Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 18

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

10/10/2018

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

Equação de Schrödinger dependente do tempo

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

Equação de Schrödinger independente do tempo

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Para ter sentido físico a função de onda vinculada a sua densidade de probabilidade, devemos impor algumas condições

- **As funções de onda e sua primeira derivada**, $\psi(x)$ $\dfrac{d\psi(x)}{dx}$

para serem soluções aceitáveis precisam:

  - **Ser finita** $\psi(x) \to 0; x \to \pm\infty$

  partícula tem que ter ser movimento em uma região do espaço

  - **Ser unívoca (a função de onda não pode ter múltiplos valores)**
  - **Se contínua (pois se temos funções descontínuas as derivadas serão infinitas nos pontos de descontinuidade)**

- Essas condições são necessárias para que as funções de onda representem os observáveis de maneira adequada

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

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

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

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

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

$$\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$$

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

$$\psi(x) = 2iA_1 senkx = Csenkx$$

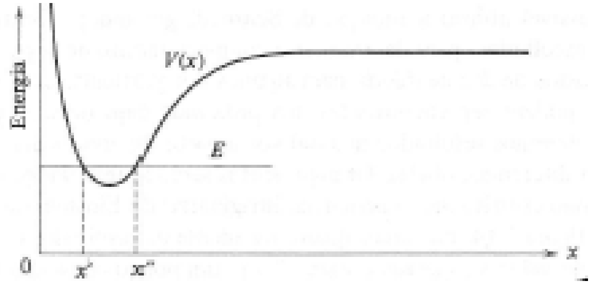
$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L}$$

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

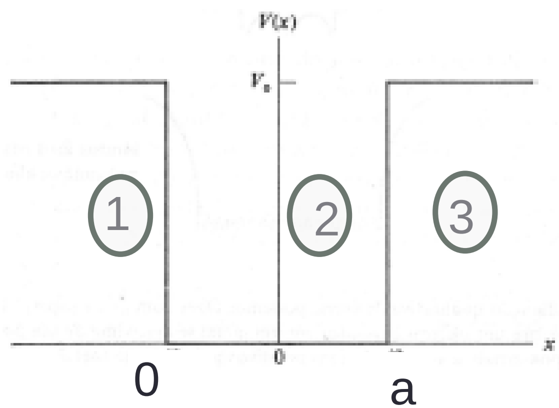
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“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)



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

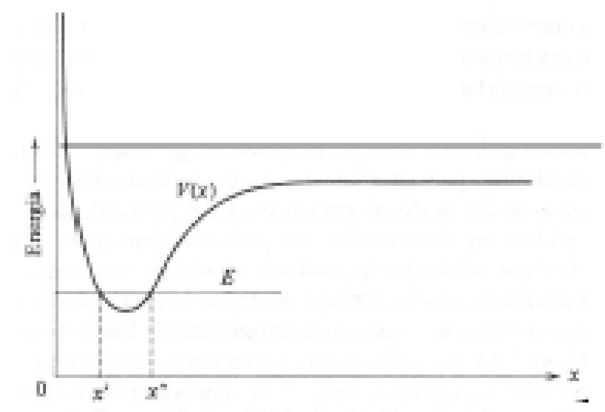
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

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

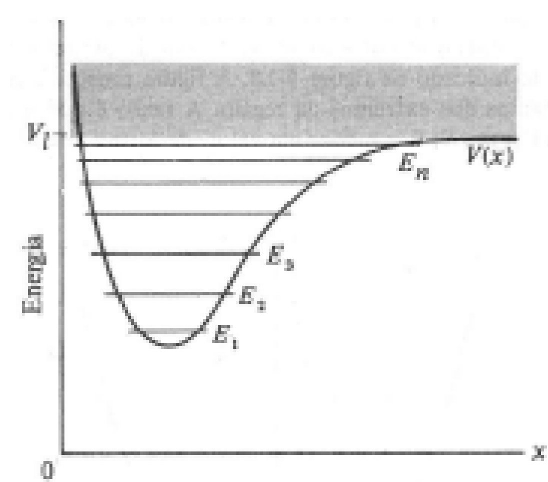
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

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



E'

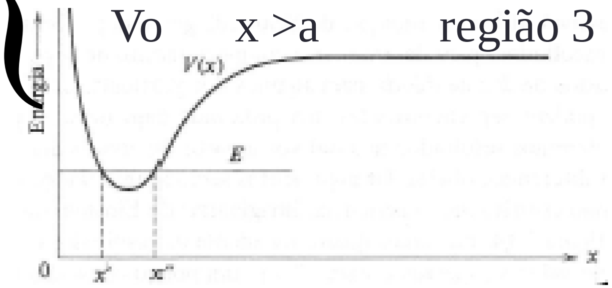
Quando E > V(x) para qualquer valor de x> x´ é possível encontra uma solução para $\psi(x)$ **para qualquer valor de energia, formando uma distribuição continua de valores de energia do sistema**



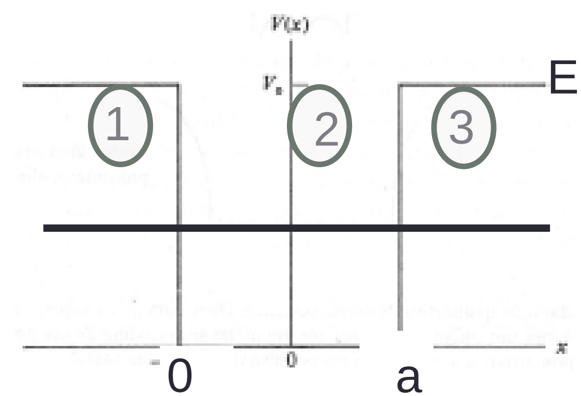
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V_0\psi(x)=E\psi(x) \qquad V(x)=\begin{cases} V_0 & x<0 & \text{região 1} \\ 0 & 0<x<a & \text{região 2} \\ V_0 & x>a & \text{região 3}\end{cases}$$



- 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)



Região 1 e 3

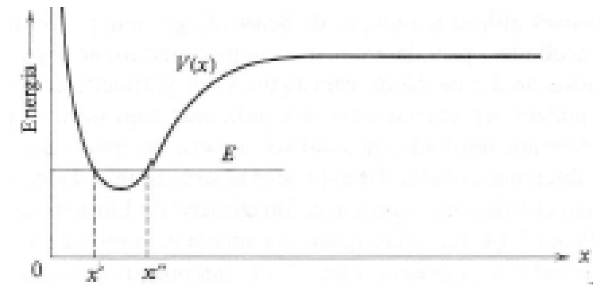
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi(x) \qquad k_1=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=k_1^{\,2}\psi(x) \qquad \psi_1(x)=Ae^{k_1x}+Be^{-k_1x} \qquad \psi_3(x)=Fe^{k_1x}+Ge^{-k_1x}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

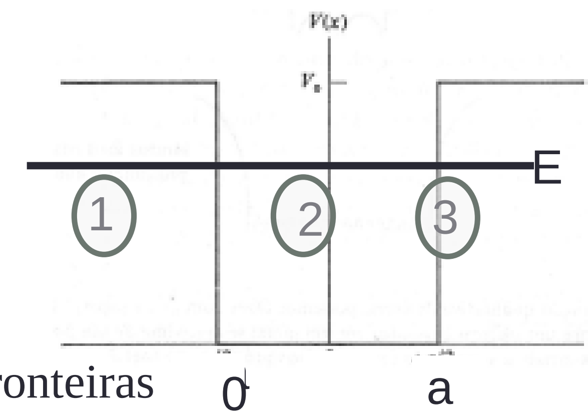
$$V(x) = \begin{cases} V_o & x<0 & \text{região 1} \\ 0 & 0<x<a & \text{região 2} \\ V_o & x>a & \text{região 3} \end{cases}$$



Região 2 – dentro do poço

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

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



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

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} + Be^{-k_1 x} \qquad \psi_3(x) = Fe^{k_1 x} + Ge^{-k_1 x}$$

1) Condição de finitude

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

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

F=0

B=0

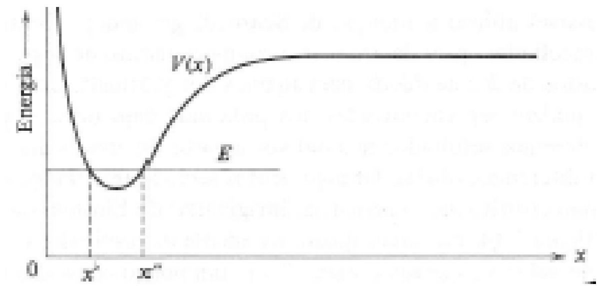
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

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

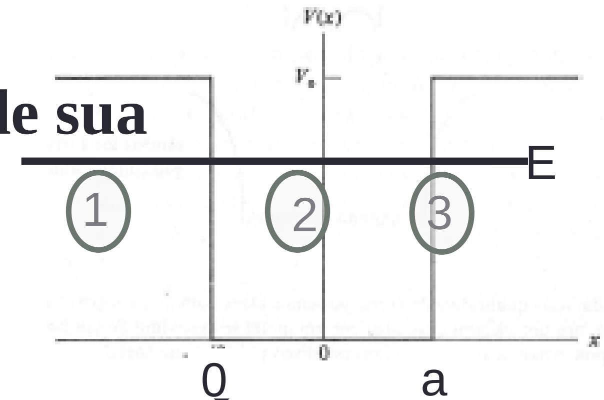
$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x} \qquad \text{Região 3}$$

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



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

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



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

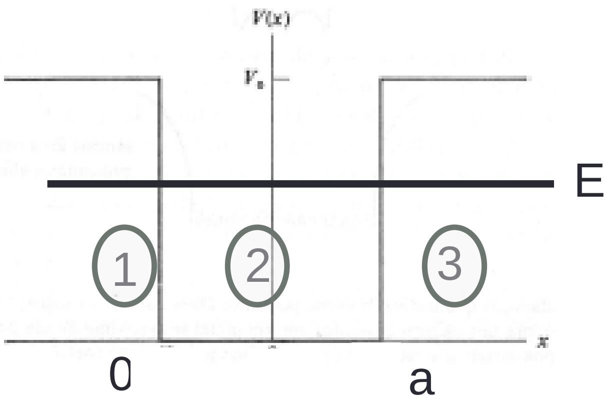
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ Região 3

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

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

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



2) Condição de continuidade a função

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

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

$$\boxed{A = D}$$

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

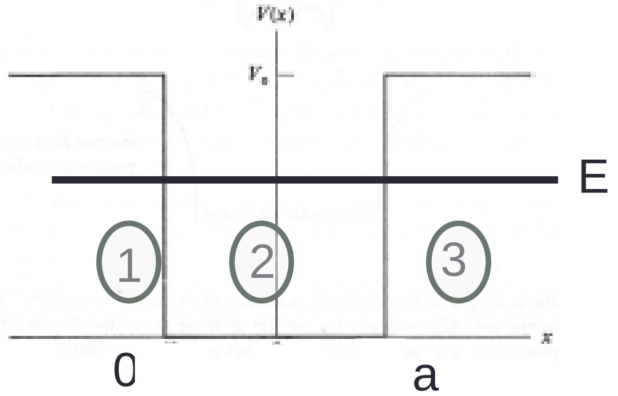
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ 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 da derivada da função

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

$$k_1 A = Ck_2 \cos 0 - Dk_2 \mathrm{sen} 0$$

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

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

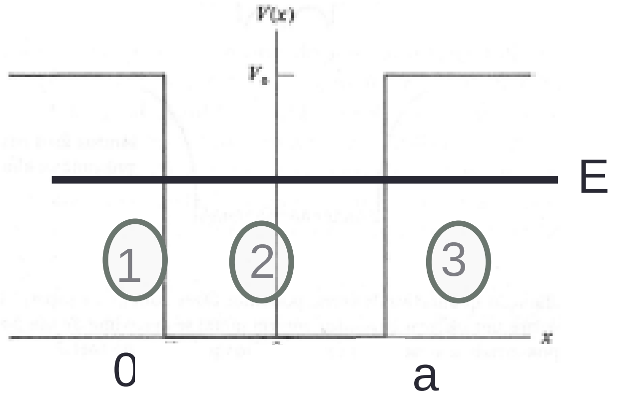
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} \quad \text{Região 1}$$

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

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

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

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



$$\boxed{A = D} \qquad \boxed{k_1 A = C k_2}$$

$$1 \quad C\,\mathrm{sen}\,k_2 a + D\cos k_2 a = Ge^{-k_1 a}$$

$$2 \quad Ck_2\cos k_2 a - Dk_2\,\mathrm{sen}\,k_2 a = -k_1 Ge^{-k_1 a}$$

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

Dividindo 2 por 1

$$\frac{Ck_2\cos k_2 a - Dk_2\,\mathrm{sen}\,k_2 a}{C\,\mathrm{sen}\,k_2 a + D\cos k_2 a} = \frac{-k_1 \cancel{Ge^{-k_1 a}}}{\cancel{Ge^{-k_1 a}}}$$

$$\frac{\cancel{D}\frac{k_1}{\cancel{k_2}}\cancel{k_2}\cos k_2 a - \cancel{D}k_2\,\mathrm{sen}\,k_2 a}{\cancel{D}\frac{k_1}{k_2}\,\mathrm{sen}\,k_2 a + \cancel{D}\cos k_2 a} = -k_1$$

$$x\left(\frac{1}{k_2}\right)\quad \frac{\frac{k_1}{\cancel{k_2}}\cancel{D}\cancel{k_2}\cos k_2 a - \cancel{D}k_2 senk_2 a}{\frac{k_1}{k_2}\cancel{D}senk_2 a + \cancel{D}\cos k_2 a} = -k_1$$

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

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

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

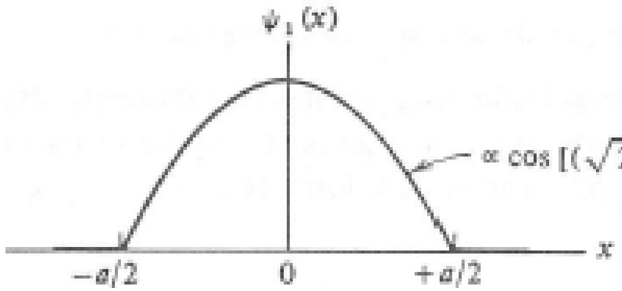
$$-\frac{k_1}{k_2} = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

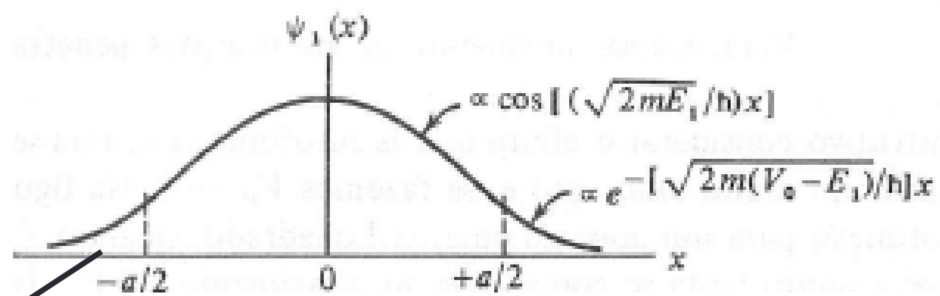
Isto esta relacionado a profundidade do poço (Vo) e com a largura do poço (a)
E esta relação só pode ser satisfeita para certos valores de E.
A solução não pode ser resolvida explicitamente para E.
Deve ser obtida pelo método geométrico./

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 e 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**.

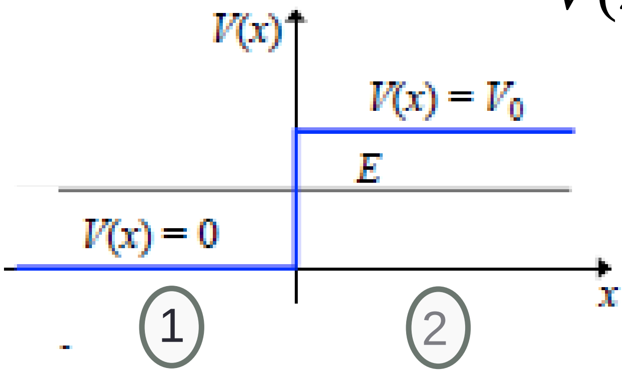
Para um estado ligado, a probabilidade de encontrar a partícula se concentra em sua maior parte em uma região finita do espaço.

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.

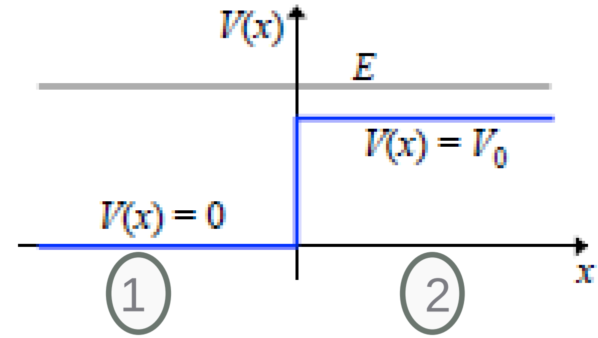
"Potencial Degrau"

E < Vo

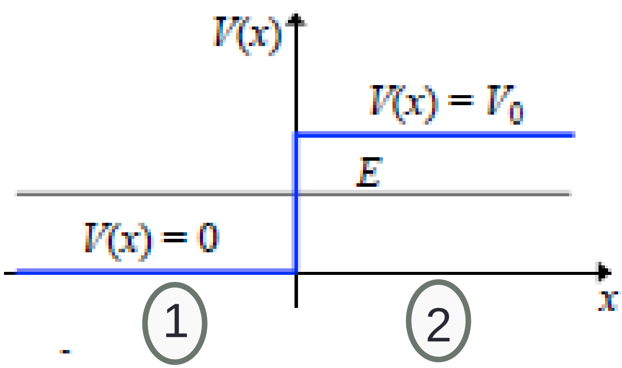


$$V(x) = \begin{cases} \text{Vo} & x > 0 \\ 0 & x <= 0 \end{cases}$$

E > Vo



1) Caso E< Vo



Região 1 x<0

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

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

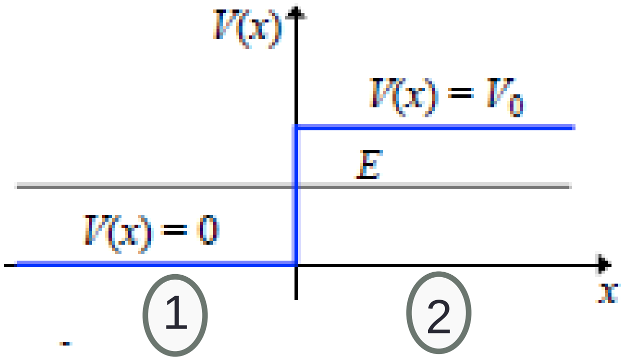
Região 2 x>0

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Potencial Degrau"



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$ Região 1 $$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$ Região 2

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

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

1) Condição de finitude

x > 0 região 2 $$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$

$$\boxed{D=0}$$

2) Condição de continuidade a função e da derivada

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

$$Ae^0 + Be^0 = C$$

$$\boxed{A + B = C}$$

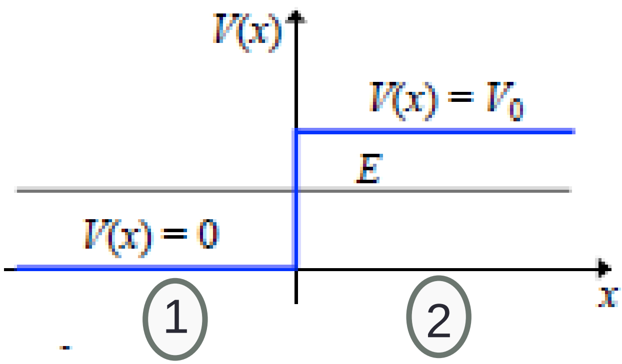
$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

$$Aik_1e^0 - Bik_1e^0 = -Ck_2e^0$$

$$\boxed{A - B = i\frac{k_2}{k_1}C}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$ Região 1 $$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

$$A + B = C \qquad 1$$

$$A - B = i\frac{k_2}{k_1}C \qquad 2$$

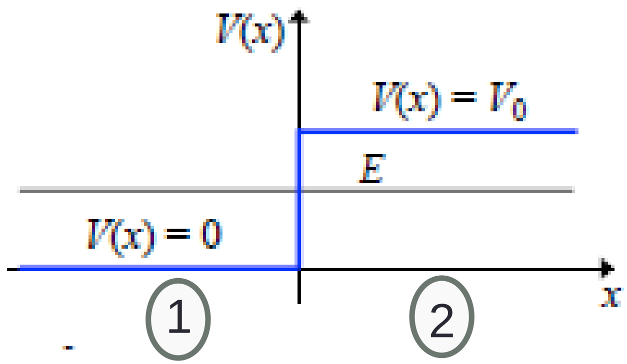
1 + 2 $$A = \frac{C}{2}\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)$$

2 - 1 $$B = \frac{C}{2}\left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2}\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{ik_1x} + \frac{C}{2}\left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : x< 0} \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : x> 0} \end{cases}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Potencial Degrau"



Coeficiente de Reflexão:

O fluxo de partículas na direção da onda, ou seja número de partículas que atravessam, uma certa posição por unidade de tempo é dado por

$\psi^*(x).\psi(x)$ Vezes a velocidade das partículas

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$ Região 1

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$ Região 2

$$R = \frac{v_r \psi_r^* \psi_r}{v_i \psi_i^* \psi_i} \qquad R = \frac{B^* B}{A^* A} \qquad v_r = v_i$$

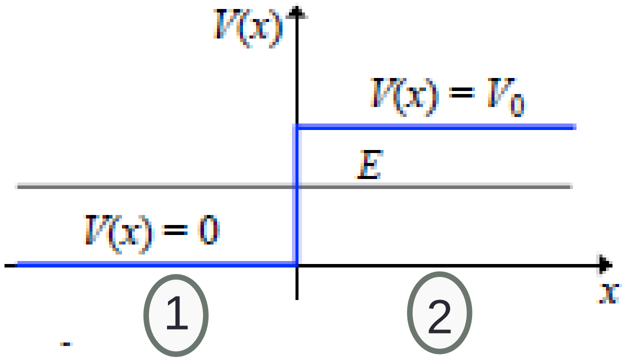
$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{C}{2}\left(1 + i\dfrac{k_2}{k_1}\right)e^{ik_1x} + \dfrac{C}{2}\left(1 - i\dfrac{k_2}{k_1}\right)e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : x< 0} \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : x> 0} \end{cases}$$

$$\boxed{R = 1}$$

De pleno acordo com a mecânica clássica para x<0

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



Coeficiente de Reflexão:

O fluxo de partículas na direção da onda, ou seja número de partículas que atravessam, uma certa posição por unidade de tempo é dado por

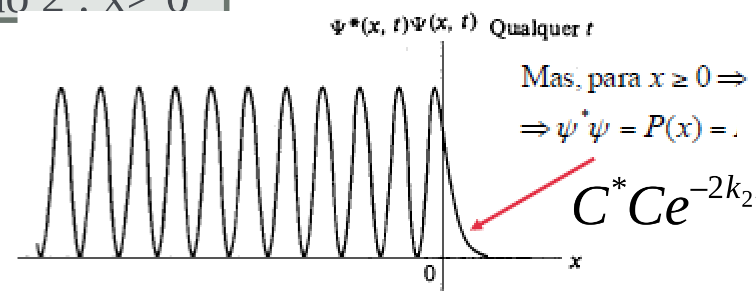
$$\psi^*(x).\psi(x)$$

$$\psi^*(x).\psi(x) = C^* C e^{-2k_2 x}$$

Região 2 : x> 0

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$$ Região 1

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x}$$ Região 2



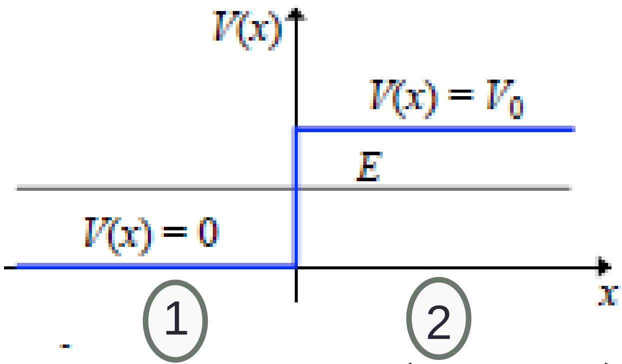
$$C^* C e^{-2k_2 x} > 0$$

Nesta região temos E<Vo e portanto energia cinética seria negativa

- classicamente esta é uma região proibida para as partículas
- Quanticamente pode-se encontrar a partícula nesta região, sendo que cada vez menos provável encontrar a partícula com o aumento de x.
- A penetração da partícula na região proibida (por intervalo muitos pequenos) é possível devido ao princípio de incerteza
- A profundidade de penetração é pequena

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



“Potencial Degrau”

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$ Região 1

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$ Região 2

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2}\left(1+i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{ik_1x} + \frac{C}{2}\left(1-i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : x< 0} \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : x> 0} \end{cases}$$

$$\frac{C}{2}\left(\alpha(\cos k_1x + i\,\mathrm{sen}\,k_1x) + \alpha^*(\cos k_1x - i\,\mathrm{sen}\,k_1x)\right)$$

$$\boxed{\alpha = \left(1+i\frac{k_2}{k_1}\right)}$$

$$C\left(\cos k_1x - \frac{k_2}{k_1}\mathrm{sen}\,k_1x\right)$$

$$\boxed{e^{ik_1x} = \cos k_1x + i\,\mathrm{sen}\,k_1x}$$

$$\boxed{\psi(x) = \begin{cases} C\cos k_1x - C\frac{k_2}{k_1}\mathrm{sen}\,k_1x & \text{Região 1 : x< 0} \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : x> 0} \end{cases}}$$