Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I
AULA 17

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

2o. Semestre de 2018

Página do curso:
https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=64495

08/10/2018

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Esperamos que a Equação de Schrödinger incorpore os seguintes princípios fundamentais:

- A conservação de energia:
- A hipótese de De Broglie: mecânica quântica esta especificamente relacionada a partículas que mostram distintas propriedades de ondas.

O princípio de conservação de energia é definido pela equação:

$$E = E_c + E_p$$

$$E_c = \frac{p^2}{2m}$$

Substituindo a equação de de Broglie: $p = \frac{h}{\lambda}$

$$E_c = \frac{h^2}{2\lambda^2 m} = E - E_p$$

$$\psi = Asenkx$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A \sin kx = -k^2\psi$$

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2(E - E_p)m}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -4\pi^2 \frac{2(E - E_p)m}{h^2}\psi$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_p)\psi}$$

forma unidimensional da **equação de Schrödinger**

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -4\pi^2 \frac{2(E-E_p)m}{h^2}\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-E_p)\psi$$

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

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Para uma função de onda dependente de x e t $\quad \psi(x,t)$

Equação de Schrödinger dependente do tempo

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

Geralmente estudaremos os casos que correspondem a situações de onda estacionária:

átomo de hidrogênio,
Partículas em uma caixa
Oscilador harmônico

Nestes casos o potencial V não depende explicitamente do tempo V(x,t)=V(x) – Utilizaremos neste caso a ideia de separação de variáveis:

$$\Psi(x,t) = \psi(x).\phi(t)$$

$$\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

A densidade de probabilidade neste caso: :

$$\Psi(x,t) = \psi(x).e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

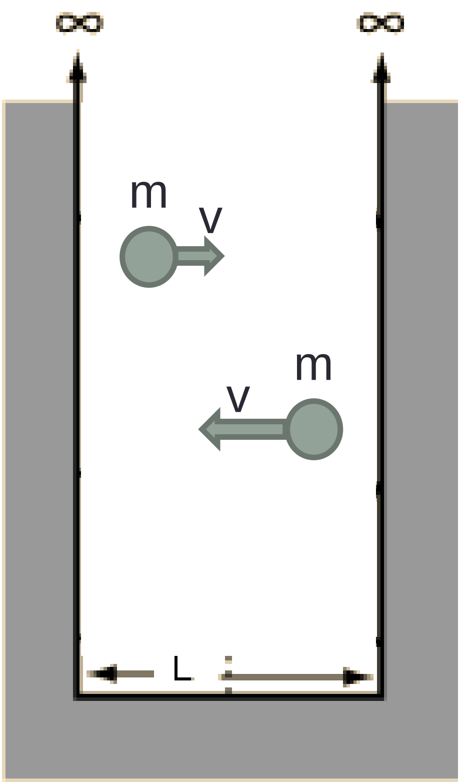
$$P(x,t)dx = \psi^*(x)e^{+\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}dx$$

$$P(x,t)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$$

Ou seja não depende do tempo. Essas soluções são chamadas de estados estacionários

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Função de onda de uma partícula em uma caixa



Uma partícula de massa m desloca-se nesse sistema

Condições para a função de onda:

- Dentro da caixa V(x) = 0, fora V(x)=infinito
- Como a partícula esta confinada dentro da caixa $0 \leq x \leq L$ esperamos que a $\psi(x) = 0$ fora da caixa
- Estão de acordo com a Eq. de Schroedinger que diz que a função deve ser **finita** dentro da caixa e a função deve ser zero quando V(x) é infinito.
- A função de onda deve ser **contínua** para ser uma solução matemática da Eq. De Schrodinger. Então $\psi(x) = 0$ nas fronteiras das regiões x=0 e x=L
- Finalmente a derivada da função de onda deve ser também contínua – somente teremos nós nas paredes dada a descontinuidade da primeira derivada.

Propriedades necessárias às autofunções:

$\psi(x)$ deve ser *finita* $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deve ser *finita*

$\psi(x)$ deve ser *unívoca* $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deve ser *unívoca*

$\psi(x)$ deve ser *contínua* $\frac{d\psi(x)}{dx}$ deve ser *contínua*

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Partícula dentro da caixa $0 \leq x \leq L$

Dentro da caixa V(x) = 0, fora V(x)=infinito

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

A equação de onda que satisfaz esta a eq. De Schrödinger poderia ser:

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

1) **É contínua e possui derivada primeira contínua** $\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx}$
2) **Problema: essa função de onda não satisfaz as condições de contorno em que a função deve ser zero em x=0 e x=L**

$$x = 0 \Rightarrow \psi(0) = Ae^0 = A$$
$$x = L \Rightarrow \psi(L) = Ae^{ikL}$$

Só será zero se A=0, ai a função de onda seria zero e não existiria nenhuma partícula

Para sair disto precisamos lembrar que para um estado estacionário podemos ter uma superposição de ondas :

$$\psi(x) = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Partícula dentro da caixa $0 \leq x \leq L$ $\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$

$$\psi(x) = A_1[\cos(kx) + i sen(kx)] + A_2[\cos(-kx) + i sen(-kx)]$$

$$\psi(x) = A_1[\cos(kx) + i sen(kx)] + A_2[\cos(kx) - i sen(kx)]$$

$$\psi(x) = (A_1 + A_2)\cos kx + i(A_1 - A_2) sen kx$$

$$x = 0 \Rightarrow \psi(0) = A_1 + A_2 = 0$$

$$A_1 = -A_2$$

$$\psi(x) = 2iA_1 sen kx = C sen kx$$

$$\psi(0) = 0$$

$$x = L \quad kL = n\pi$$

A função de onda de estados estacionários para a partícula dentro da caixa

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{n}, n = 1,2,3\ldots$$

Os níveis de energia: $p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L}$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

Exemplo seria uma molécula $\boxed{-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}}$

Cuidado neste caso temos que ter soluções para n impar e para n par

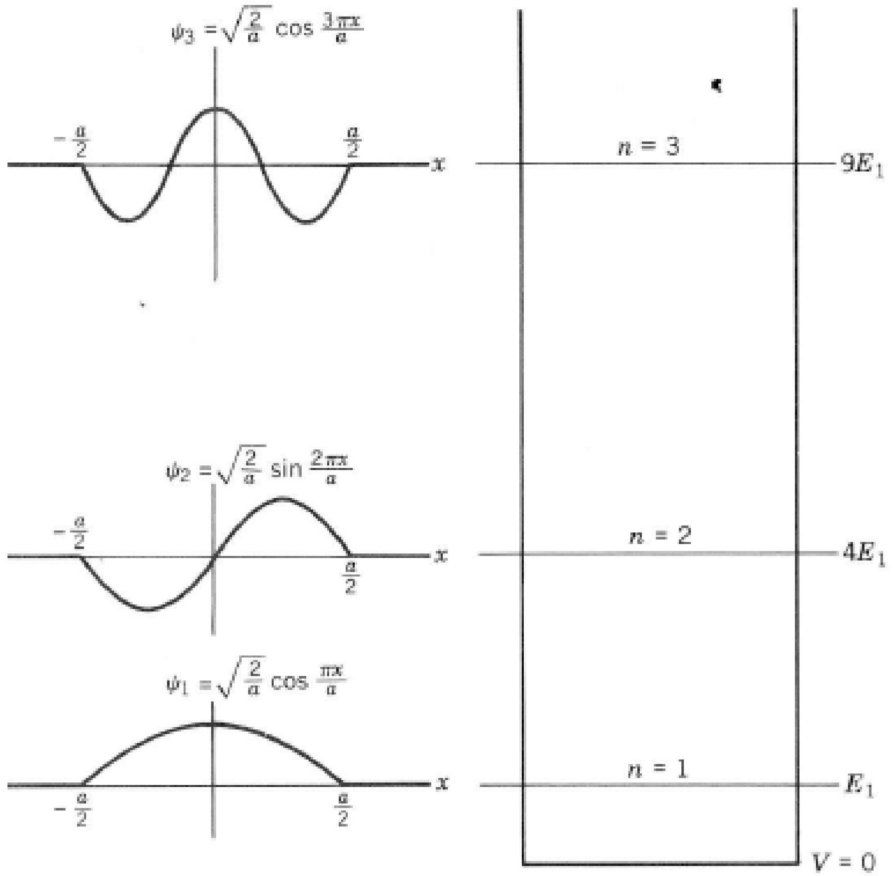
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)$$

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

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,...

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

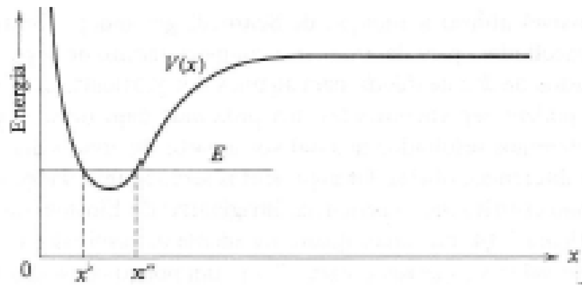
A menor energia possível não é zero!

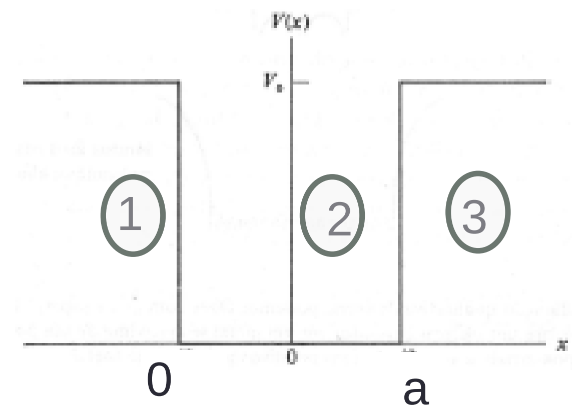
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“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)





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

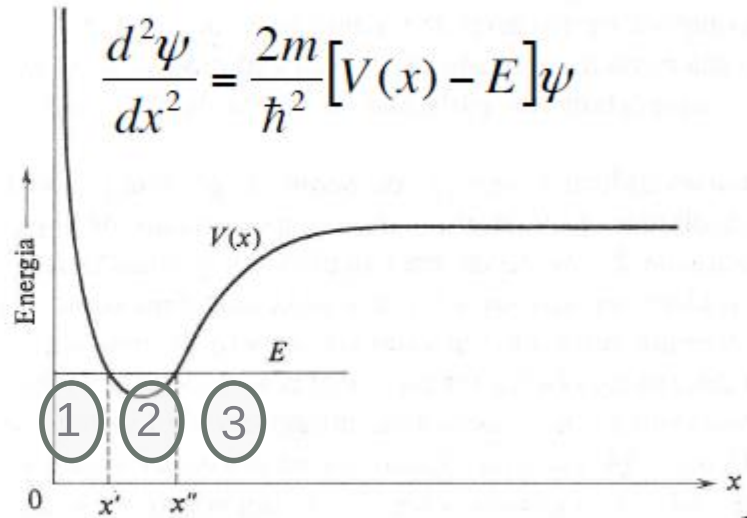
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

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

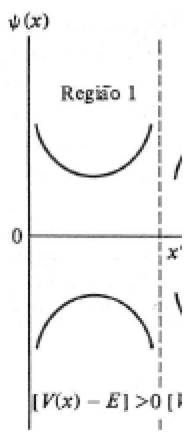
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

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



Região 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)**

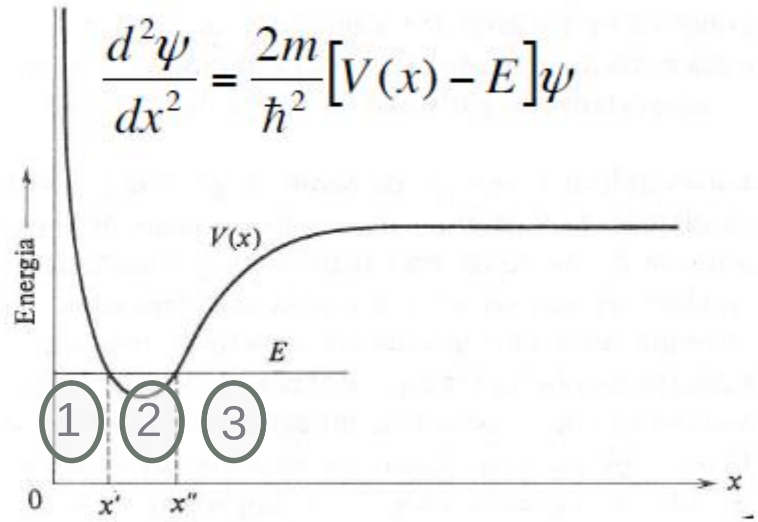
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

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

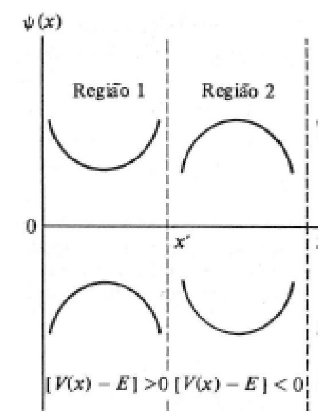
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

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



Região 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**

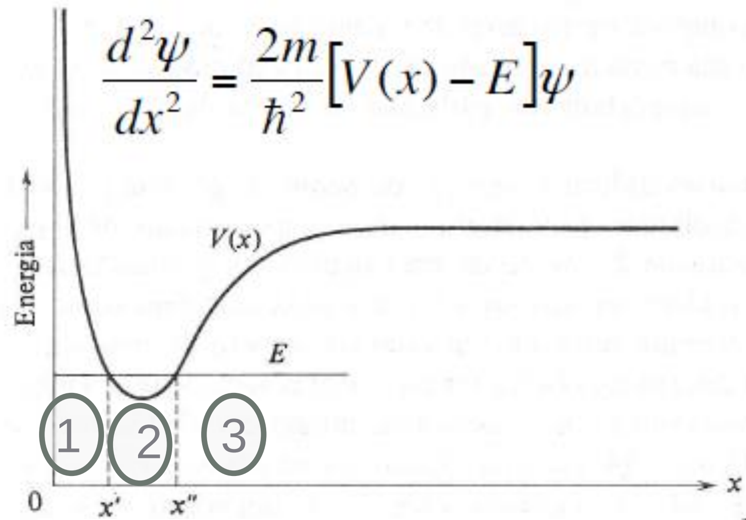
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger"

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

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

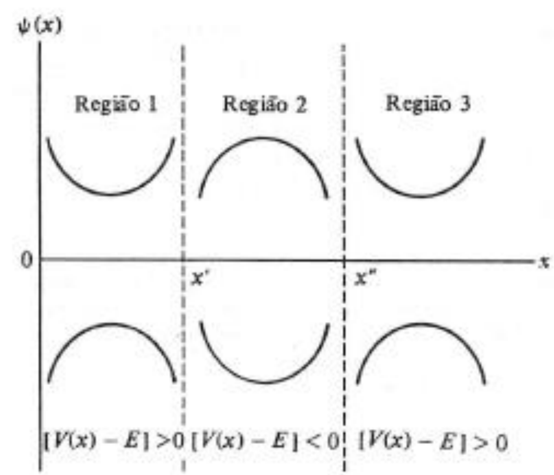
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x)-E\right]\psi(x)$$



Região 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

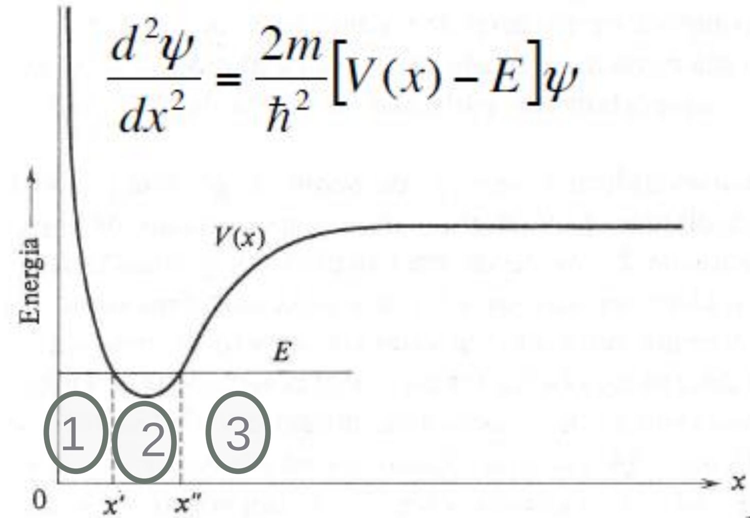
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

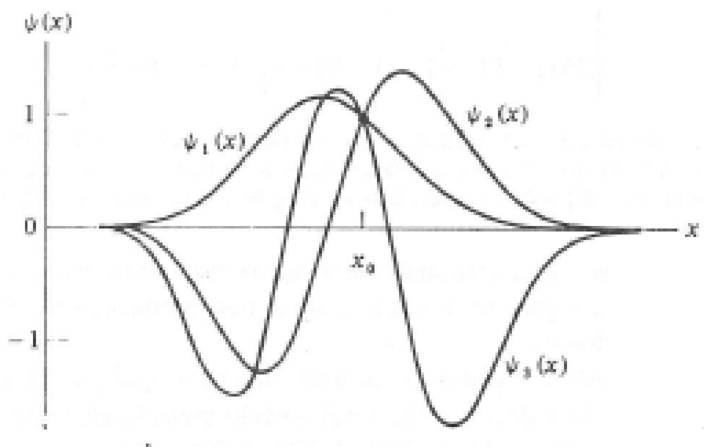
Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

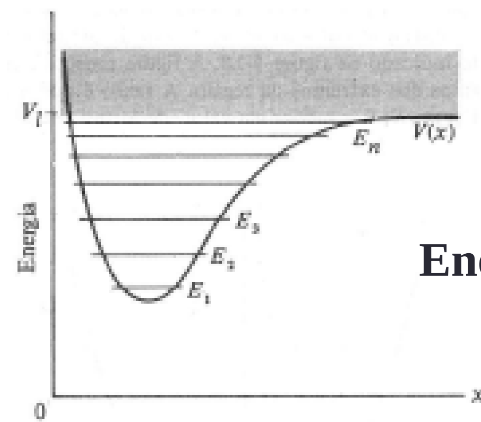
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

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



Temos certos valores de energia como solução para essa equação





Energia quantizada

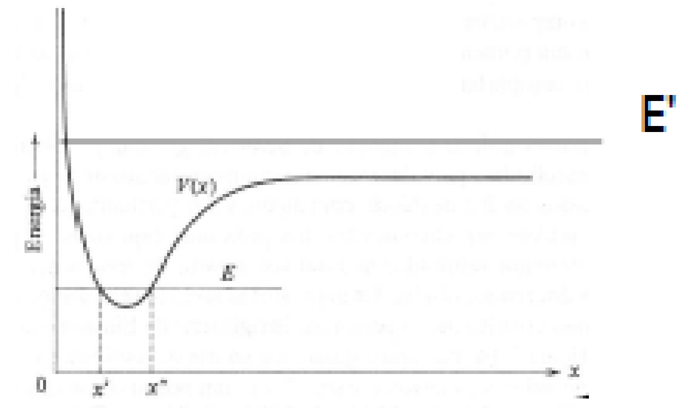
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

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

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

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



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**