

4300375 - Física moderna I

Aula 9 – Soluções da equação de Schrödinger

Parte 2

Nesta aula...

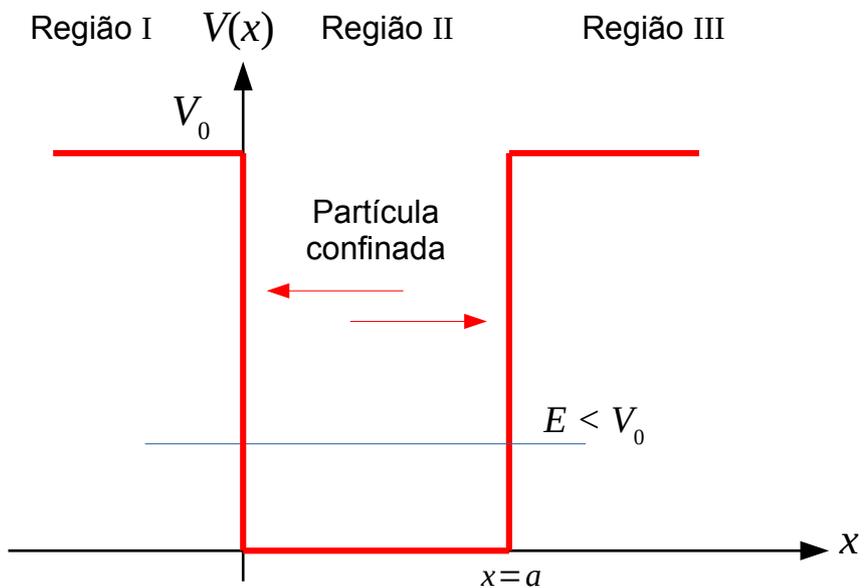
- Soluções da equação de Schrödinger, parte 2
 - Potencial de confinamento
 - O poço quadrado infinito
 - O poço quadrado finito

Soluções da equação de Schrödinger

- De agora em diante no curso, resolveremos a equação de Schrödinger para alguns potenciais simples, porém com características importantes para o entendimento da mecânica quântica
 - Potenciais a serem resolvidos no curso:
 - Potencial degrau
 - Potencial barreira
 - Potencial quadrado infinito
 - Potencial quadrado finito
 - Oscilador harmônico
 - Átomo de hidrogênio
- } Aula anterior
- } Nesta aula
- } Até o fim do curso

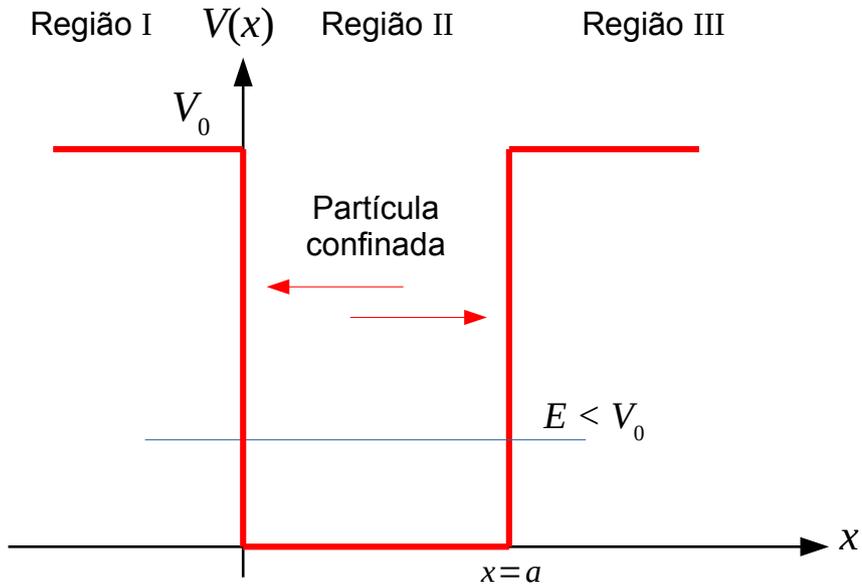
O poço quadrado

A partícula aprisionada...



O poço quadrado

A partícula aprisionada...

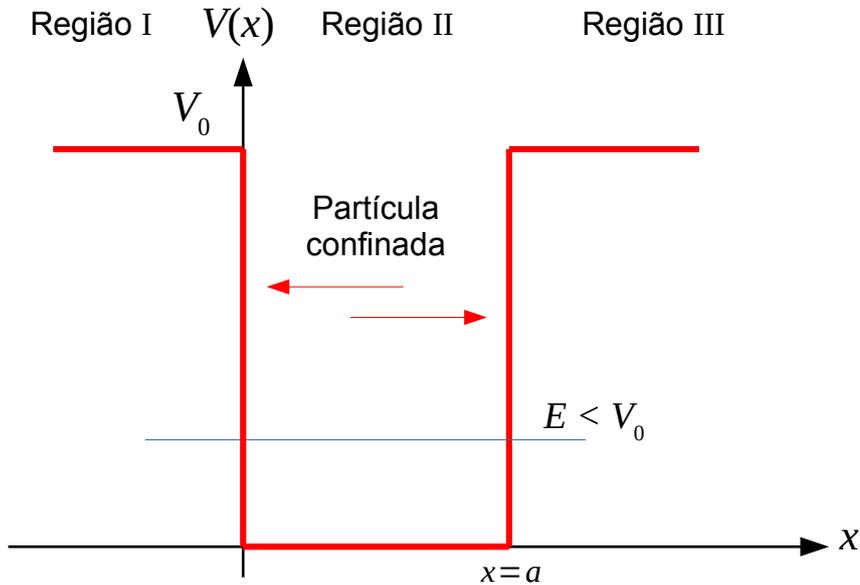


$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} + B \cdot e^{-k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C \cdot e^{ik_{II}x} + D \cdot e^{-ik_{II}x} \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = F \cdot e^{k_{III}x} + G \cdot e^{-k_{III}x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

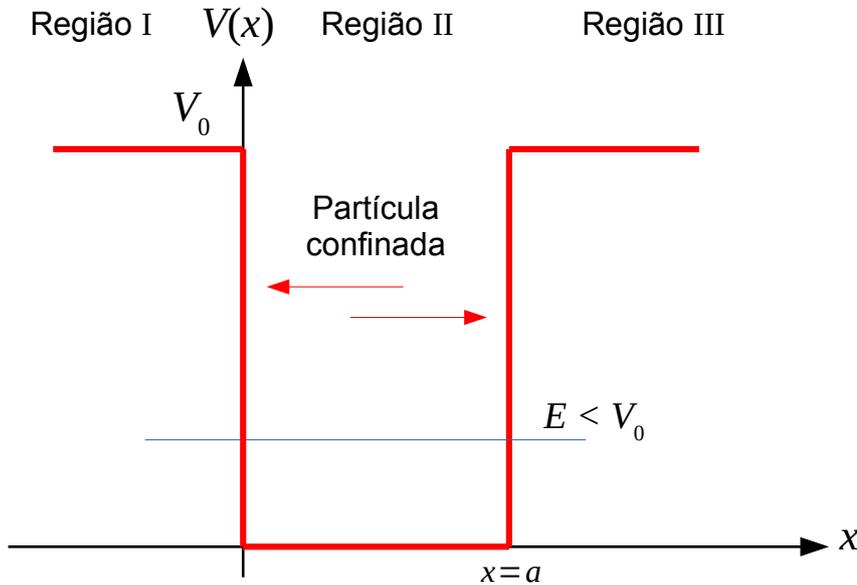
$$k_I = k_{III} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} + B \cdot e^{-k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C \cdot e^{ik_{II}x} + D \cdot e^{-ik_{II}x} \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = F \cdot e^{k_{III}x} + G \cdot e^{-k_{III}x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_I = k_{III} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

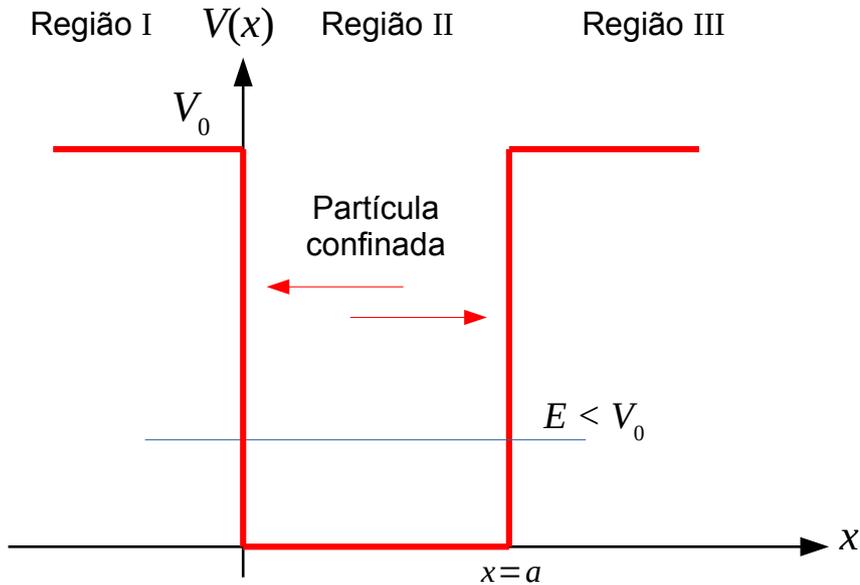
Equação de Schrödinger independente do tempo

Note que: $B = F = 0$! Por que?

Note também que: $C = \pm D$! Por que?

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C [e^{ik_{II}x} \pm e^{-ik_{II}x}] \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = G \cdot e^{-k_I x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

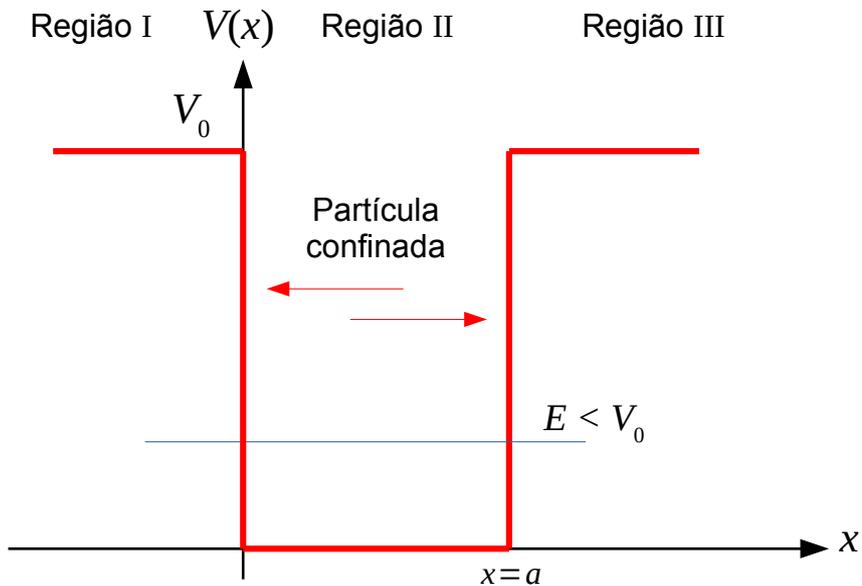
$$k_I = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C [e^{ik_{II}x} \pm e^{-ik_{II}x}] \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = G \cdot e^{-k_I x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Note que:

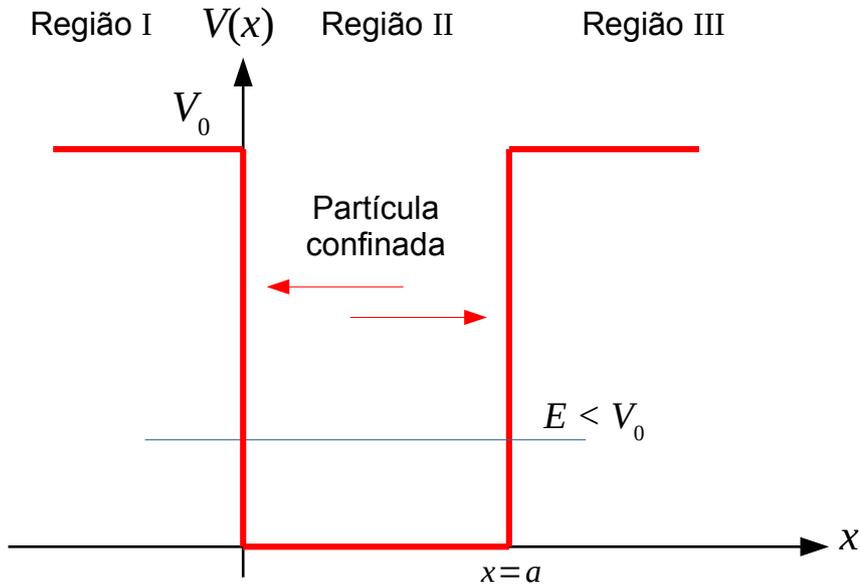
$$e^{i\theta} \pm e^{-i\theta} = \cos(\theta) + i \operatorname{sen}(\theta) \pm [\cos(\theta) - i \operatorname{sen}(\theta)]$$

$$e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2 \cdot \cos(\theta)$$

$$e^{i\theta} - e^{-i\theta} = 2i \cdot \operatorname{sen}(\theta)$$

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_c \cdot \cos(k_{II} x) + C_s \cdot \sin(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = G \cdot e^{-k_I x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

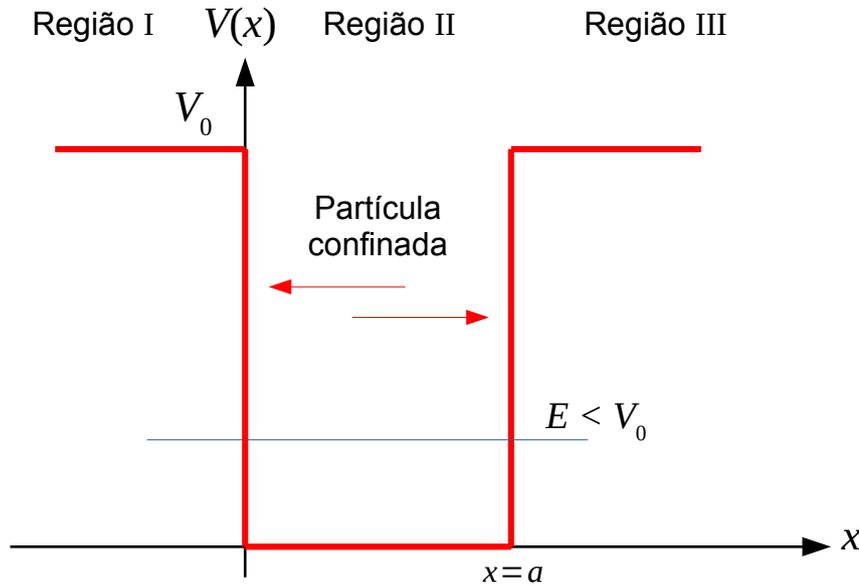
$$k_I = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_c \cdot \cos(k_{II} x) + C_s \cdot \sin(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = G \cdot e^{-k_I x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

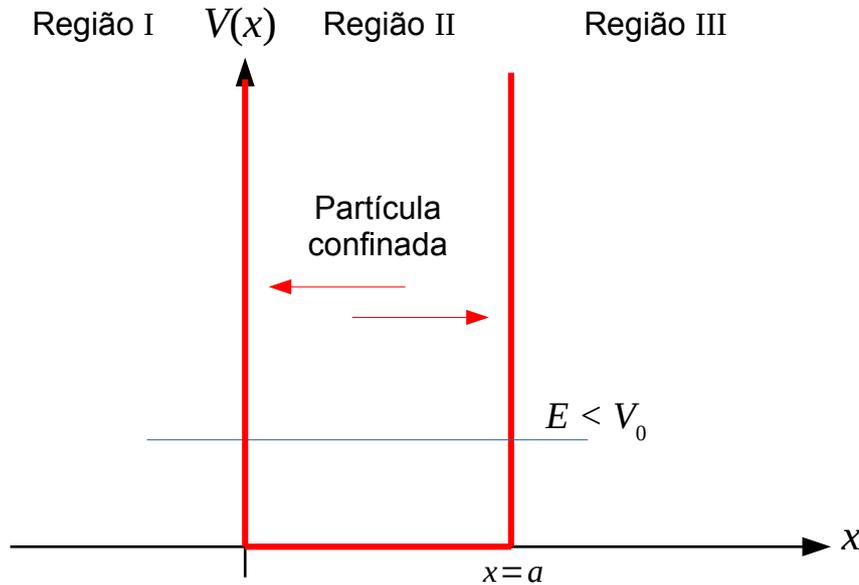
Equação de Schrödinger independente do tempo

Note que, se $V_0 \gg E$:

$$\begin{cases} \psi_I(x) \rightarrow 0 & (x < 0) \\ \psi_{III}(x) \rightarrow 0 & (a < x) \end{cases}$$

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_c \cdot \cos(k_{II} x) + C_s \cdot \sin(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = G \cdot e^{-k_I x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_I = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \rightarrow \infty$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

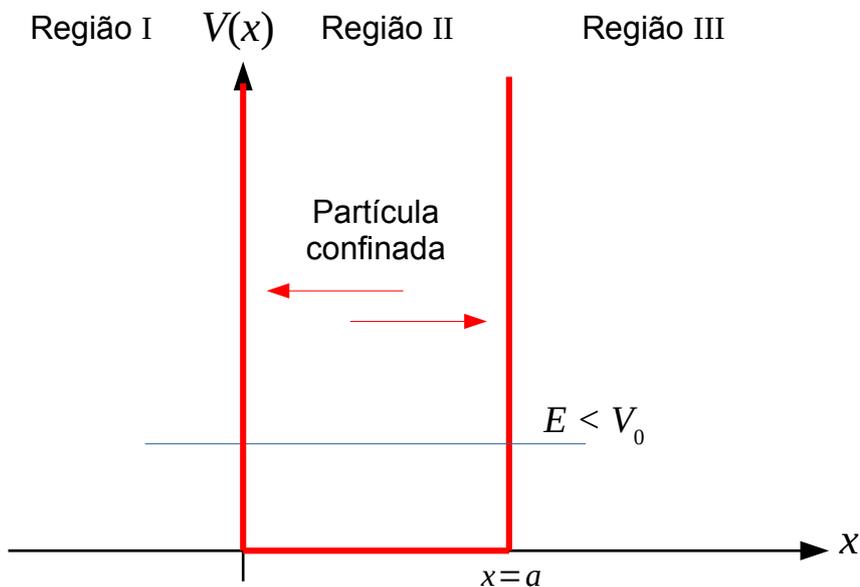
Equação de Schrödinger independente do tempo

Note que, se $V_0 \gg E$:

$$\begin{cases} \psi_I(x) \rightarrow 0 & (x < 0) \\ \psi_{III}(x) \rightarrow 0 & (a < x) \end{cases}$$

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$V_0 \gg E: \begin{cases} \psi_I(x) \rightarrow 0 & (x < 0) \\ \psi_{III}(x) \rightarrow 0 & (a < x) \end{cases}$$

$$\psi_I(x) = 0 \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_c \cdot \cos(k_{II} x) + C_s \cdot \sin(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = 0 \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Aplicando a condição de continuidade da função de onda:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0 \Rightarrow C_c \cdot \cos(0) + C_s \cdot \sin(0) = 0$$

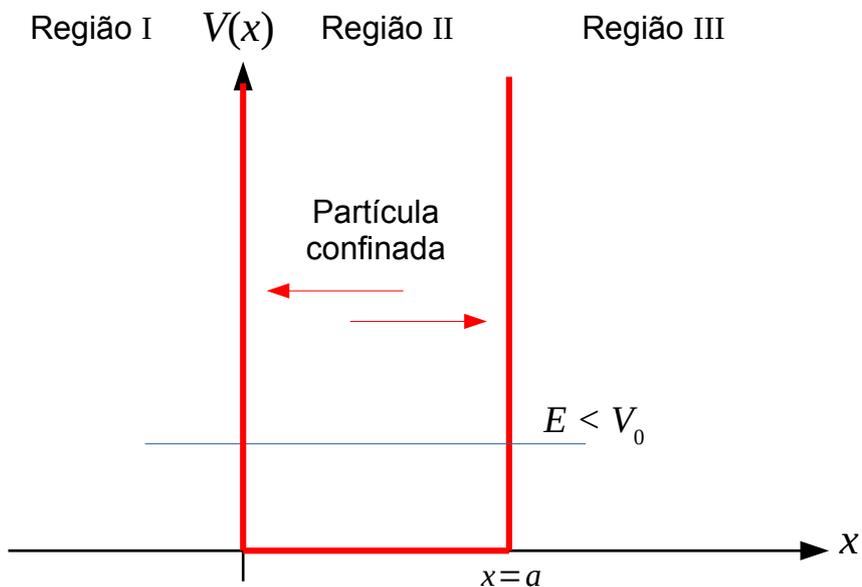
$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) = 0 \Rightarrow C_c \cdot \cos(k_{II} a) + C_s \cdot \sin(k_{II} a) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$V_0 \gg E: \begin{cases} \psi_I(x) \rightarrow 0 & (x < 0) \\ \psi_{III}(x) \rightarrow 0 & (a < x) \end{cases}$$

$$\psi_I(x) = 0 \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_c \cdot \cos(k_{II} x) + C_s \cdot \sin(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = 0 \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Aplicando a condição de continuidade da função de onda:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0 \Rightarrow \cancel{C_c} \cdot \cos(0) + C_s \cdot \sin(0) = 0$$

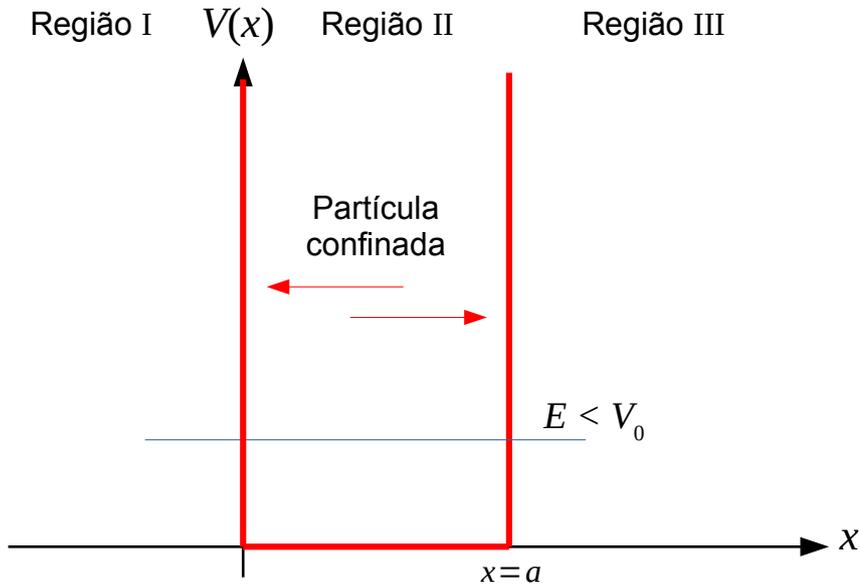
$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) = 0 \Rightarrow \cancel{C_c} \cdot \cos(k_{II} a) + C_s \cdot \sin(k_{II} a) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$V_0 \gg E: \begin{cases} \psi_I(x) \rightarrow 0 & (x < 0) \\ \psi_{III}(x) \rightarrow 0 & (a < x) \end{cases}$$

Soluções ($V_0 \gg E$):

$$\psi_I(x) = 0 \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_s \cdot \text{sen}(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = 0 \quad (a < x)$$

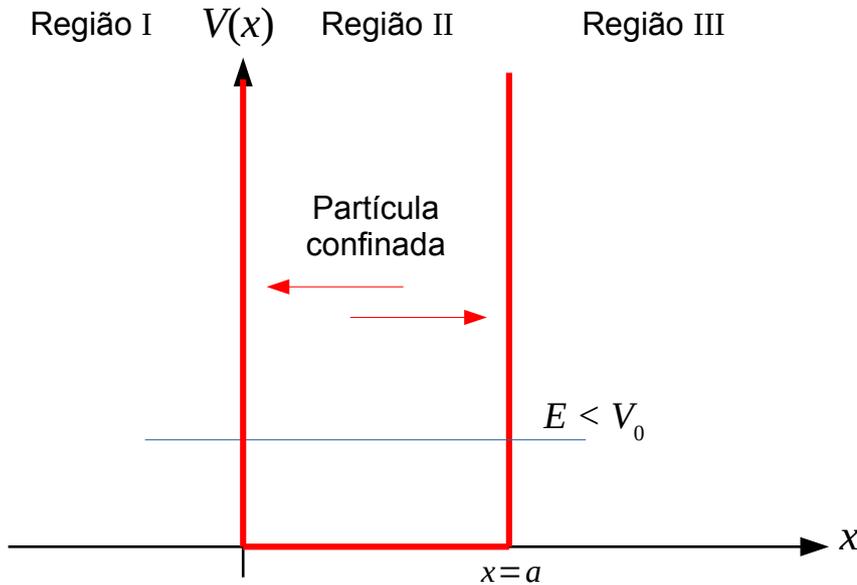
$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$V_0 \gg E: \begin{cases} \psi_I(x) \rightarrow 0 & (x < 0) \\ \psi_{III}(x) \rightarrow 0 & (a < x) \end{cases}$$

Soluções ($V_0 \gg E$):

$$\psi_I(x) = 0 \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_s \cdot \text{sen}(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = 0 \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Ainda da condição de continuidade da função de onda:

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) = 0 \Rightarrow \text{sen}(k_{II} a) = 0$$

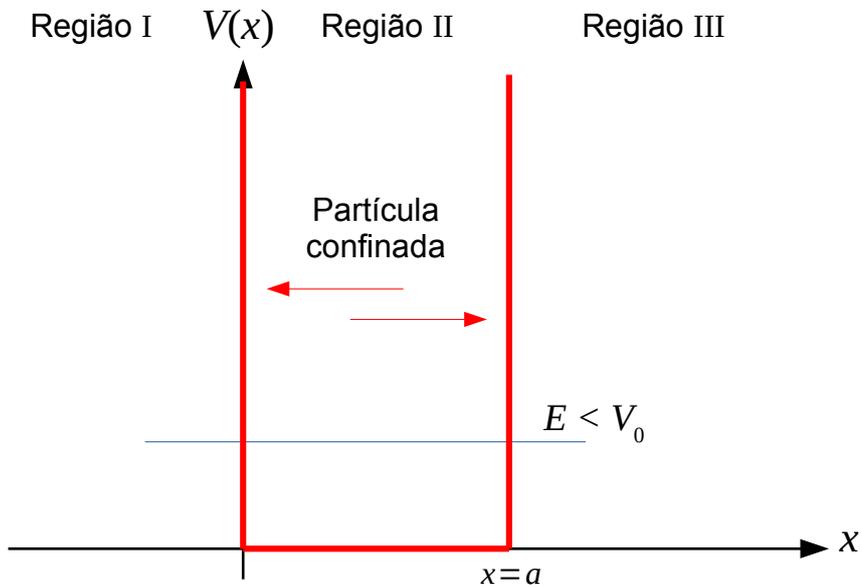
$$k_{II} a = n\pi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



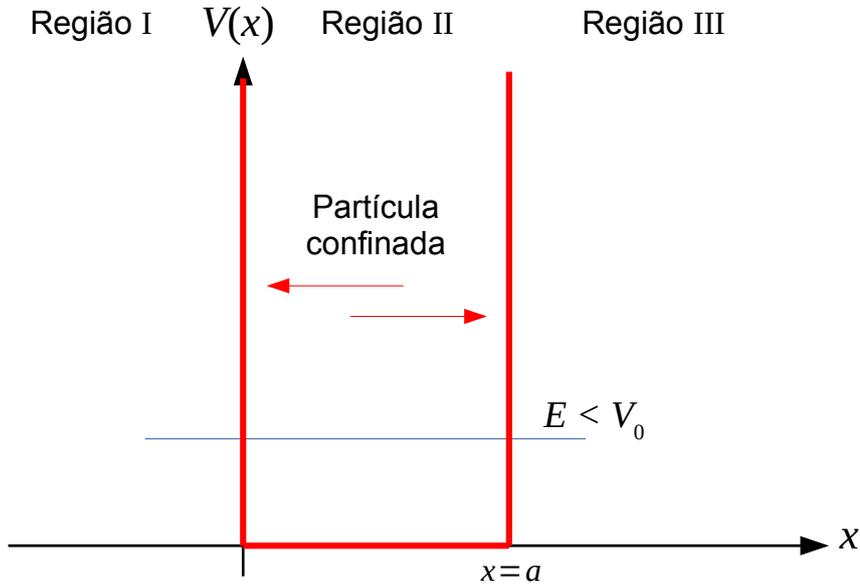
$$k_{II} a = n \pi \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

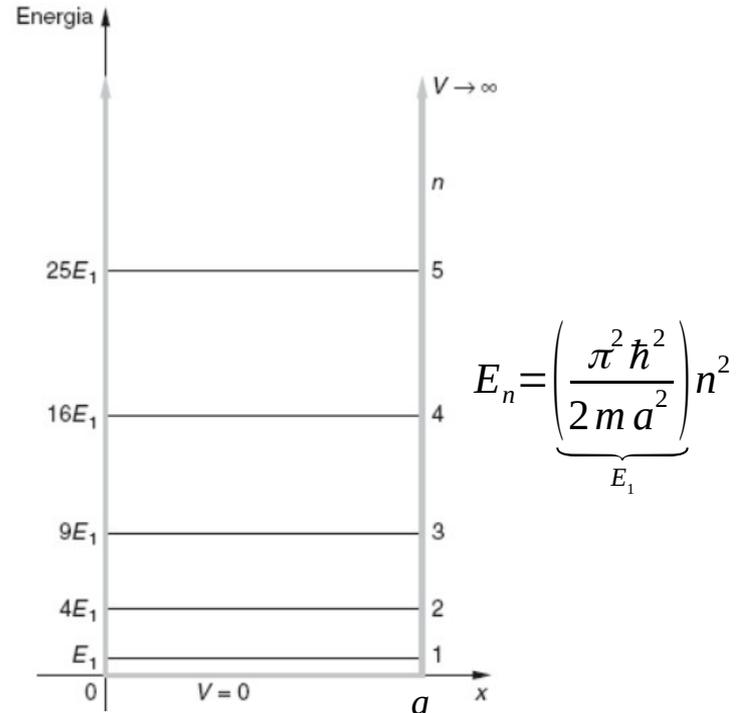
Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$k_{II} a = n \pi \Rightarrow E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m a^2}$$

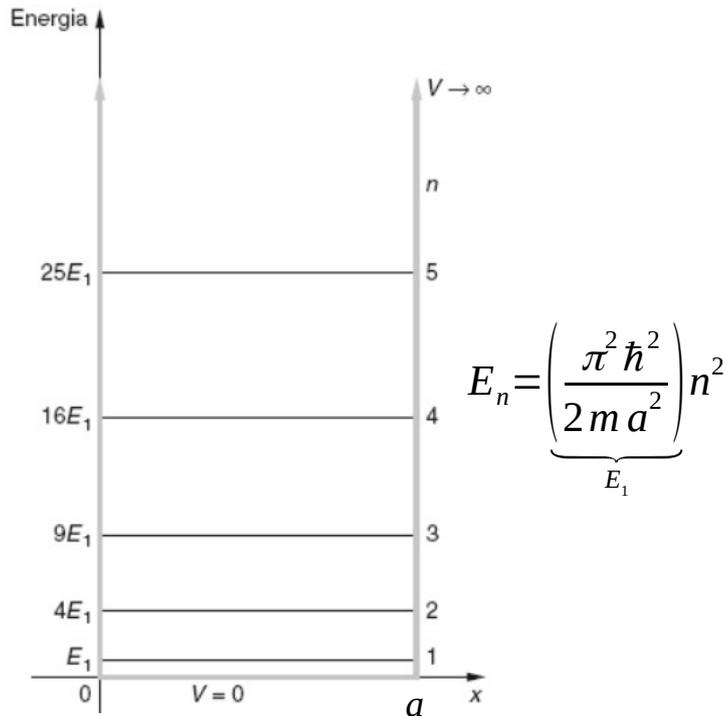


$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



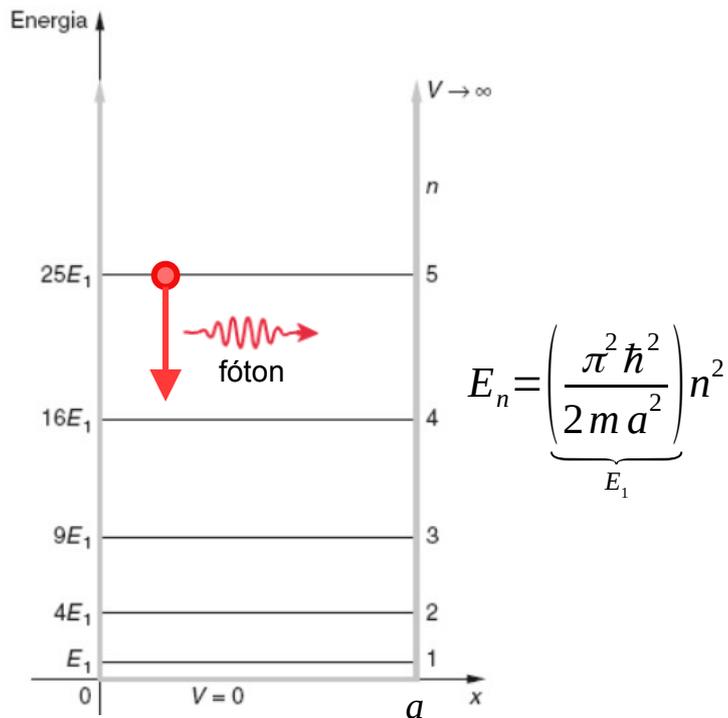
Diferença de energia entre níveis ($E_i > E_f$)

$$\Delta E = E_i - E_f = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} (n_i^2 - n_f^2)$$

Energia de fótons emitidos na transição entre os estados i e f !

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



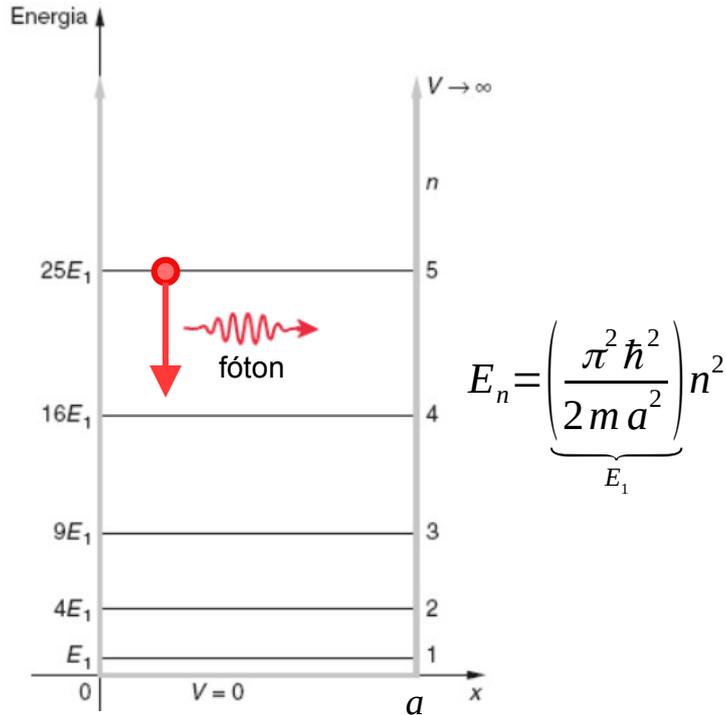
Diferença de energia entre níveis ($E_i > E_f$)

$$\Delta E = E_i - E_f = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} (n_i^2 - n_f^2)$$

Energia de fótons emitidos na transição entre os estados i e f !

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Diferença de energia entre níveis ($E_i > E_f$)

$$\Delta E = E_i - E_f = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} (n_i^2 - n_f^2)$$

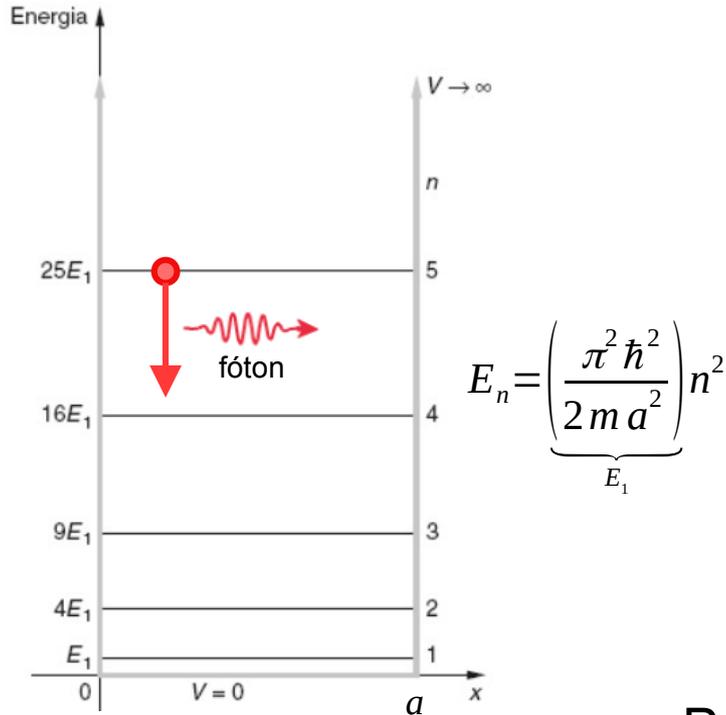
Energia de fótons emitidos na transição entre os estados i e f !

Diferença de energia entre dois níveis consecutivos:

$$\Delta E = E_i - E_{i-1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} \left[n_i^2 - (n_i - 1)^2 \right] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} (2n_i - 1)$$
$$n_i^2 - (n_i - 1)^2 = n_i^2 - (n_i^2 - 2n_i + 1) = 2n_i - 1$$

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Diferença de energia entre níveis ($E_i > E_f$)

$$\Delta E = E_i - E_f = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} (n_i^2 - n_f^2)$$

Energia de fótons emitidos na transição entre os estados i e f !

Diferença de energia entre dois níveis consecutivos:

$$\Delta E = E_i - E_{i-1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} [n_i^2 - (n_i - 1)^2] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} (2n_i - 1)$$

$$n_i^2 - (n_i - 1)^2 = n_i^2 - (n_i^2 - 2n_i + 1) = 2n_i - 1$$

Princípio da correspondência: $\lim_{n_i \rightarrow \infty} \frac{\Delta E}{E} \propto \lim_{n_i \rightarrow \infty} \frac{n_i}{n_i^2} = 0$

O poço quadrado

A partícula aprisionada...

Diferença de energia entre dois níveis consecutivos:

$$\Delta E = E_i - E_{i-1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n_i - 1)$$

Energia do fóton emitido na transição do primeiro estado excitado para o estado fundamental:

$$\Delta E_{21} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{3(hc)^2}{8mc^2 a^2}$$

Relação entre o comprimento de onda e o tamanho do sistema:

$$\frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{8mc^2}{3hc} a^2$$

Fótons emitidos por processos nucleares têm energias típicas da ordem de 10^6 eV (1 MeV)

Imagine um próton confinado no núcleo ($m = 938$ MeV). Qual é o tamanho esperado para o núcleo supondo um potencial quadrado de confinamento?

$$a^2 = \frac{3(hc)^2}{8mc^2 \Delta E_{21}} = \frac{3(1240[\text{eV}\cdot\text{nm}])^2}{8 \cdot 938 \times 10^6 [\text{eV}] \cdot 10^6 [\text{eV}]}$$

$$a \sim 10^{-5} \text{ nm} = 10 \text{ fm} \quad (1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m})$$

O poço quadrado

A partícula aprisionada...

Diferença de energia entre dois níveis consecutivos:

$$\Delta E = E_i - E_{i-1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} (2 n_i - 1)$$

Energia do fóton emitido na transição do primeiro estado excitado para o estado fundamental:

$$\Delta E_{21} = \frac{3 \pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} = \frac{3 (h c)^2}{8 m c^2 a^2}$$

Relação entre o comprimento de onda e o tamanho do sistema:

$$\frac{3 \pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} = \frac{h c}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{8 m c^2}{3 h c} a^2$$

Qual é o tamanho esperado para um sistema quântico de potencial quadrado emitir fótons no intervalo da luz visível?

400 nm (violeta) até 750 nm (vermelho)

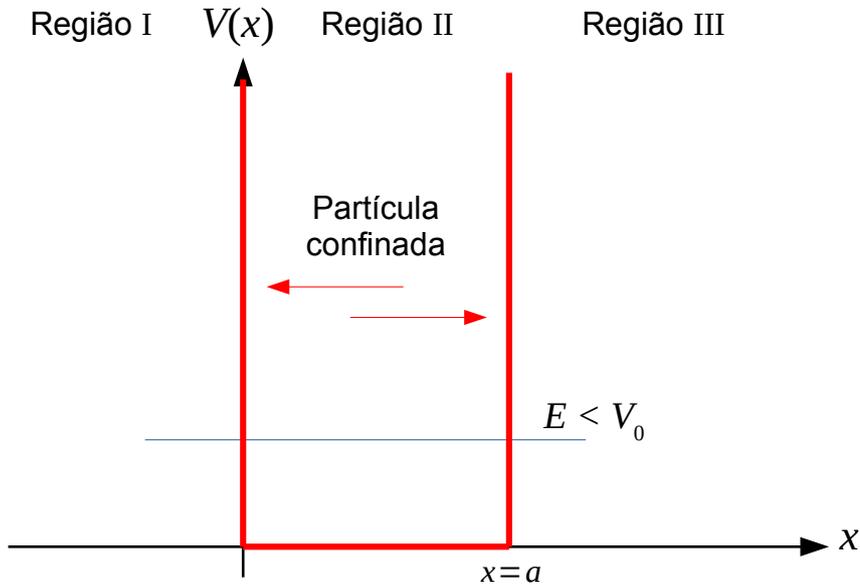
$$a_{\min}^2 = \frac{3 (h c)}{8 m c^2} \lambda = \frac{3 (1240 [\text{eV}\cdot\text{nm}])}{8 \cdot 511 \times 10^3 [\text{eV}]} 400 [\text{nm}]$$

$$a_{\max}^2 = \frac{3 (h c)}{8 m c^2} \lambda = \frac{3 (1240 [\text{eV}\cdot\text{nm}])}{8 \cdot 511 \times 10^3 [\text{eV}]} 750 [\text{nm}]$$

Em ambos os casos, o tamanho típico é: $a \sim 1 \text{ nm}$

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \\ = \int_0^a C_s^2 \sin^2\left(\frac{n \pi x}{a}\right) dx = 1 \quad \Rightarrow \quad C_s = (2/a)^{1/2}$$

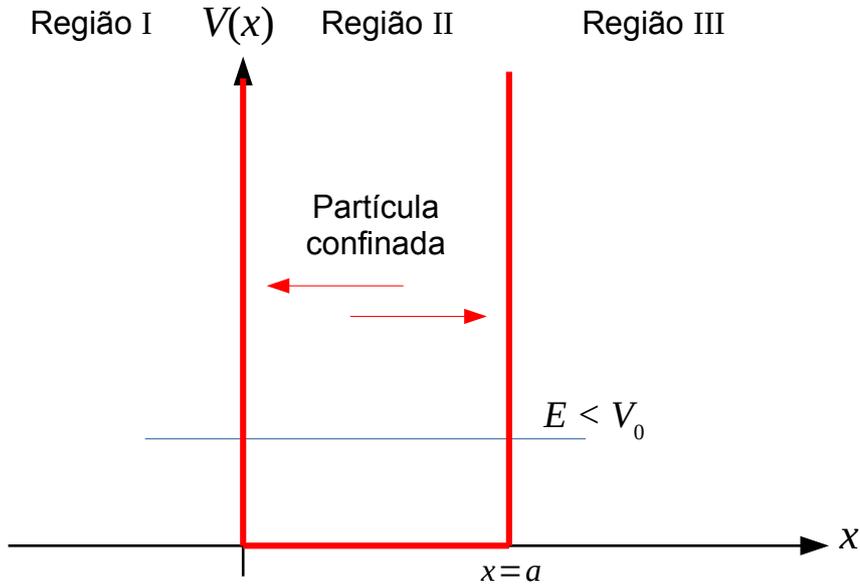
$$\psi_n(x) = \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)} \sin\left(\frac{n \pi x}{a}\right) \\ \text{com } n = 1, 2, 3, \dots$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

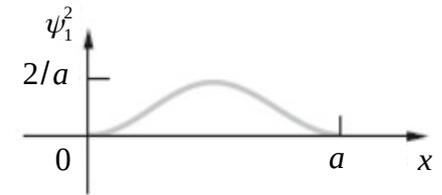
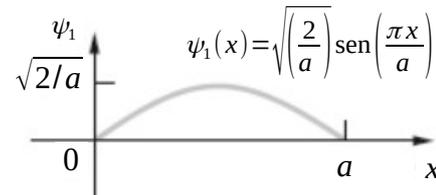
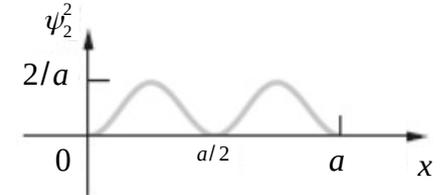
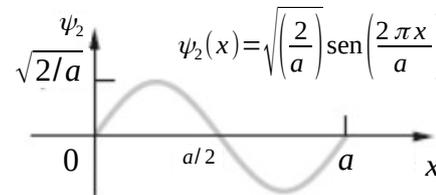
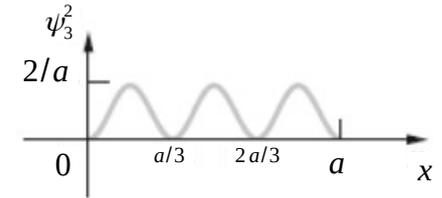
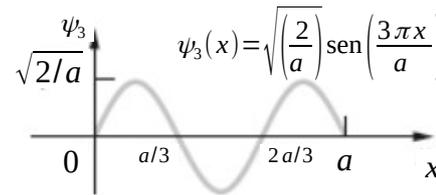
O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Função de onda

Densidade de probabilidade

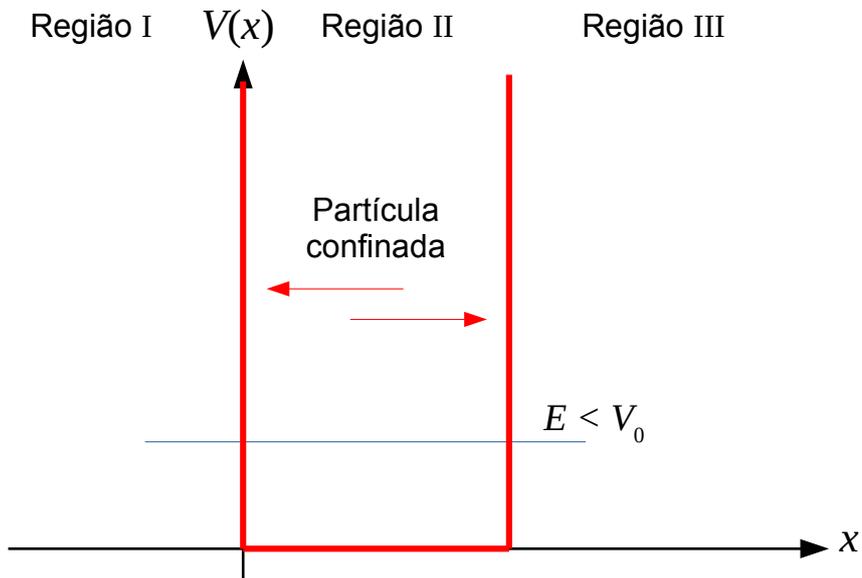


$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

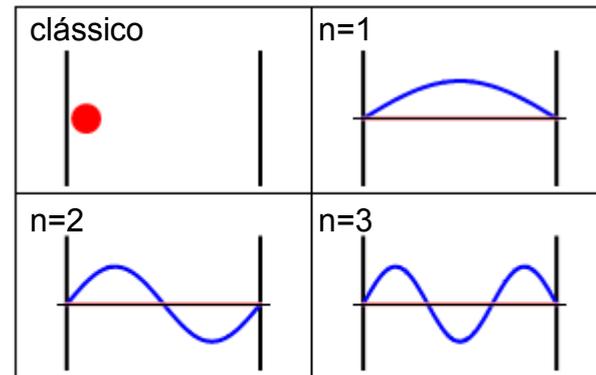
O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)} \text{sen}\left(\frac{n \pi x}{a}\right) \cdot e^{-iE_n t / \hbar}$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$



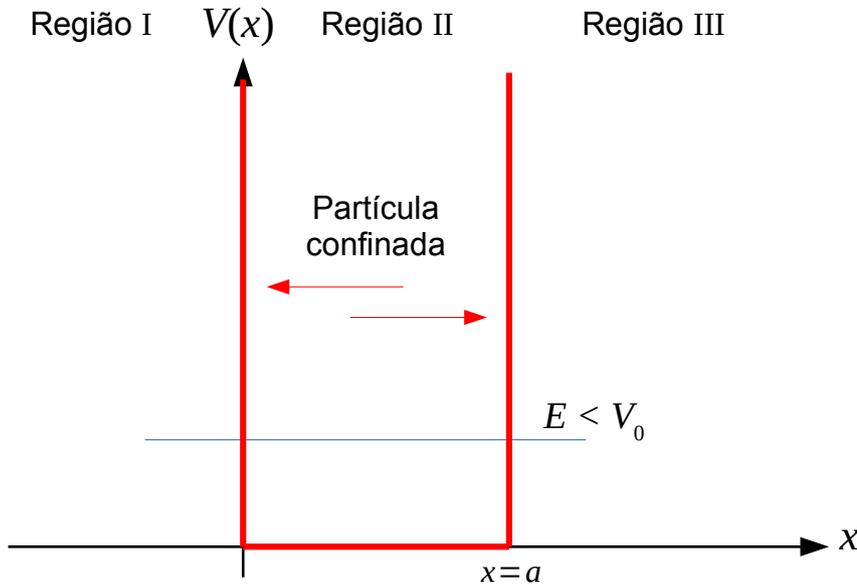
wikipedia.org

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

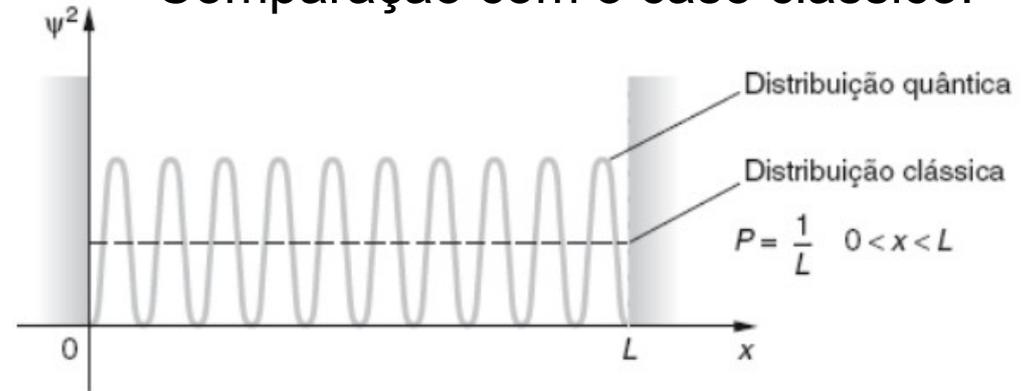
O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$\psi(x) = \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad \text{com } n=1,2,3,\dots$$

Comparação com o caso clássico:



$$[\psi^2(x)]_{\text{med}} = \left[\left(\frac{2}{a}\right) \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right]_{\text{med}} = \frac{2}{a} \frac{1}{2} = \frac{1}{a}$$

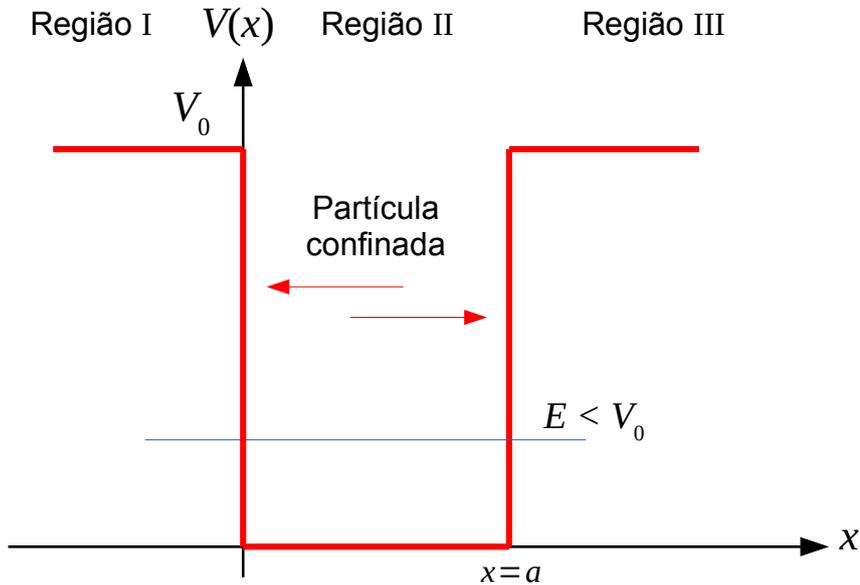
A probabilidade média é igual à clássica!

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_c \cdot \cos(k_{II} x) + C_s \cdot \sin(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = G \cdot e^{-k_I x} \quad (a < x)$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

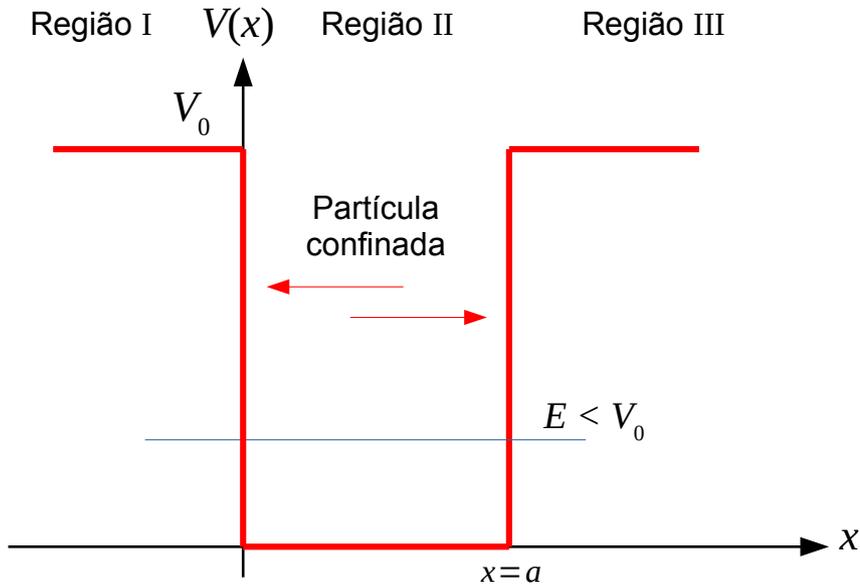
$$k_I = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Soluções:

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{k_I x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C_c \cdot \cos(k_{II} x) + C_s \cdot \sin(k_{II} x) \quad (0 < x < a)$$

$$\psi_{III}(x) = G \cdot e^{-k_I x} \quad (a < x)$$

Devemos aplicar as condições:

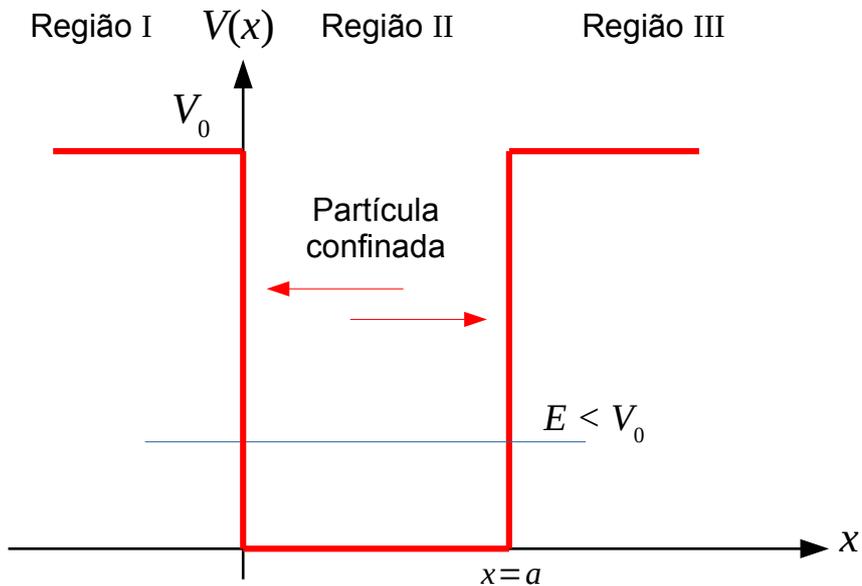
$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \\ \frac{d\psi_I(0)}{dx} = \frac{d\psi_{II}(0)}{dx} \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \\ \frac{d\psi_{II}(a)}{dx} = \frac{d\psi_{III}(a)}{dx} \end{array} \right.$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

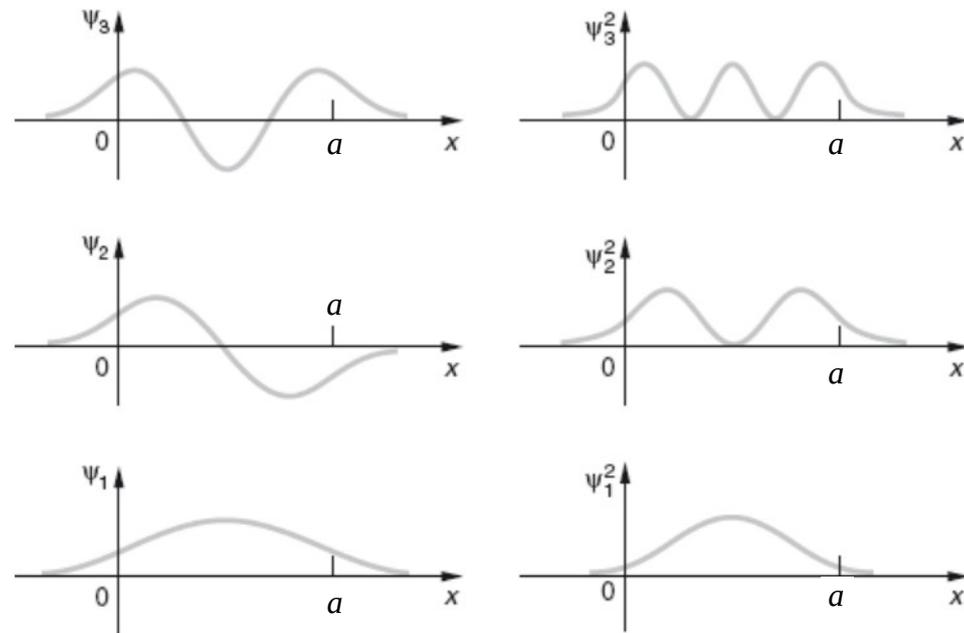
Equação de Schrödinger independente do tempo

O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Voltando ao caso, $V_0 > E$:

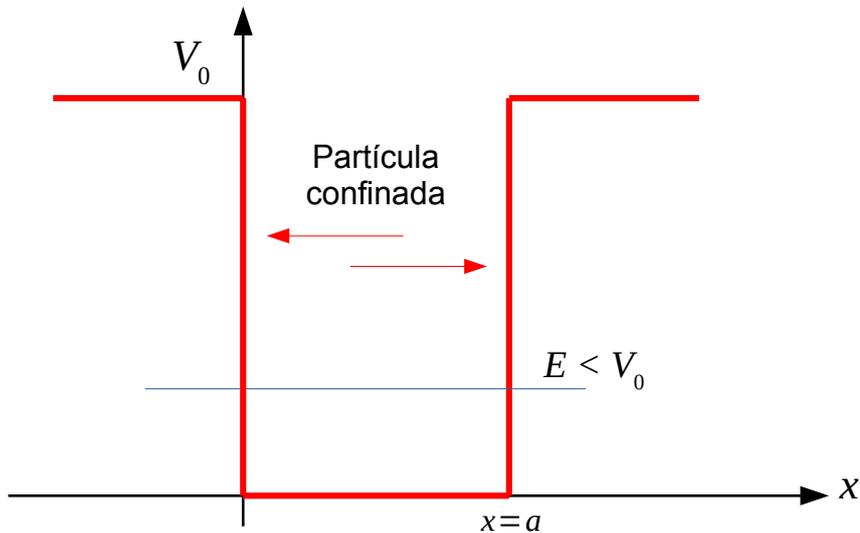


$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

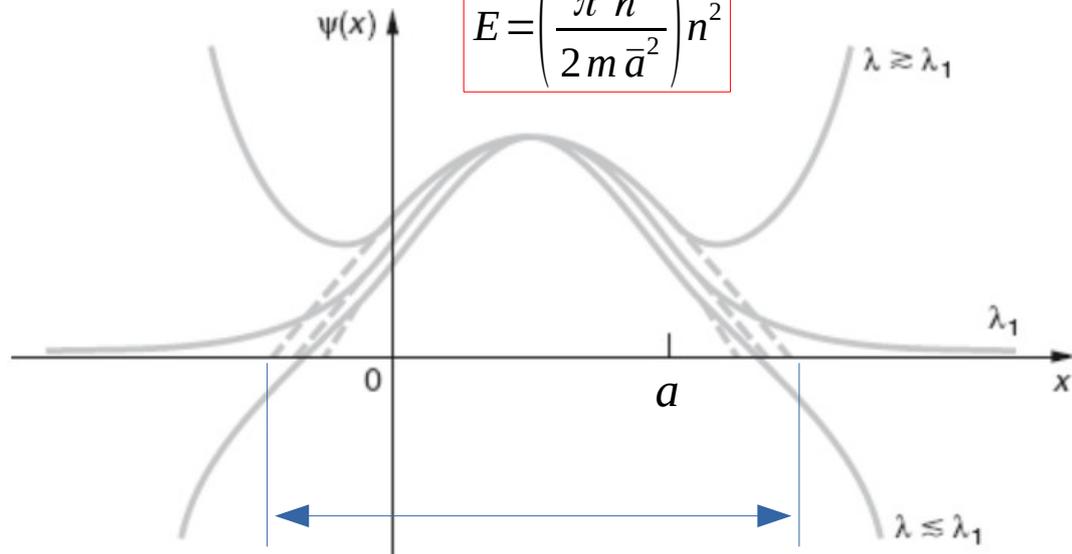
O poço quadrado

A partícula aprisionada...



Voltando ao caso, $V_0 > E$:

$$E = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} \right) n^2$$



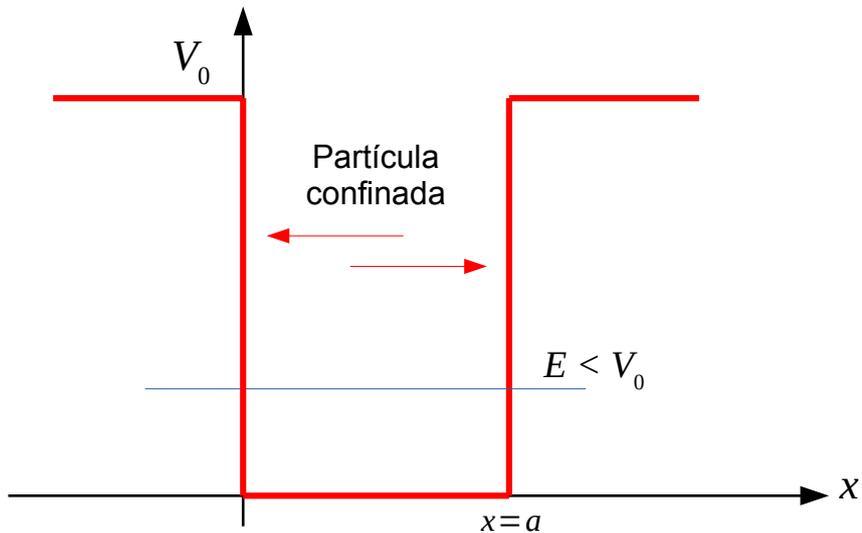
Comprimento efetivo maior → energia menor

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

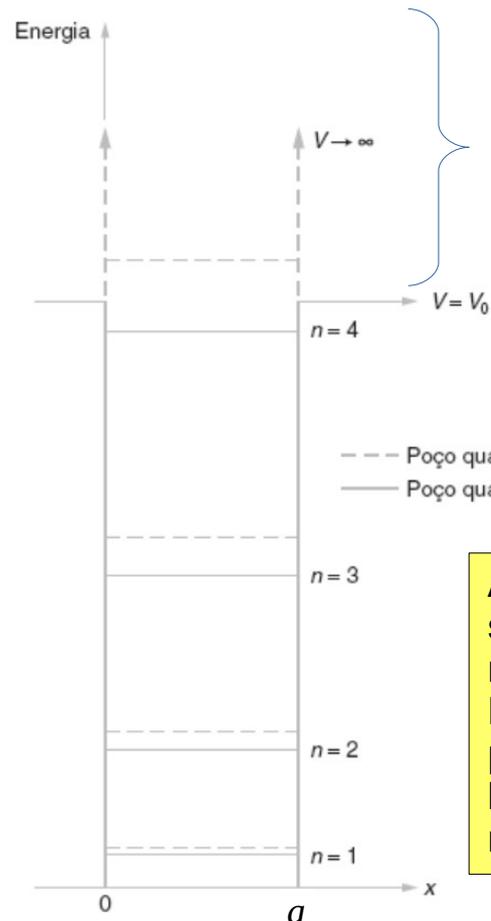
O poço quadrado

A partícula aprisionada...



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E] \psi(x) = 0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo



Região sem solução para o poço finito!

A solução para o poço finito se dá numericamente, e nós não vamos ver nesse curso. No entanto, é importante perceber que as energias são ligeiramente mais baixas e o número de estados é finito!

Resumo...

Começamos a ver soluções da equação de Schrödinger para partículas aprisionadas (poço quadrado)

- Em uma aproximação $V_0 \gg E$ (poço infinito) as soluções possíveis oferecem infinitos níveis discretos de energia
- Em média, a previsão quântica concorda com a previsão clássica para a distribuição de probabilidades
- No caso do poço finito, temos um número finito de estados possíveis e a energia é ligeiramente menor graças a um comprimento efetivo maior

Na próxima aula...

- Potencial do oscilador harmônico
- Solução tridimensional da equação de Schrödinger
 - Degenerescência