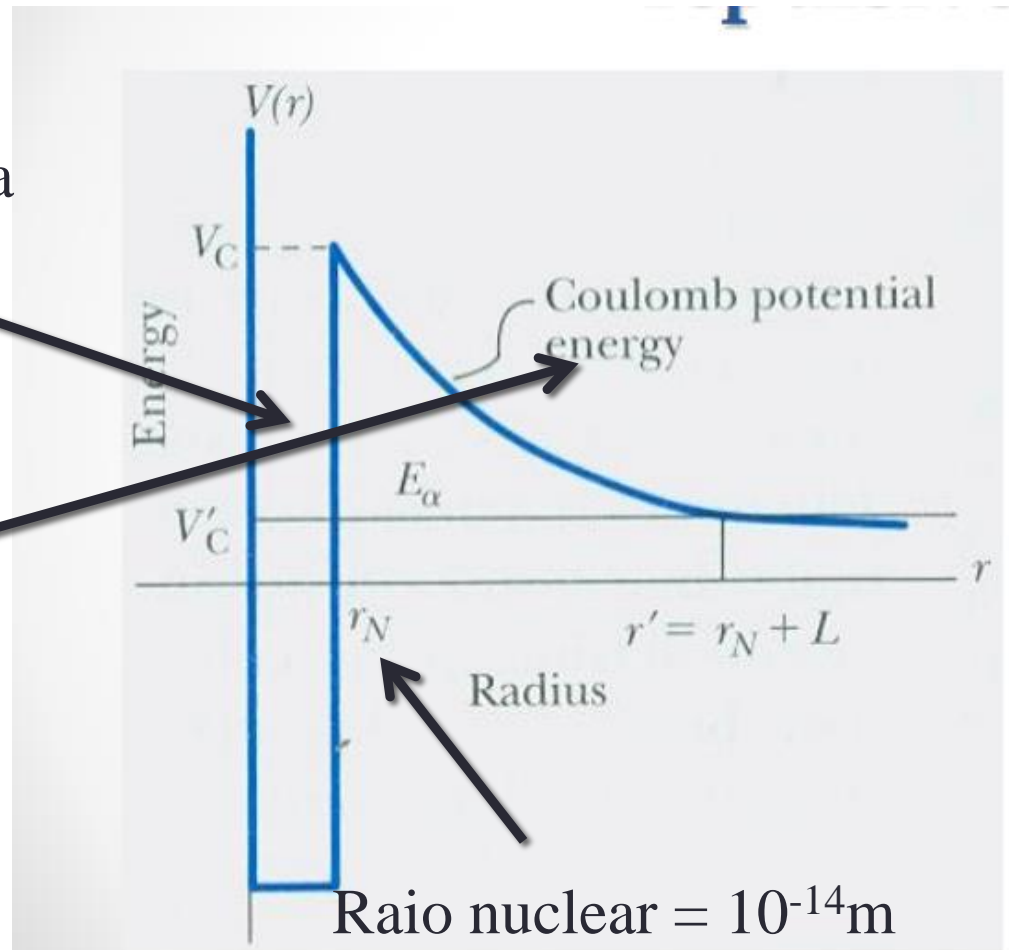
Tunelamento

Alfa no interior do núcleo: potencial nuclear atrativo (poço) + coulombiano repulsivo

- Partícula alfa não escapa classicamente
- Partícula livre mas confinada ao núcleo pelo potencial nuclear

Fora do núcleo a partícula alfa experimenta apenas a repulsão coulombiana

$$U(r) = \frac{K 2eZe}{r} = \frac{2kZe^2}{r}$$



Tunelamento

- Este fenômeno, a penetração numa região classicamente proibida, é chamado de tunelamento quântico”.
- Penetração de barreiras por partículas, e é uma consequência da natureza ondulatória das partículas

O microscópio de varredura por tunelamento, ou STM (Scanning Tunneling Microscope), foi desenvolvido por Gerd Binnig e Heirinch Rohrer em 1981, que receberam em 1986 o prêmio Nobel de Física por este desenvolvimento. O STM é um aparelho notável que usa o tunelamento quântico para obter imagens tridimensionais de superfícies com resolução da ordem de um único átomo, e é composto por uma pequena sonda com uma ponta metálica muito fina (parecido com a ponta de uma agulha) que varre toda a superfície da amostra a ser analisada, e essa varredura é gerada por um cristal piezoelétrico, que é um tipo de cristal que transforma pressão mecânica em sinais elétricos e vice-versa.

No STM, a ponta fina da sonda faz a varredura muito próxima da superfície de uma amostra, e o espaço vazio (vácuo) muito pequeno entre eles, que é da ordem de nanômetros (10^{-9}m), funciona como uma barreira de energia potencial aos elétrons ligados da amostra. Quando uma pequena tensão elétrica é aplicada entre a ponta metálica da sonda e a amostra, elétrons da amostra atravessam pelo espaço vazio (barreira) entre a amostra e a ponta através do tunelamento quântico. Para obter uma imagem da superfície em 3-D, é preciso manter uma corrente de tunelamento constante, no qual é feito através de um mecanismo eletrônico que move a sonda para longe ou perto da superfície, seguindo o contorno da superfície.



Equação de Schrödinger em três dimensões

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

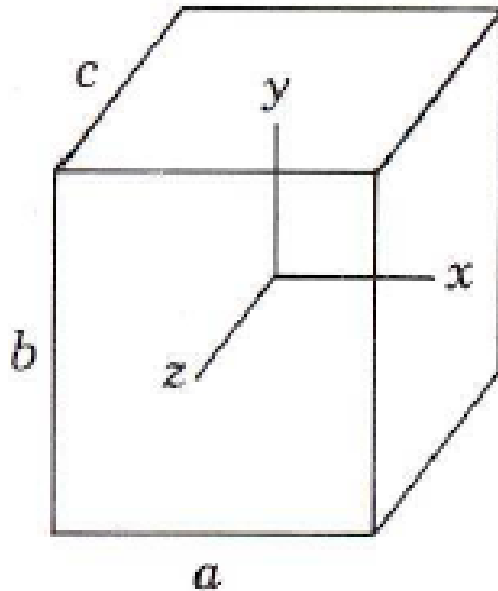
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

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

Podemos fazer separação de variáveis:

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

Partícula em uma caixa retangular

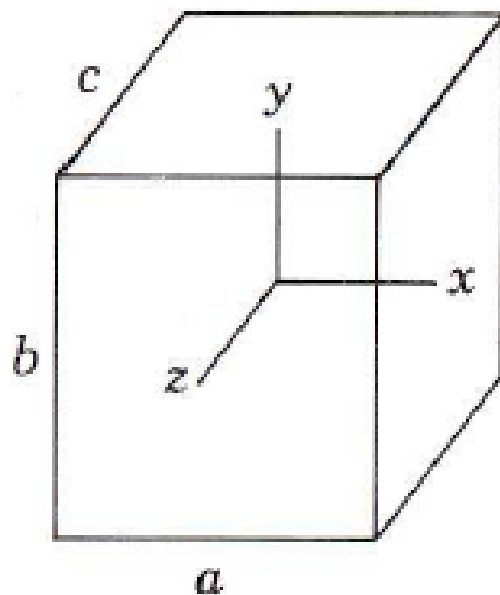


- Vamos considerar uma partícula livre “presa” em uma caixa retangular
- Este problema é equivalente ao poço infinito, porém em três dimensões

$$\psi_n(x) = A \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right), A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad n=1,3,5\dots$$

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

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

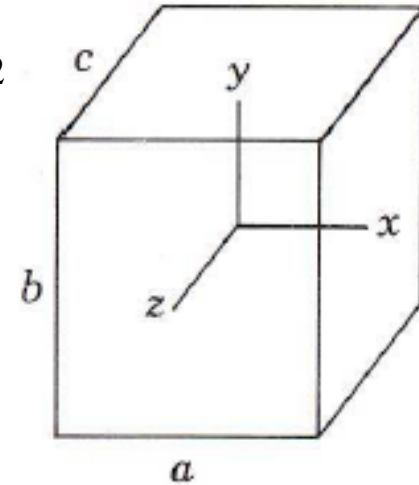
$$\psi_n(x) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right), A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad n=2,4,6,\dots$$

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

Partícula em uma caixa retangular

Temos a quantização de energia $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}$$



———— 222

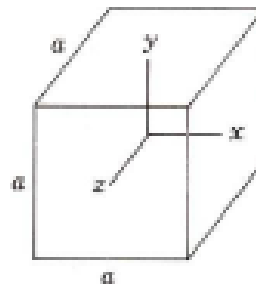
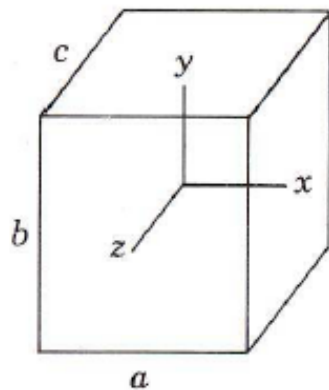
———— 212
 ———— 122
 ———— 221

———— 112
 ———— 211
 ———— 121

———— 111

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

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

———— 222

———— 212

———— 122

———— 221

———— 112

———— 211

———— 121

———— 111

———— 222

———— 221, 212, 122

———— 211, 121, 112

———— 111

degenerescência