

Física Moderna I

Aula 15

Marcelo G Munhoz
Edifício HEPIC, sala 212, 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:

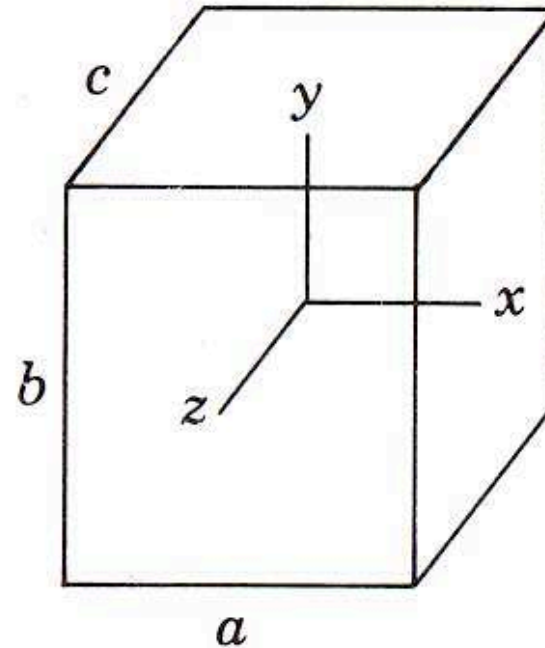
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

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



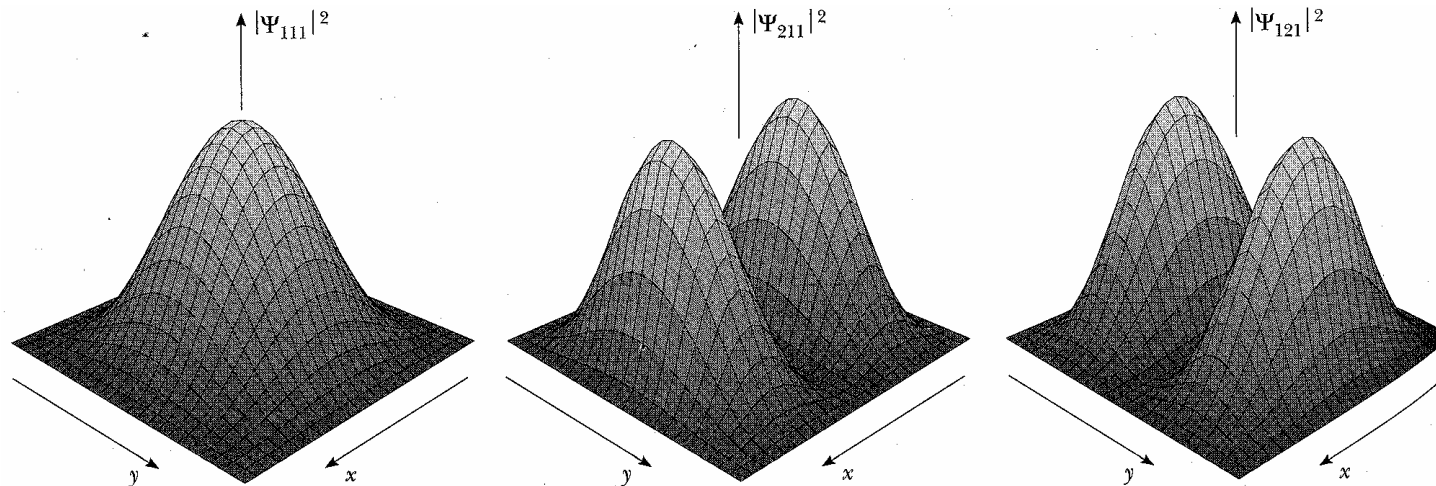
Partícula na caixa retangular

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

$$n_1, n_2, n_3 = 1, 3, 5, \dots$$

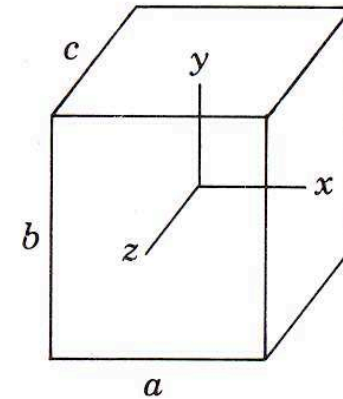
$$\psi(x) = \sqrt{2/a}\sqrt{2/b}\sqrt{2/c} \cdot \text{sen}\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \cdot \text{sen}\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right) \cdot \text{sen}\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right)$$

$$n_1, n_2, n_3 = 2, 4, 6, \dots$$

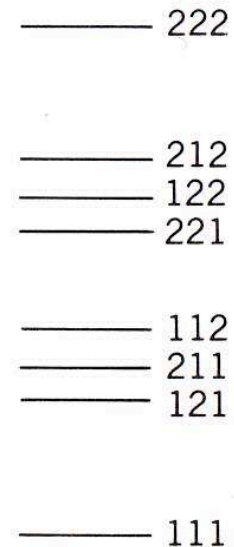


Partícula na caixa retangular

- 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 um valor diferente de energia

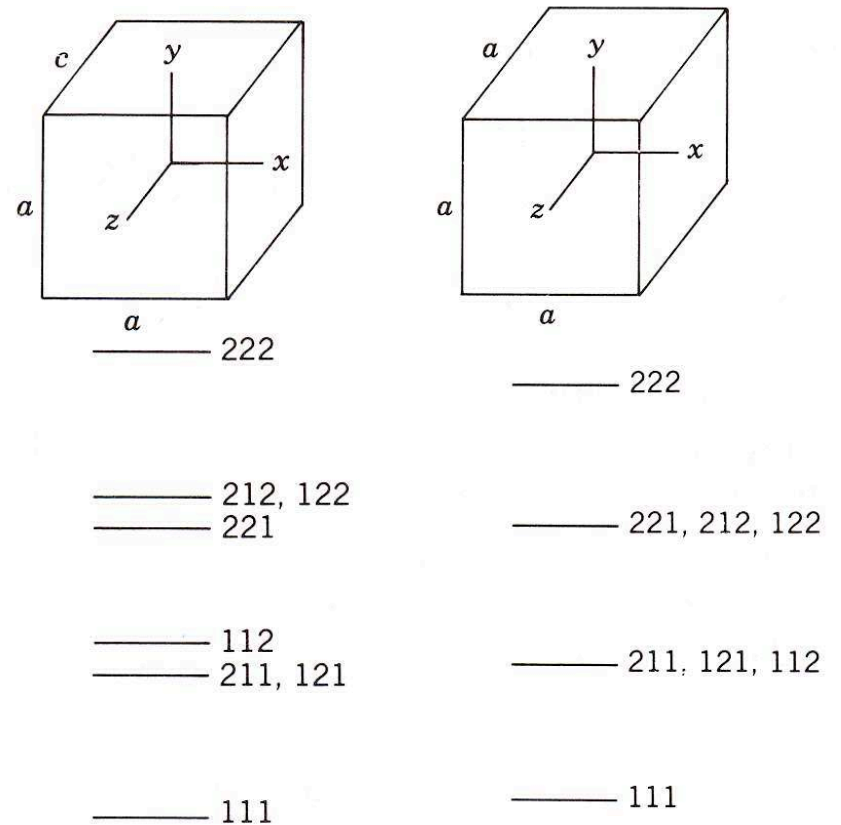


$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$



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

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

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

Equação de Schroedinger em três dimensões

$$\ell = 0 \qquad m = 0 \qquad Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$\ell = 1 \qquad m = 1 \qquad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$m = 0 \qquad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$m = -1 \qquad Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$$

$$\ell = 2 \qquad m = 2 \qquad Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$$

$$m = 1 \qquad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$$

$$m = 0 \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$m = -1 \qquad Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\phi}$$

$$m = -2 \qquad Y_{2-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\phi}$$

Harmônicos esféricos

Equação de Schroedinger em três dimensões

- Portanto, para qualquer sistema físico em que o potencial seja central, ou seja, só dependa da variável r em coordenadas esféricas, como por exemplo para o caso do potencial Coulombiano, a solução da equação de Schroedinger para as coordenadas φ ou θ será dada pelos esféricos harmônicos
- O próximo passo consiste em resolver a parte radial (coordenada r) da equação de Schroedinger para um dado potencial