Introdução a Física Nuclear (4300406)

Prof. Valdir Guimarães

Instituto de Física

Aula 6 – Revisão quântica – potenciais

Função de onda para partícula livre

A função de onda descreve o movimento de uma partícula.

$$\Psi(x,t) = A[\cos(kx-\omega t) + i\,\mathrm{sen}(kx-\omega t)]$$

ou

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

$$\left\{\begin{array}{l} \lambda = 2\pi/k \\ k = 2\pi/\lambda \\ T = 2\pi/\omega\ , \\ \nu = 1/T = \omega/2\pi \\ \omega = 2\pi\nu\ . \end{array}\right.$$

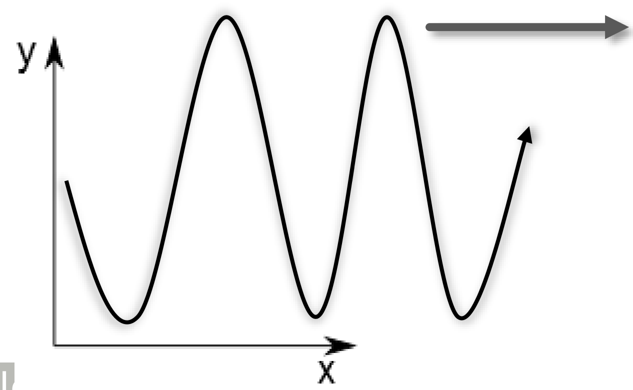
Partícula se movendo no sentido positivo de x com momento p e energia E

$$E = hf = \frac{h}{2\pi}2\pi f = \hbar\omega$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

$$\Rightarrow \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

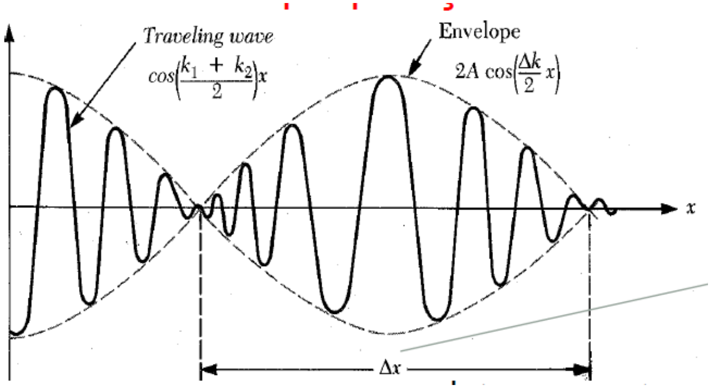
Direção de propagação



O princípio de incerteza de Heisenberg diz que é impossível determinar simultaneamente a posição e momento de uma partícula.

Devemos lembrar que a partícula subatômica tem um comportamento ondulatório dado pelo comprimento de onda de de Broglie.

Portanto a partícula é localizada dentro de uma região Δx



$$E = hf = \frac{h}{2\pi}2\pi f = \hbar\omega$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

O princípio de incerteza
Posição-momento

$$\Delta k \Delta x \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

O princípio de incerteza
Tempo-energia

$$\Delta\omega.\Delta t \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta E.\Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

O princípio de incerteza
Momento angular - angulo

$$\Delta \ell_z \, \Delta\phi \geq \frac{\hbar}{2}$$

Estados estacionários

A função de onda para uma partícula livre é dada por:

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

Podemos separar a dependência temporal e espacial:

$$E = \hbar\omega \rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar}$$

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

dependência espacial

dependência temporal

A função de onda $\psi(x)$ é portanto independente do tempo e tem uma energia bem definida dada por:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Podemos construir uma função de onda localizada fazendo uma superposição de várias ondas, cada uma independente do tempo e correspondendo a um estado de energia específico:

Um estado de energia definida normalmente é chamado de estado estacionário

Estados estacionários

A equação de Schrödinger, fica um pouco mais simples para os estados estacionários

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2[\psi(x)\,e^{-iEt/\hbar}]}{\partial x^2} + U(x)\,\psi(x)\,e^{-iEt/\hbar} = i\hbar\frac{\partial[\psi(x)\,e^{-iEt/\hbar}]}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\cancel{e^{-iEt/\hbar}} + U(x)\,\psi(x)\,\cancel{e^{-iEt/\hbar}} = i\hbar\left(\frac{-iE}{\hbar}\right)[\psi(x)\,\cancel{e^{-iEt/\hbar}}] = E\psi(x)\,\cancel{e^{-iEt/\hbar}}$$

Obtemos a equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo.

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)}$$

Coordenadas cartesianas

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\,\psi(x, y, z)$$

Equação de Schrodinger

Para mecânica quântica não relativística precisamos resolver a eq. de Schrodinger

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)}$$

Em geral a solução só é possível para alguns valores de energia. (quantização da energia) e para tanto temos que considerar as condições de contorno.

A solução geral deve incluir a dependência temporal, $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-i\omega t}$

A condição de contorno é que tanto a função de onda quanto sua derivada deve ser contínua em qualquer meio.

$$\lim_{\varepsilon \to 0} [\psi(a+\varepsilon) - \psi(a-\varepsilon)] = 0$$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left[\left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a-\varepsilon} \right] = 0$$

A função de onda deve ser linear e pode ser dada por uma combinação de função de ondas

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

$\psi(x)$ deve ser finita (1)
$\psi(x)$ deve ser unívoca (2)
$\psi(x)$ deve ser contínua (3)

$d\psi(x)/dx$ deve ser finita (4)
$d\psi(x)/dx$ deve ser unívoca (5)
$d\psi(x)/dx$ deve ser contínua (6)

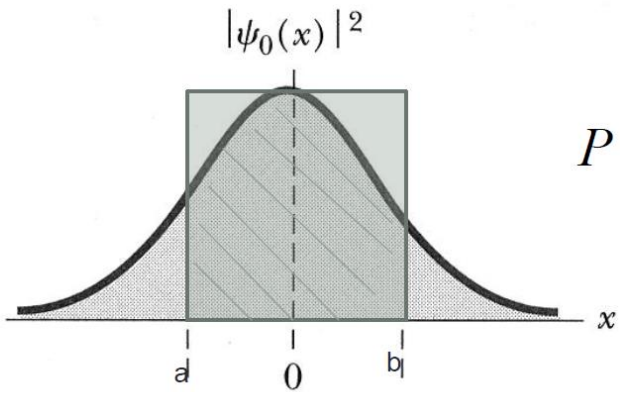
A função de onda serve para calcular a probabilidade de encontrar uma partícula entre x e dx

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

Probabilidade de encontrar uma partícula entre x1 e x2.

$$P = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^* \Psi \, dx$$

Probabilidade deve ser normalizada. Devemos encontrar a partícula em algum lugar entre –infinito e +infinito.



$$P = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi \, dx = 1$$

Podemos determinar o valor médio de funções.

Valor médio ou valor esperado

$$\langle f \rangle = \int \Psi^* f \, \Psi \, dx$$

Os valores médios (esperados) são obtidos com operadores como por exemplo operador momento na direção x.

$$p_x = -i\hbar \partial / \partial x \quad \Rightarrow \quad \langle p_x \rangle = \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \, dx = -i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

Operador para obter valor esperado da energia:

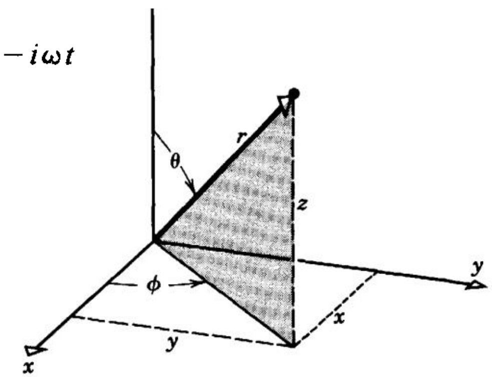
$$E = i\hbar \partial / \partial t \qquad \overline{E} = \langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x,t) dx$$

Devemos lembrar que em geral devemos considerar o problema espacial em 3 dimensões.

Coordenadas cartesianas

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

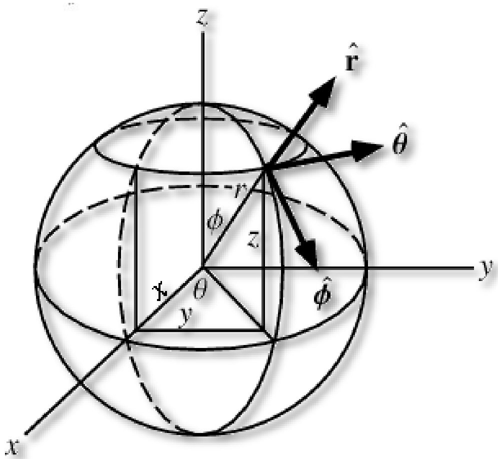
Com a solução em 3 dimensões $\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)\,e^{-i\omega t}$



Densidade de probabilidade

$$P\,dv=\Psi^*\Psi\,dv \qquad dv=dx\,dy\,dz$$

Coordenadas esféricas



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right]$$
$$+V(r,\theta,\phi)\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi)$$

$$dv=r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$$

Partícula livre

Partícula livre: $U(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \cancel{\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}}\right) + \cancel{V(x, y, z)}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

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

Eq. Diferencial oscilador harmônico

Solução: $\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$ **ou** $\Psi(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}$

Superposição de duas funções de onda

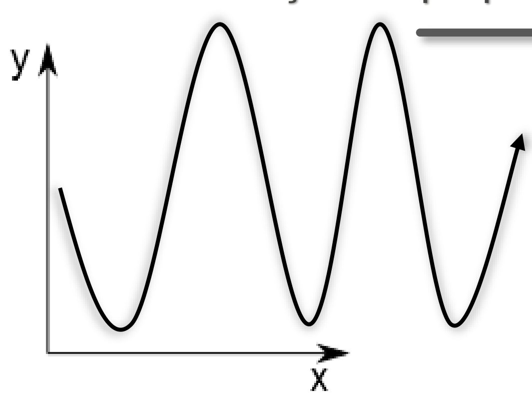
Partículas viajando apenas numa direção de x positivo: B=0

$$\boxed{\Psi(x) = Ae^{+ikx}}$$

com:

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

Direção de propagação

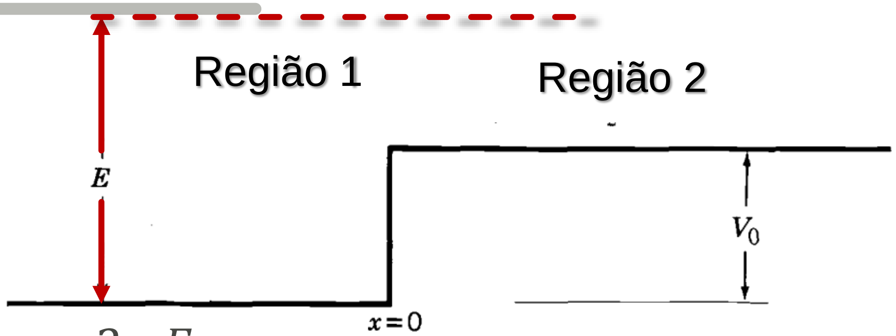


Potencial degrau

Potencial degrau com E>V_0

$$V(x) = 0 \qquad x < 0$$

$$V(x) = V_0 \quad x > 0$$



Região 1 V(x) = 0 $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_1(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1(x)$$ Equação oscilador harmônico

Solução
Partícula livre $$\Psi_1(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$ *com:* $$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2 V(x) = V_0 $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_2(x) = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\Psi_2(x)$$

Solução $$\Psi_2(x) = Ce^{+ik_2x} + De^{-ik_2x}$$ *com:* $$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

A representa a onda incidente se propagando na direção positiva de x

B representa a onda refletida no degrau voltando na direção negativa de x

C representa a onda transmitida que vai para o infinito

D deve ser zero (pois não temos onda voltando do infinito)

Para que haja continuidade no ponto x=0 devemos aplicar o que chamamos de condições de contorno:

A condição de contorno é que tanto a função de onda quanto sua derivada deve ser contínua em qualquer meio.

$$\lim_{\varepsilon \to 0} [\psi(a+\varepsilon) - \psi(a-\varepsilon)] = 0$$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left[\left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a-\varepsilon} \right] = 0$$

$$\Psi_1(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\Psi_2(x) = Ce^{+ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

Para x=0

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ k_1(A - B) = k_2(C - D) \end{cases}$$

Aplicando as condições de contorno em x=0

A representa a onda incidente
B representa a onda refletida
C representa a onda que vai para o infinito
D deve ser zero (não temos onda voltando do infinito)

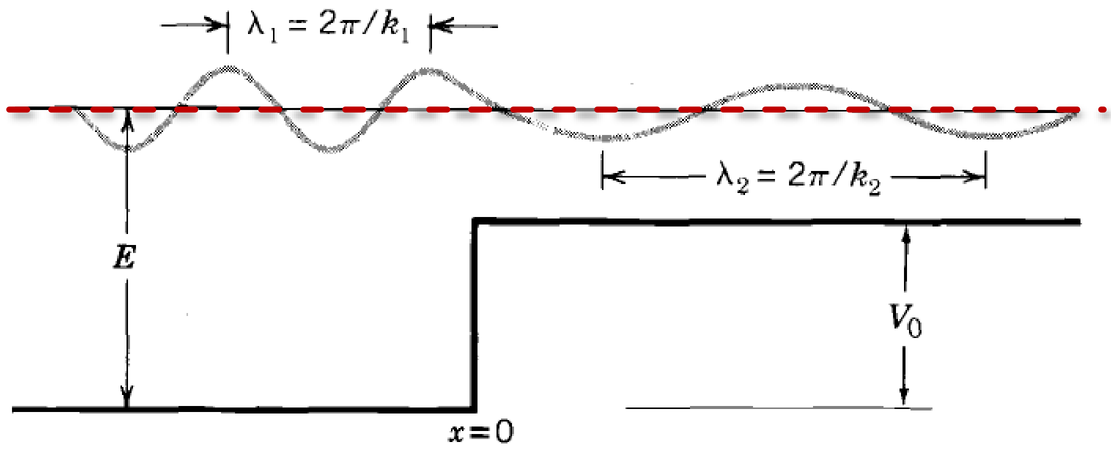
$$B = A\frac{(1-\frac{k_2}{k_1})}{(1+\frac{k_2}{k_1})}$$

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

$$D = 0$$

Teremos portanto uma parte da função de onda transmitida e uma parte refletida

Teremos portanto uma parte da função de onda transmitida e uma parte refletida



Coeficiente de reflexão

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{1 - k_2/k_1}{1 + k_2/k_1}\right)^2$$

Coeficiente de transmissão

$$T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_2/k_1}{(1 + k_2/k_1)^2}$$

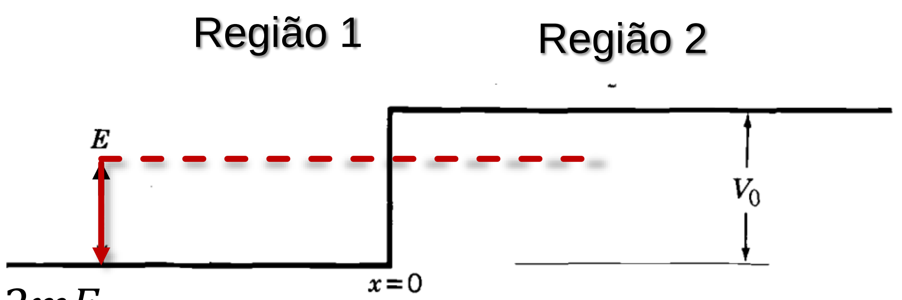
A soma dos coeficientes de transmissão e reflexão deve ser 1 ⇒ R+T=1

Potencial degrau

Potencial degrau com E<V_0

$$V(x) = 0 \qquad x < 0$$

$$V(x) = V_0 \quad x > 0$$



Região 1 *V(x) = 0* $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_1(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1(x)$$

Solução $$\Psi_1(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$ *com:* $$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2 *V(x) = V_0* $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_2(x) = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\Psi_2(x) = +\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\Psi_2(x)$$

Essa não é uma equação diferencial para o oscilador harmônico e portanto a solução não deve ser uma função periódica.

Solução $$\Psi_2(x) = Ce^{+k_2x} + De^{-k_2x}$$

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

A representa a onda incidente se propagando na direção positiva de x

B representa a onda refletida voltando na direção negativa de x

C deve ser zero para x>0 para que ela não seja infinita.

D representa uma onda transmitida na barreira.

Aplicando as condições de contorno (continuidade) em x=0

$$\lim_{\varepsilon \to 0} [\psi(a+\varepsilon) - \psi(a-\varepsilon)] = 0$$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left[\left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a+\varepsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx} \right)_{x=a-\varepsilon} \right] = 0$$

$$\Psi_1(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\Psi_2(x) = De^{-k_2x}$$

Para x=0

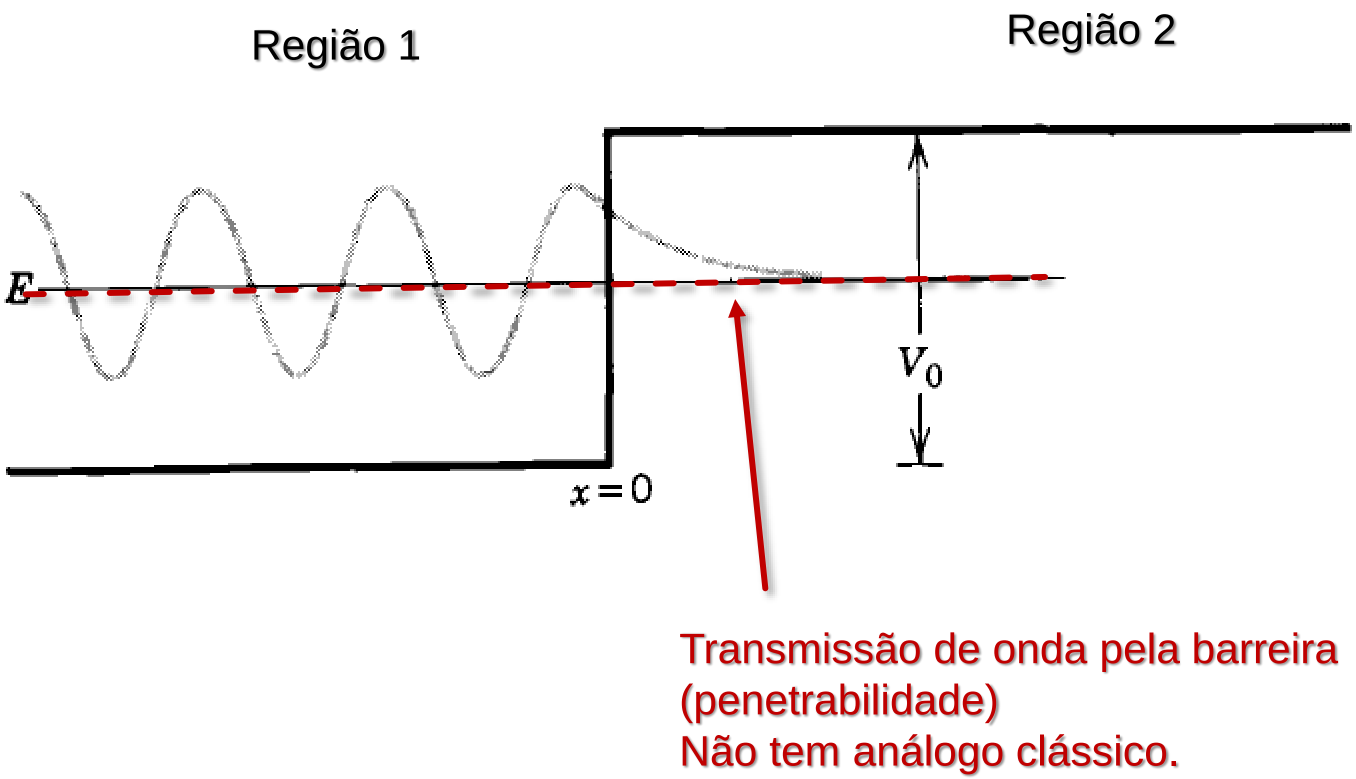
$$\begin{cases} (A+B) = D \\ ik_1(A-B) = k_2D \end{cases} \Rightarrow$$

$$B = A\frac{(1-\frac{k_2}{ik_1})}{(1+\frac{k_2}{ik_1})}$$

$$D = A\frac{2}{(1+\frac{k_2}{ik_1})}$$

$$C = 0$$

Teremos portanto uma parte da função de onda transmitida dentro da barreira e uma parte refletida

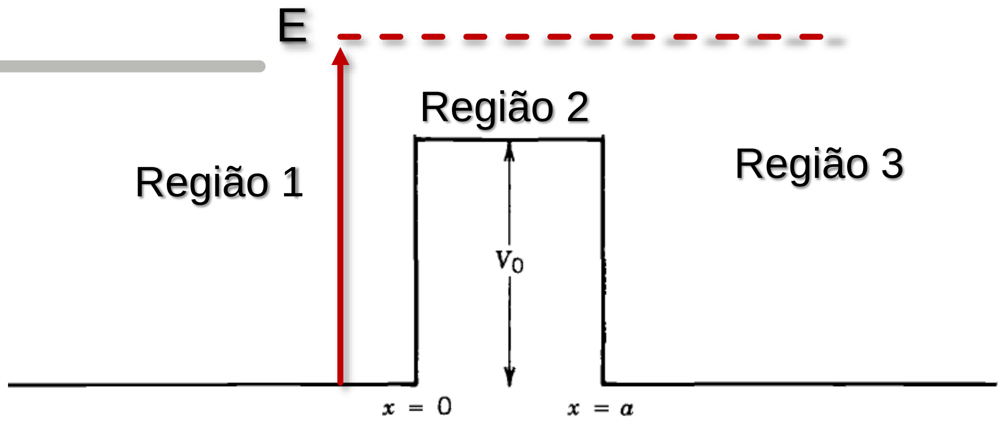


Determinar qual o alcance da penetrabilidade em função de V_0.

Potencial Barreira

Potencial Barreira E>V_0

$$V(x) = 0 \quad x < 0$$
$$V(x) = V_0 \quad 0 < x < a$$
$$V(x) = 0 \quad x > a$$



Região 1 V(x) = 0 $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_1(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_1(x)$$ Equação oscilador harmônico

Solução $$\Psi_1(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$ *com:* $$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2 V(x) = V_0 $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_2(x) = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\Psi_2(x)$$

Solução $$\Psi_2(x) = Ce^{+ik_2x} + De^{-ik_2x}$$ *com:* $$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Região 3 V(x) = 0 $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_3(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_3(x)$$ Equação oscilador harmônico

com: $$k_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Solução $$\Psi_3(x) = Fe^{+ik_3x} + Ge^{-ik_3x}$$

A representa a onda incidente se propagando na direção positiva de x

B representa a onda refletida na barreira voltando na direção negativa de x
C onda transmitida dentro da barreira
D onda refletida dentro da barreira
F onda transmitida depois da barreira
G deve ser zero pois não temos onda vindo de x=+∞

$$\Psi_1(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\Psi_2(x) = Ce^{+ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

$$\Psi_3(x) = Fe^{+ik_3x}$$

Aplicando as condições de contorno em x=0 e x=a

$$(A + B) = (C + D)$$

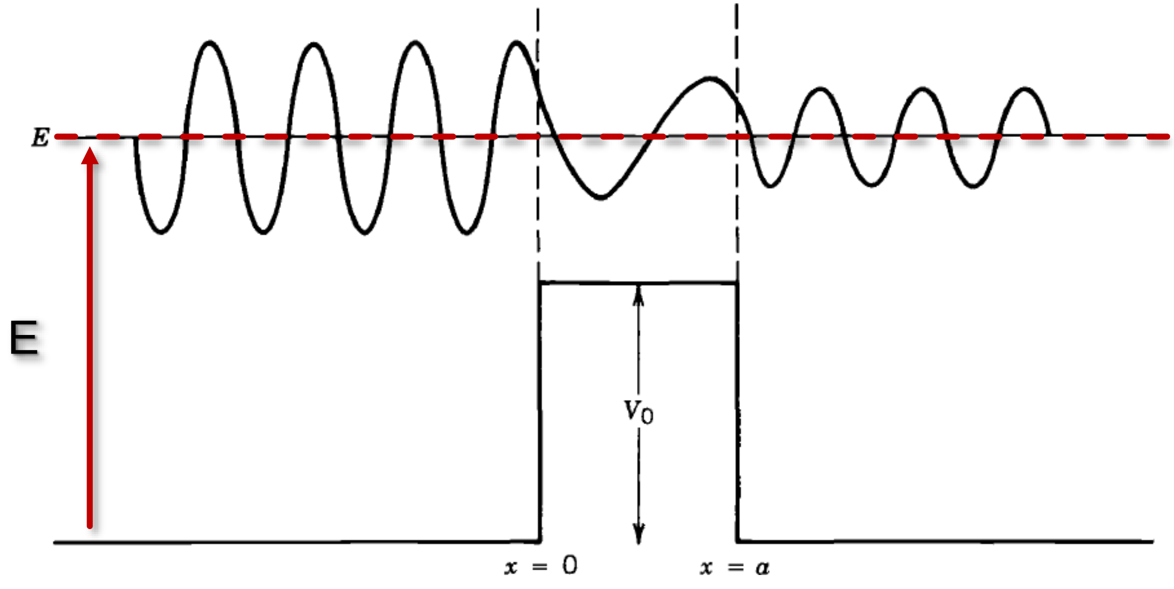
$$k_1(A - B) = k_2(C - D)$$

$$Ce^{+ik_2a} + De^{-ik_2a} = Fe^{+ik_3a}$$

$$k_1\left(Ce^{+ik_2a} + De^{-ik_2a}\right) = k_2(Fe^{+ik_3a})$$

Fazendo as álgebras com as condições de contorno em x=0 e x=a podemos obter B, C, D, E e F em função de A e o coeficiente de transmissão :

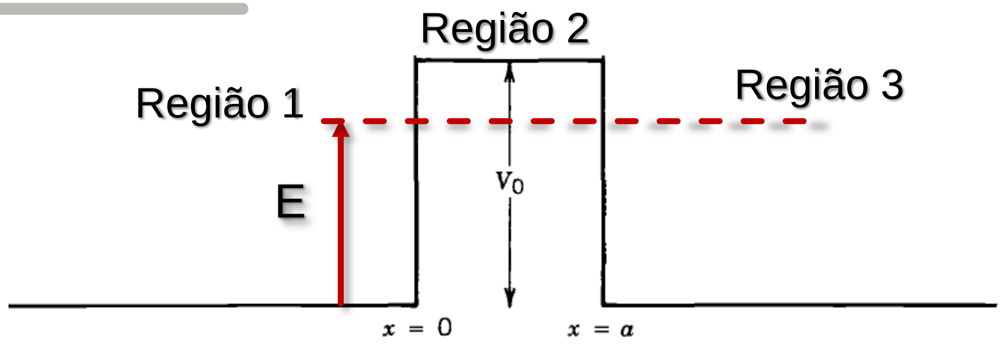
$$T = |F|^2/|A|^2 \quad \Rightarrow \quad T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\frac{V_0^2}{E(E-V_0)}\sin^2 k_2 a}$$



Potencial Barreira

Potencial Barreira E<V$_0$

$$V(x) = 0 \quad x < 0$$
$$V(x) = V_0 \quad 0 < x < a$$
$$V(x) = 0 \quad x > a$$



Para energia menor que a barreira a solução da região 2 é alterada

Região 2 V(x) = V$_0$ $$\frac{d^2}{dx^2}\Psi_2(x) = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\Psi_2(x) = +\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\Psi_2(x)$$

Não é uma equação oscilador harmônico

Solução são exponenciais que não oscilam

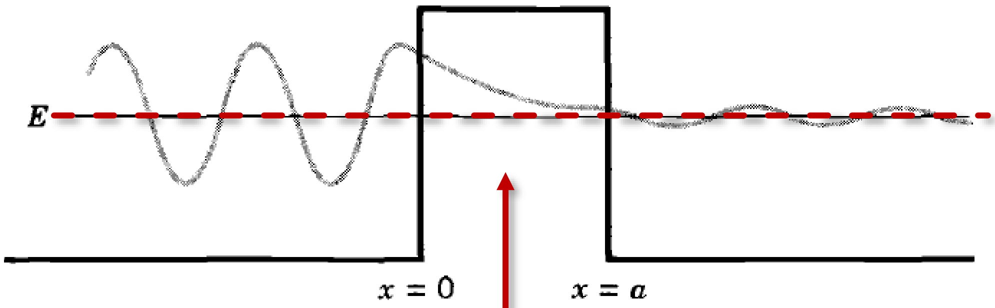
$$\Psi_2(x) = Ce^{+k_2 x} + De^{-k_2 x} \qquad \textit{com:} \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Temos que aplicar as condições de contorno e x=0 e x=a

As soluções para as constantes B, C, D, E, F serão um pouco diferentes

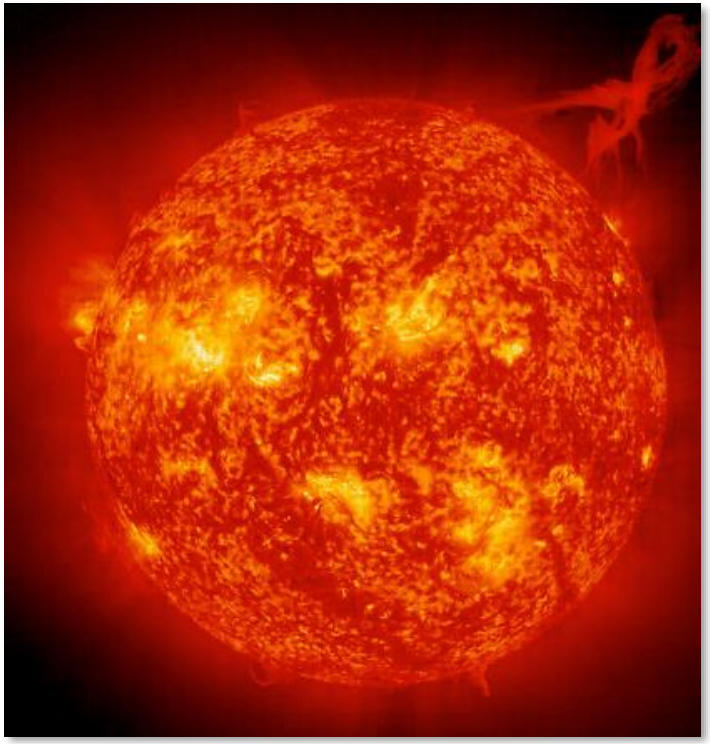
Coeficiente de transmissão

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}\sinh^2 k_2 a}$$



- Onda senoidal fora da barreira
- Onda exponencial dentro da barreira
- A transmissão pela barreira não tem análogo clássico.
- Essa transmissão (penetrabilidade) é importante para a física nuclear.

Mecânica quântica e o brilho do Sol



- O principal processo de fusão nuclear que acontece no interior do Sol, é a fusão de 4 núcleos de hidrogênio em 1 núcleo de hélio.
- Esse processo gera a energia que faz o Sol irradiar.
- A temperatura na superfície do Sol é da ordem de 6.000 K
- A temperatura no interior do Sol 1,5 x 10^7 K

Ciclo pp

Principal processo é transformar 4 prótons em Hélio e gerar energia

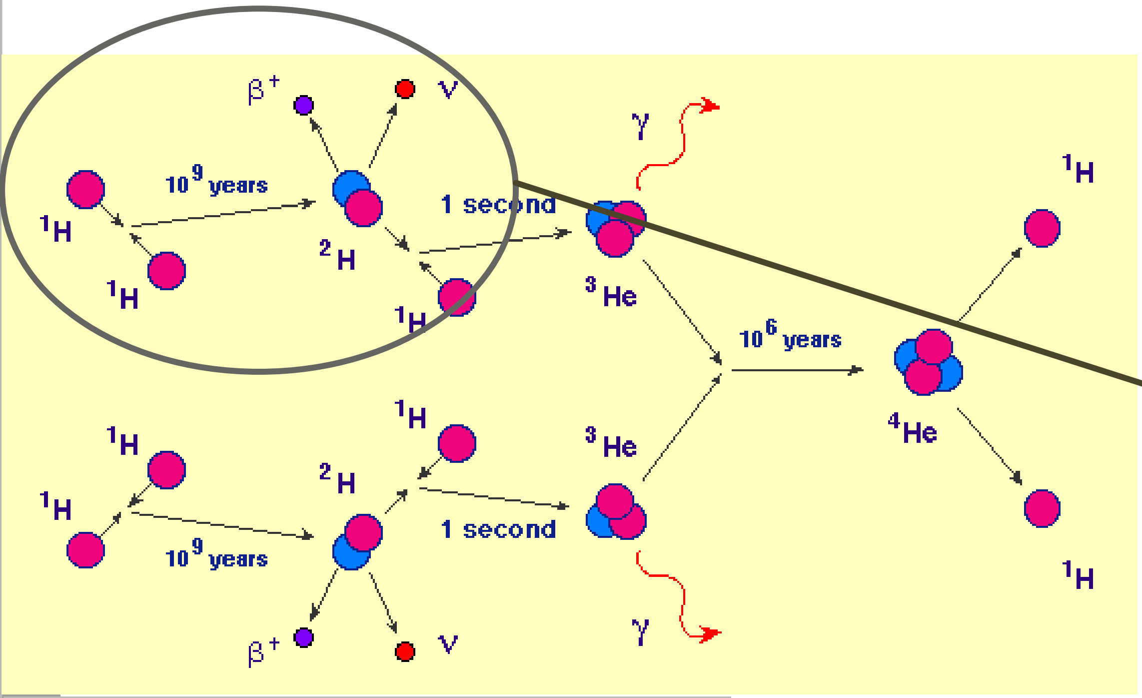
$$4\times H^{1}\rightarrow He^{4}+fotons+neutrinos$$

Massa total de 4 prótons = $4\times 1.0081=4.0324\,u$

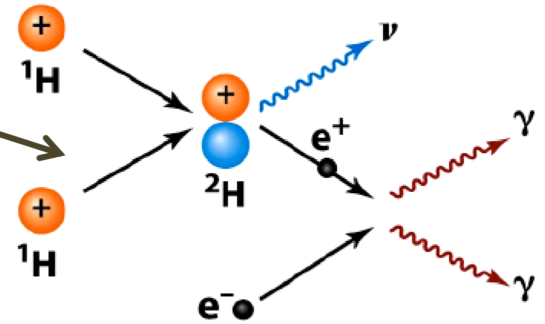
Massa de um Hélio = $4.0039\,u$

Diferença de massa = $\Delta m=4.0324-4.0039=0.0285\,u.m.a$

$$\Delta E=\Delta mc^{2}=0.0285\times 931.5=26.5\,MeV$$



Essa é a energia gerada para cada reação de conversão de 4 prótons em um hélio



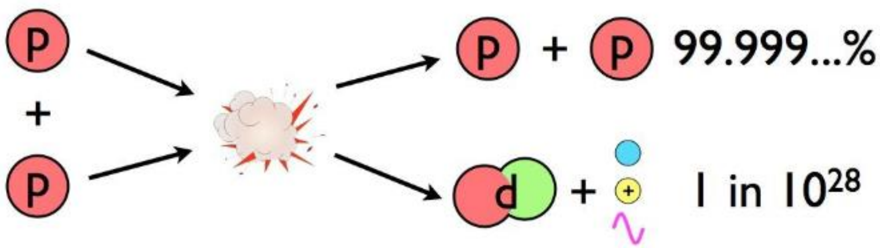
A conversão de prótons em hélio se dá por ciclos (pp-I pp-II pp-III)

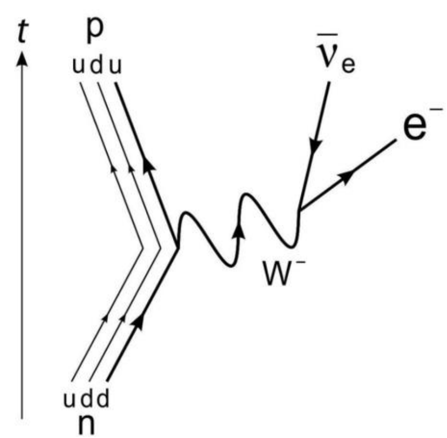
Fusão de p+p e subsequente transformação de um próton em um nêutron.

Energia dos prótons dentro do Sol é

$$E=K_BT = (8,6 \times 10^{-5}\ \mathrm{eV/K}) \times (1,5 \times 10^{7}\ \mathrm{K}) = 0,012\ \mathrm{MeV}$$

Barreira Coulombiana para p+p V_B=0,600 MeV





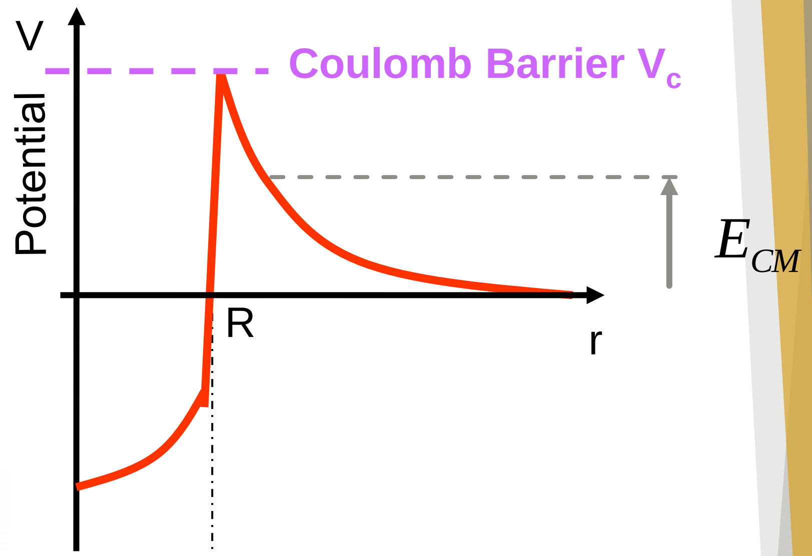
$$\boxed{V_c = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R}}$$

$$V_c\,[\mathrm{MeV}] = 1.44\,\frac{Z_1 Z_2}{R[\mathrm{fm}]}$$

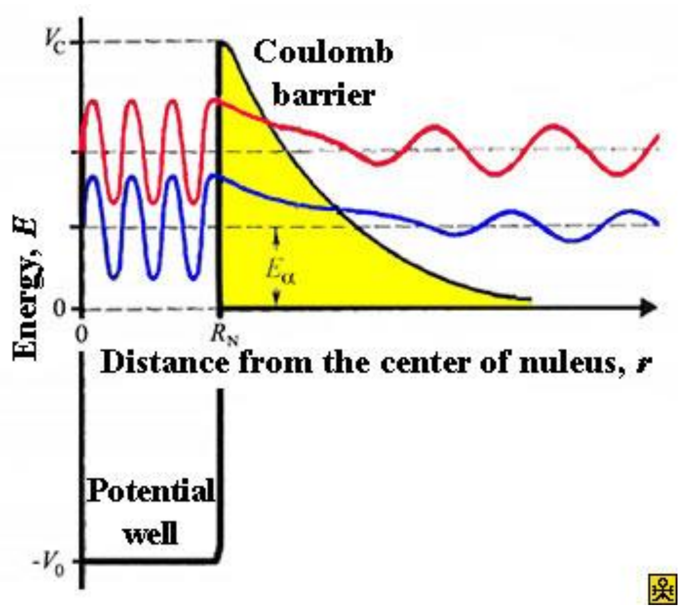
$$V_c\,[\mathrm{MeV}] \approx 1.2\,\frac{Z_1 Z_2}{(A_1^{1/3} + A_2^{1/3})}$$

Penetrabilidade

Probabilidade de penetrar a Barreira coulombiana reduz fortemente a seção de choque

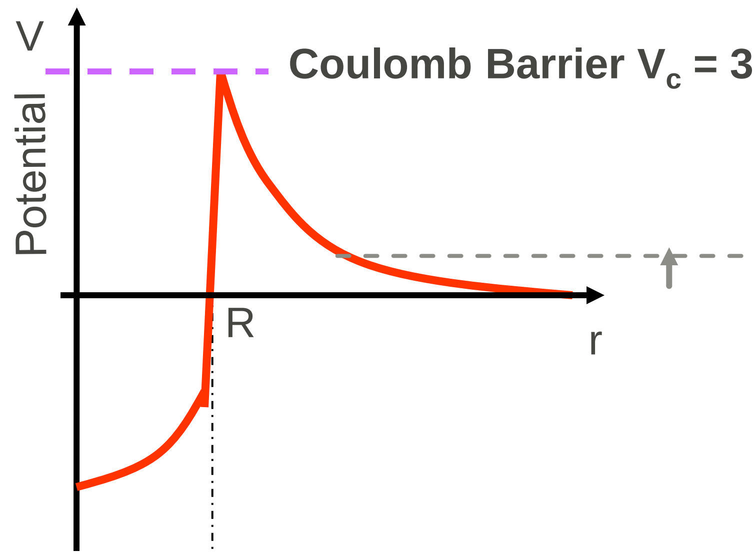


Efeito muito importante para partículas carregada (captura de prótons)



Um exemplo: $^{12}C(p,\gamma)$ Barreira Coulombiana V_B= 3 MeV

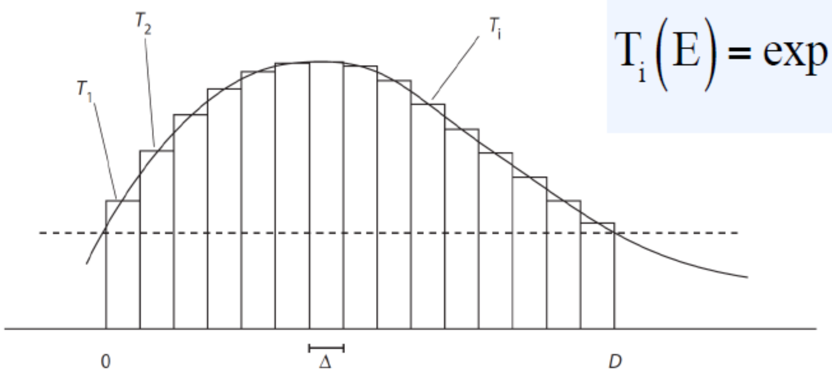
Energia típica das partículas em estrelas kT=1-100 keV !



$$E_{CM} = 0.1 MeV$$

Portanto, todas as taxas de reação na astrofísica envolvendo partículas carregadas ocorrem abaixo da barreira coulombiana. A fusão ou captura só é possível via tunelamento quântico.

Tunneling through a generic barrier



$$\mathrm{T_i(E)} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\Delta\sqrt{2\mu(\mathrm{V}-\mathrm{E})}\right] \tag{9.43}$$

$$T(E) = \prod_i T_i(E) \tag{9.44}$$

Each transmission probability T_i through each barrier can be obtained using Eq. (B.53) of slides on QM. This way of calculating the total transmission probability is called the **WKB approximation**.

$$\boxed{\mathrm{T(E)} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^D \mathrm{dr}\sqrt{2\mu\left[\mathrm{V(r)}-\mathrm{E}\right]}\right]} \tag{9.45}$$

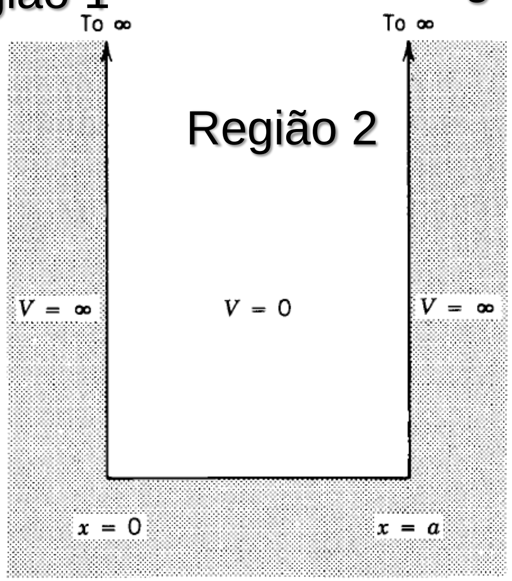
Poço de potencial infinito

Poço de potencial infinito:

$$V(x) = \infty \qquad x < 0, \quad x > a$$
$$= 0 \qquad 0 \le x \le a$$

Região 1

Região 3

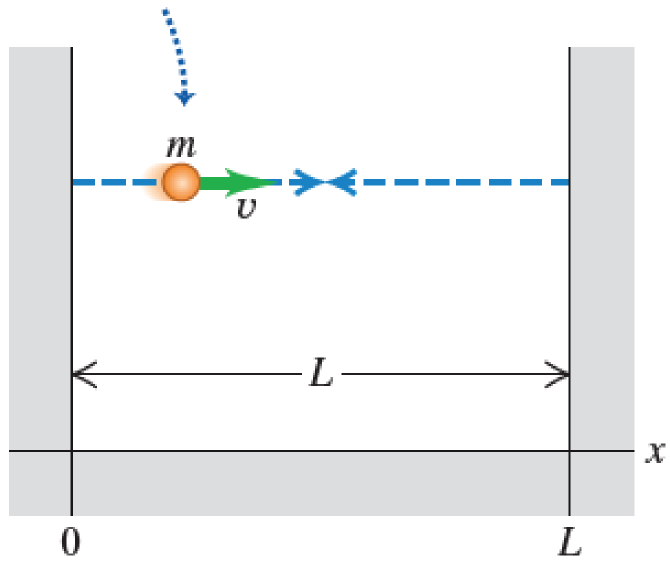


- ❑ Poço infinito significa que a partícula não sai do poço e a solução deve ser função de onda apenas dentro do poço, região 2.
- ❑ Função de onda nas regiões 1 e 3 deve ser nula
- ❑ Note que o poço é infinito (impenetrável) e a função de onda deve ser nula em x=0 e x=a.

- ❑ Essa situação física é muitas vezes chamada de partícula confinada em uma caixa.
- ❑ No entanto, essa caixa deve corresponder a uma partícula presa nas 3 dimensões.
- ❑ Vamos analisar primeiro em uma dimensão:

Figura 40.8 Visão newtoniana de uma partícula em uma caixa.

Uma partícula de massa m se desloca ao longo de uma linha reta com velocidade constante, ricocheteando sucessivamente entre duas paredes separadas por uma distância L.



Equação de Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Solução

- A partícula está confinada entre $0 \le x \le L$
- A probabilidade de encontrar a partícula fora do poço é nula, portanto a função probabilidade $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$ e a função de onda $\psi(x)$ devem ser nulas.
- A função de onda deve ser continua em x=0 e x=a
- Região 1 $\Psi_1(x) = 0$
- Região 3 $\Psi_3(x) = 0$
- Região 2 (dentro da caixa) partícula livre.

Equação oscilador harmônico

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \Rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\Psi_2(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_2(x)$$

Solução $\Psi_2(x) = Ae^{+ik_2x} + Be^{-ik_2x}$ *com:* $k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$\Psi_2(x) = Ae^{+ik_2x} + Be^{-ik_2x}$$

Podemos reescrever como:

$$\Psi_2(x) = A(\cos kx + i\text{sen}\, kx) + B[\cos(-kx) + i\text{sen}(-kx)]$$

$$\Psi_2(x) = A(\cos kx + i\text{sen}\, kx) + B(\cos kx - i\text{sen}\, kx)$$

$$\Psi_2(x) = (A + B)\cos kx + i(A - B)\,\text{sen}\, kx$$

Aplicando as condições de contorno:

Fora do poço função de onda é nula. Então para garantir a continuidade a função de onda deve ser nula em x=0 e em x=a

Em x=0 $\Psi_2(0) = 0$ ⇒ $(A + B) = 0$ ⇒ $A = -B$

$$\Psi_2(x) = 2iB\,\text{sen}\, kx = \text{C}\text{sen}\, kx$$

Em x=a $\Psi_2(a) = 0$ ⇒ $\Psi_2(a) = \text{C}\text{sen}\, ka = 0$ ⇒ $ka = n\pi$

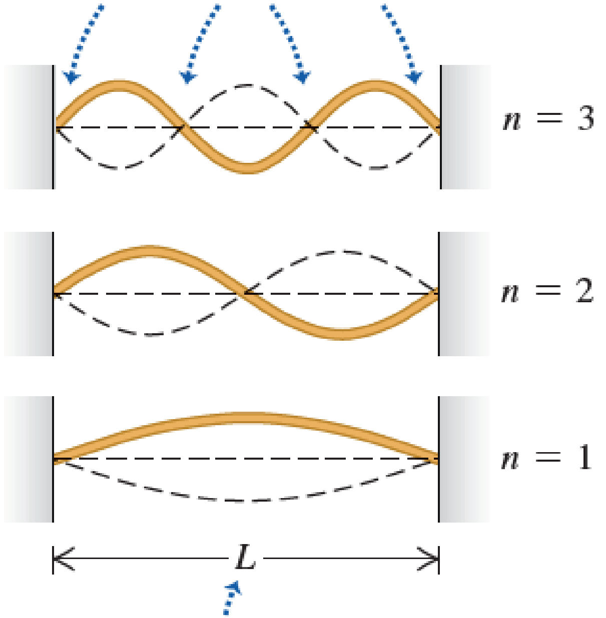
$(n = 1, 2, 3, \ldots)$

Poço de potencial infinito

Isso nos lembra das condições de contorno para cordas vibrantes:

Figura 40.10 Modos normais de vibração em uma corda de comprimento L, com extremidades fixas.

Cada extremidade é sempre um nó, e existem $n - 1$ nós adicionais entre as extremidades.



O comprimento da corda é um número inteiro de metades de comprimentos de onda: $L = n\lambda_n/2$.

Quantização de energia

Aplicando as condições de contorno em x=a

$\sin ka = 0$, or

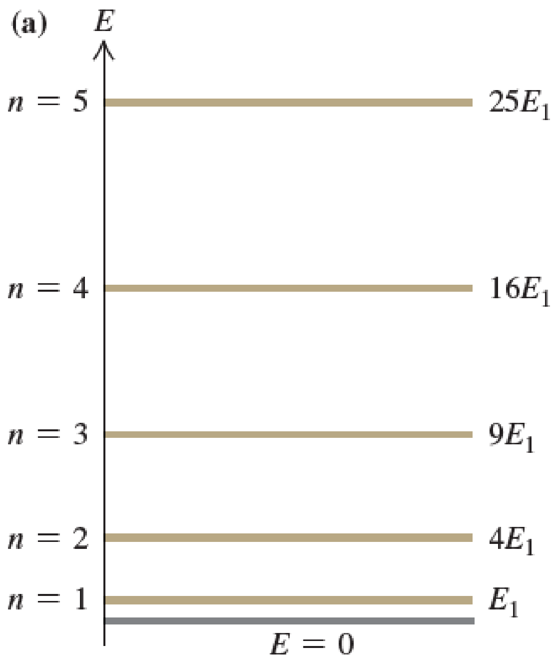
$$ka = n\pi \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

- A energia é quantizada e apenas valores discretos são possíveis para n=1,2,3...
- Esses são chamados de estados ligados.
- Podemos ter infinito estados ligados
- Note que não temos n=0.
- A energia mais baixa, também chamado de estado fundamental, tem energia E_1.

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

- O potencial infinito é uma aproximação ! ! !



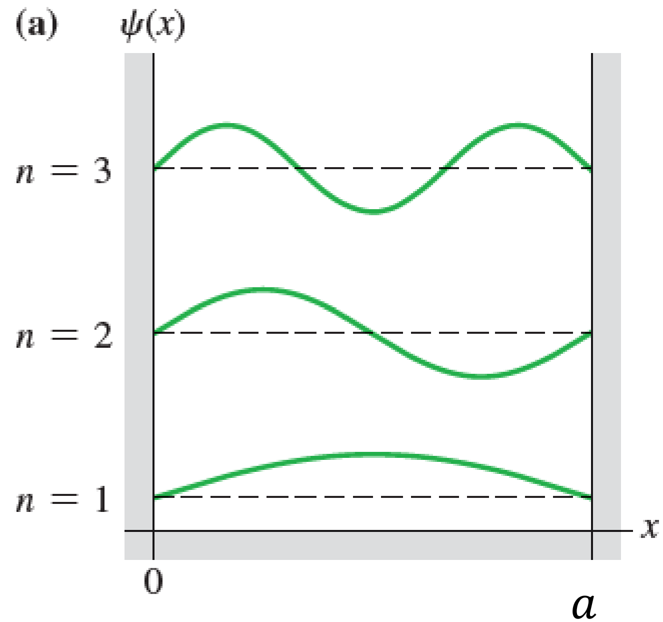
Funções de onda

Função de onda:

$$\Psi_2(x) = C\sin kx$$

$$ka = n\pi$$

$$\Psi_n(x) = C\sin\frac{n\pi x}{a} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$



Fora do poço função de onda é nula. Então para garantir a continuidade a função de onda para cada n deve ser nula também em x=0 e x=a

Devemos normalizar essa função de onda, encontrar o valor da constante C.

A probabilidade de encontrar a partícula em algum lugar é 1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi \, dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^*(x)\,\Psi_n(x)dx = \int_0^a C^2 sin^2(\frac{n\pi x}{a})\, dx = 1$$

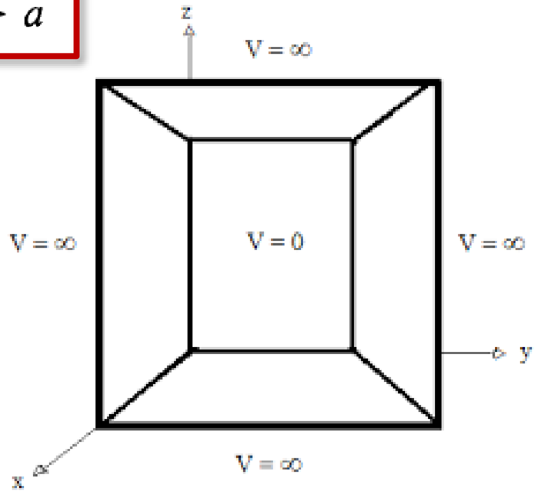
$$C^2\frac{a}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}}$$

Caixa de potencial

Potencial caixa (3 dimensões):

$$V(x, y, z) = 0 \qquad 0 \le x \le a, \quad 0 \le y \le a, \quad 0 \le z \le a$$
$$= \infty \qquad x < 0, \quad x > a, \quad y < 0, \quad y > a, \quad z < 0, \quad z > a$$



A partícula é confinada numa caixa.

A eq. de Schorodinger é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) = E\,\psi(x, y, z)$$

Cuja solução é dada como produto das soluções para cada variável

$$\psi(x, y, z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y(y)}{dy^2} = E_Y Y(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z(z)}{dz^2} = E_Z Z(z)$$

$$E_X + E_Y + E_Z = E$$

Solução para uma dimensão $$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Solução para 3 dimensões (cartesiana)

$$X_{n_X}(x) = C_X \operatorname{sen} \frac{n_X \pi x}{L} \quad (n_X = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$Y_{n_Y}(y) = C_Y \operatorname{sen} \frac{n_Y \pi y}{L} \quad (n_Y = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$Z_{n_Z}(z) = C_Z \operatorname{sen} \frac{n_Z \pi z}{L} \quad (n_Z = 1, 2, 3, \ldots)$$

Quantização da energia:

$$E_X = \frac{{n_X}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (n_X = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$E_Y = \frac{{n_Y}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (n_Y = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$E_Z = \frac{{n_Z}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (n_Z = 1, 2, 3, \ldots)$$

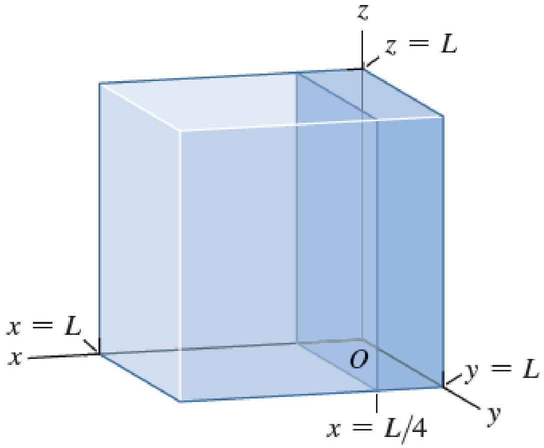
$$\psi_{n_X,n_Y,n_Z}(x,y,z) = C \operatorname{sen}\frac{n_X \pi x}{L} \operatorname{sen}\frac{n_Y \pi y}{L} \operatorname{sen}\frac{n_Z \pi z}{L}$$

$$(n_X = 1, 2, 3, \ldots; n_Y = 1, 2, 3, \ldots; n_Z = 1, 2, 3, \ldots)$$

Devemos determinar as normalizações Cx, Cy, Cz ou a constante C

$$\int |\psi(x,y,z)|^2 \, dV = 1$$

(condição de normalização para um estado estacionário em três dimensões)



$$\int |\psi_{n_X,n_Y,n_Z}(x,y,z)|^2 \, dV$$

$$= |C|^2 \int_{x=0}^{x=L} \int_{y=0}^{y=L} \int_{z=0}^{z=L} \operatorname{sen}^2\frac{n_X \pi x}{L} \operatorname{sen}^2\frac{n_Y \pi y}{L} \operatorname{sen}^2\frac{n_Z \pi z}{L} \, dx\, dy\, dz$$

$$= |C|^2 \left(\int_{x=0}^{x=L} \operatorname{sen}^2\frac{n_X \pi x}{L} dx\right)\left(\int_{y=0}^{y=L} \operatorname{sen}^2\frac{n_Y \pi y}{L} dy\right)$$

$$\times \left(\int_{z=0}^{z=L} \operatorname{sen}^2\frac{n_Z \pi z}{L} dz\right)$$

$$= 1$$

$$C = (2/L)^{3/2}.$$

Degenerescência em energia

$$E_{n_X,n_Y,n_Z} = \left(\frac{n_X^2}{L_X^2} + \frac{n_Y^2}{L_Y^2} + \frac{n_Z^2}{L_Z^2}\right)\frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \qquad \begin{pmatrix} n_X = 1, 2, 3, \ldots ; \\ n_Y = 1, 2, 3, \ldots ; \\ n_Z = 1, 2, 3, \ldots \end{pmatrix}$$

Degenerescência na energia

E (2,1,1) = E(1,2,1) = E(1,1,2)

E (3,2,1) = E(3,1,2) = E(2,1,3) = E (2,3,1) = E(1,2,3) = E(1,3,2)

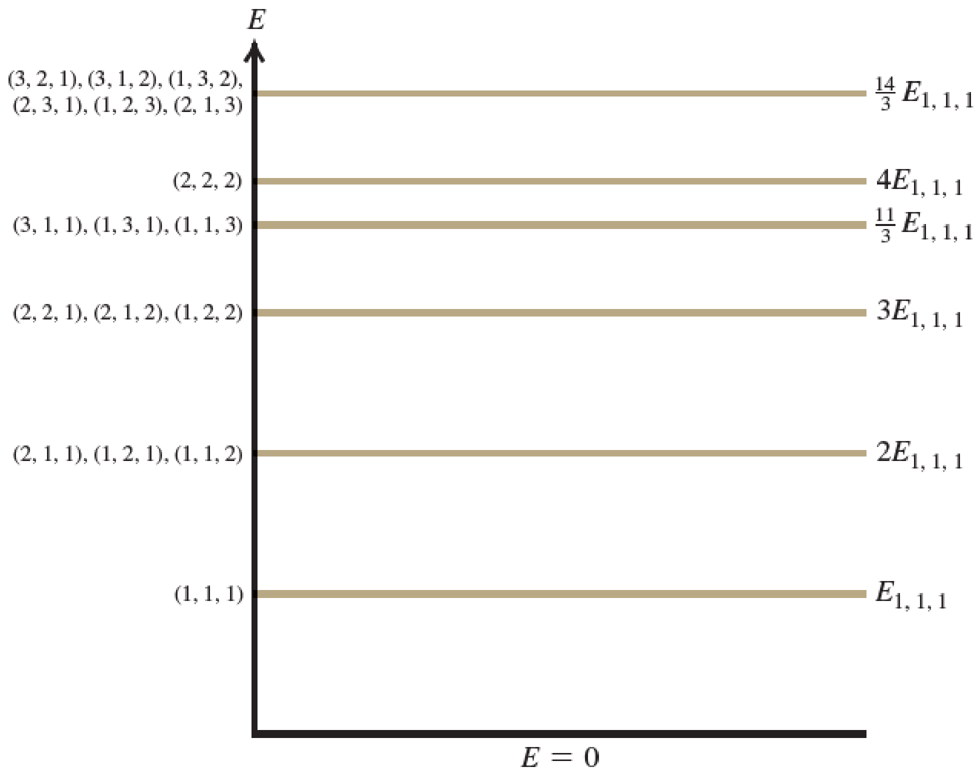
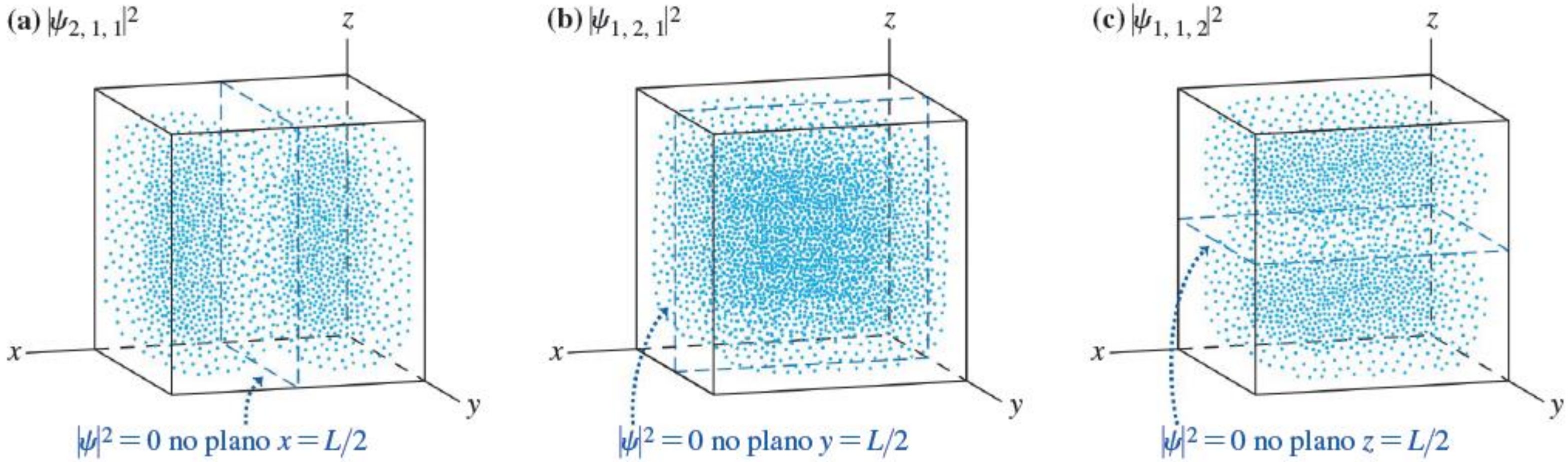


Figura 41.2 Função de distribuição de probabilidade $|\psi_{n_X, n_Y, n_Z}(x, y, z)|^2$ para (n_X, n_Y, n_Z) igual a (a) (2, 1, 1), (b) (1, 2, 1) e (c) (1, 1, 2). O valor de $|\psi|^2$ é proporcional à densidade dos pontos. Como a função de onda é zero nas paredes da caixa e em um plano médio da caixa, então $|\psi|^2 = 0$ nesses locais.

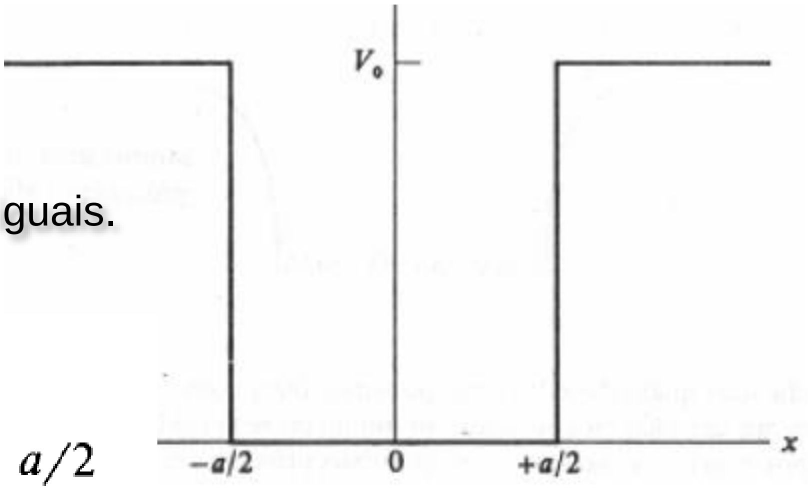


Poço de potencial finito

Poço de potencial finito:

$$V(x) = V_0 \qquad |x| > a/2$$
$$= 0 \qquad |x| < a/2$$

Região 1 Região 2 Região 3



Função de onda nas regiões 1 e 3 devem ser iguais.

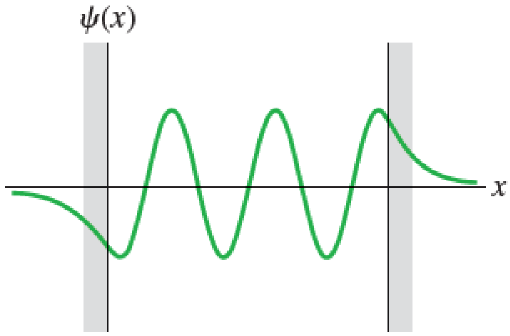
Solução

$$\psi_1 = A\,e^{k_1 x} + B\,e^{-k_1 x} \qquad x < -a/2$$

$$\psi_2 = C\,e^{ik_2 x} + D\,e^{-ik_2 x} \qquad -a/2 \le x \le a/2$$

$$\psi_3 = F\,e^{k_1 x} + G\,e^{-k_1 x} \qquad x > a/2$$

$$k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \text{ and } k_2 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$



Importante: A função de onda não é nula fora do poço e não se anula na fronteira.

Aplicando as condições de contorno em x=-a/2 e x=+a/2

$$k_2 \tan \frac{k_2 a}{2} = k_1$$

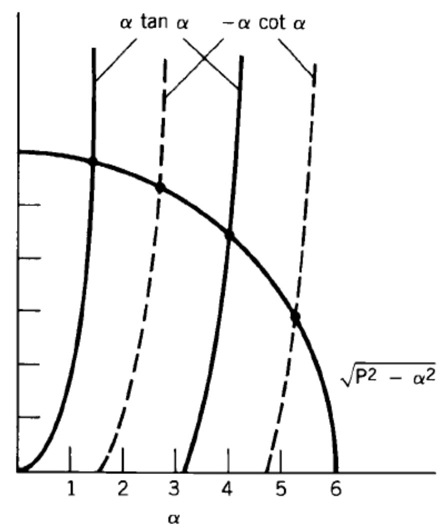
$$-k_2 \cot \frac{k_2 a}{2} = k_1$$

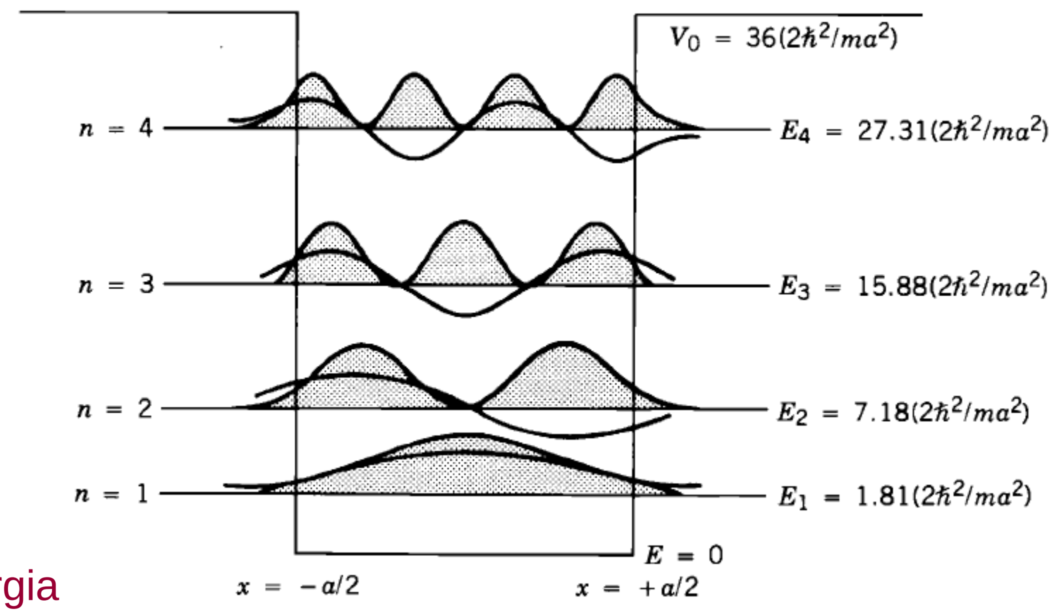
$$\alpha \tan \alpha = (P^2 - \alpha^2)^{1/2}$$

$$-\alpha \cot \alpha = (P^2 - \alpha^2)^{1/2}$$

$$k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \text{ and } k_2 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

Solução analítica muito difícil mas podemos resolver numericamente ou por gráfico





Isso gera a quantização da energia

Diferenças importantes entre potencial finito e infinito:

A solução fora do poço $\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$ com $k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

é uma solução da equação de Schrodinger.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{d^2}{dx^2}(Ce^{\kappa x}) + \frac{d^2}{dx^2}(De^{-\kappa x})$$
$$= C\kappa^2 e^{\kappa x} + D(-\kappa)^2 e^{-\kappa x}$$
$$= \kappa^2(Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}) = \kappa^2\psi(x)$$

Para V_0 indo para o infinito k também vai para o infinito

$\Psi(x) = Ce^{+kx}$ ⇒ $k \to \infty \;\; e \;\; x \to -\infty \quad kx \to -\infty \;\; e \;\; \Psi(x) = Ce^{+kx} \to 0$

$\Psi(x) = De^{-kx}$ ⇒ $k \to \infty \;\; e \;\; x \to +\infty \quad -kx \to -\infty \;\; e \;\; \Psi(x) = De^{-kx} \to 0$

Para V_0 indo para o infinito as funções de onda se tornam nulas fora do poço.

As energias dos estados ligados de um poço infinito é dada por:

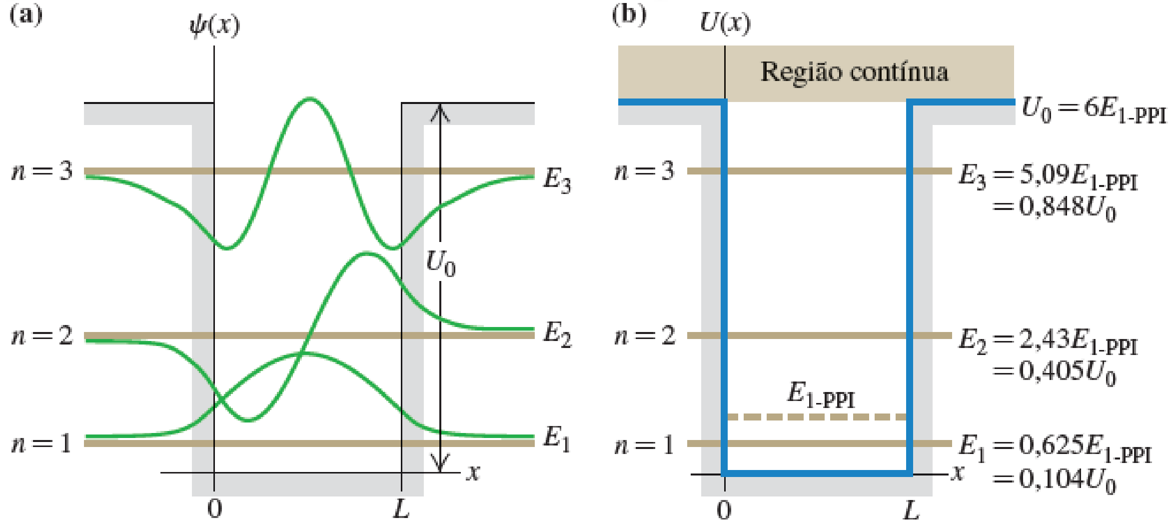
$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

Podemos ter infinitos estados ligados para n=1, 2, 3, ...∞

A energia mais baixa é dada para n=1

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

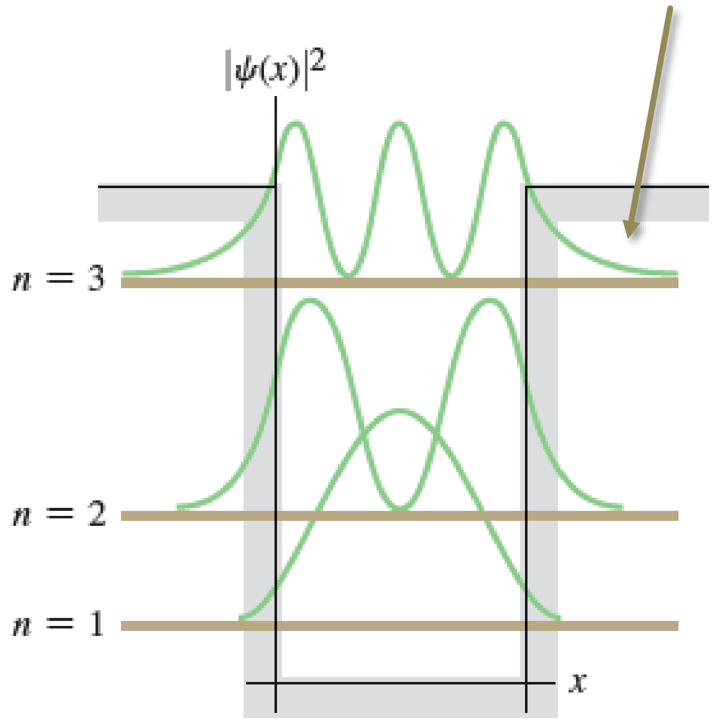
Quando o poço não é muito profundo podemos ter alguns estados ligados e para energia muito grande os estados não são mais ligados.



um poço finito possui um número finito de estados ligados em comparação com o número infinito existente no caso de um poço com profundidade infinita.

Função densidade de probabilidade

Probabilidade não nula de encontrar a partícula

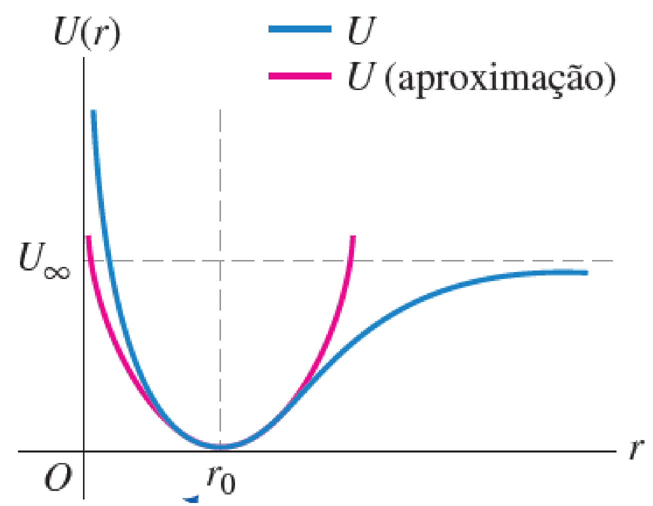


Probabilidade de encontrar a partícula fora do poço aumenta com a proximidade da boca do poço.

Poço Oscilador Harmônico

Poço de potencial oscilador harmônico:

$$V(x) = \tfrac{1}{2}kx^2$$



$$V(x) = V(a) + (x-a)\left(\frac{dV}{dx}\right)_{x=a} + \frac{1}{2}(x-a)^2\left(\frac{d^2V}{dx^2}\right)_{x=a} + \cdots$$

- primeiro termo é constante
- segundo termo nulo em x=a (se for um mínimo)
- terceiro termo quadrático é o importante.
- Esse é o termo de oscilador harmônico

$$\Rightarrow \quad V(x) = \tfrac{1}{2}kx^2$$

Precisamos então resolver a equação de Schrodinger em uma dimensão

$$E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\varphi(x)$$

Sendo que:

$$\lambda = 2E/\hbar\omega$$

$$\omega = \sqrt{k/m}$$

Usando uma nova variável $\xi = \left(\sqrt{m\omega/\hbar}\right)x$ ficamos com:

$$-\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + \xi^2\varphi(\xi) = \lambda\varphi(\xi) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\varphi(\xi) = 0$$

$$\varphi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}h(\xi)$$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (\lambda - 1)h(\xi) = 0$$

Que é parecida com a equação diferencial de Hermite

[2] Uma solução pre-determinada, contendo ainda incognitos a ser determinadas, é as vezes chamada de "Ansatz".

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (\lambda - 1)h(\xi) = 0$$

equação diferencial de Hermite

$$y'' - 2xy' + 2py = 0$$

$$(\lambda - 1) = 2p$$

Com p=inteiro

A quantização vem de: $\lambda = 2p + 1, \quad p = 0, 1, 2, 3...$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad E_n = \hbar w \left(p + \frac{1}{2}\right), p = 0, 1, 2, 3..$$

Os níveis são igualmente espaçados : $E_{p+1} - E_p = \left[(p+1) + \frac{1}{2} - \left(p + \frac{1}{2}\right)\right]\hbar\omega = \hbar\omega$

e o estado fundamental para p=0 tem energia: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

- Na mecânica clássica a menor energia seria a situação de repouso na origem das coordenadas, ou seja, energia igual a zero.

- Na mecânica quântica o princípio de incerteza não permite essa situação pois isso corresponderia a uma posição e momento bem definidos.

Solução polinômios de Hermite

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$n = 0$ we have $H_0(x) = 1$

$n = 1$ we have $H_1(x) = 2x$

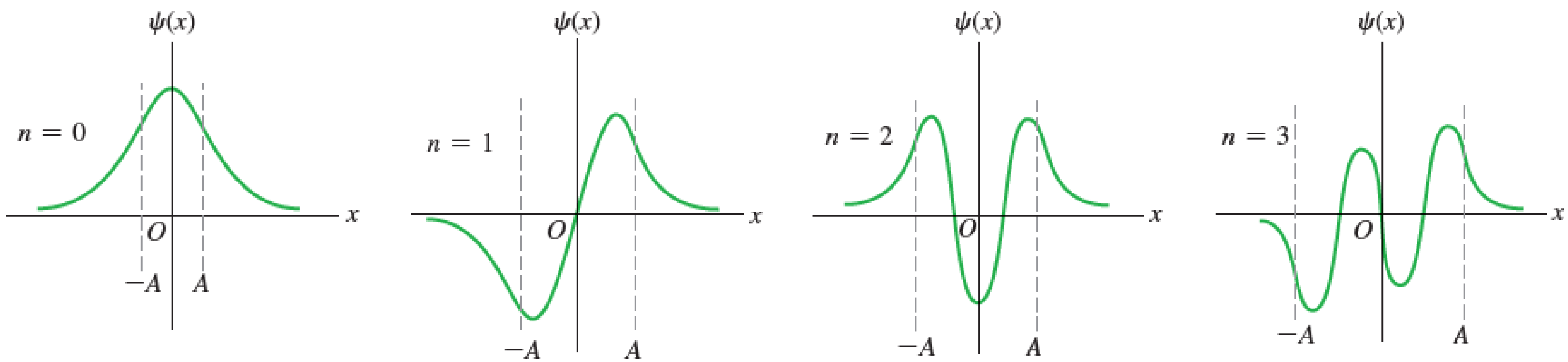
$n = 2$ we have $H_2(x) = 4x^2 - 2.$

Solução para função de onda:

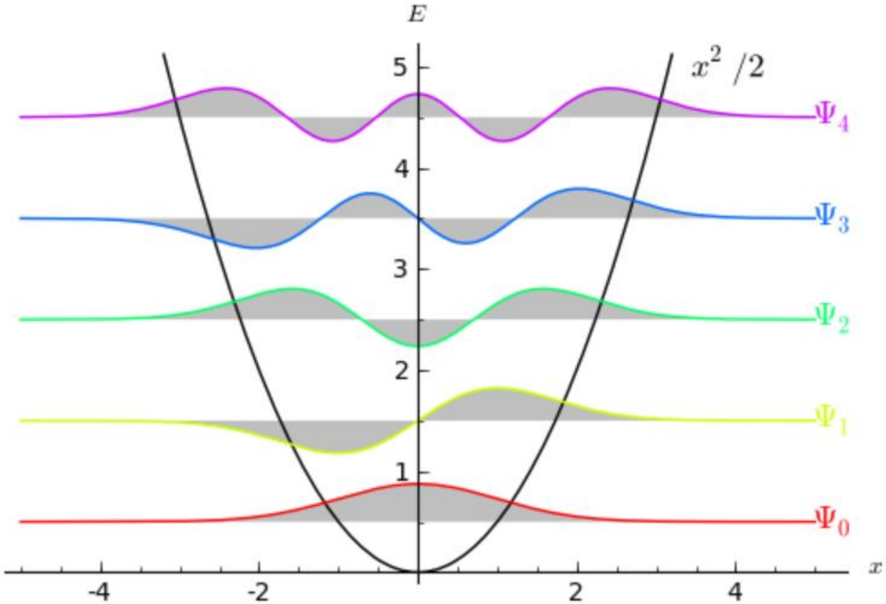
$$E_n = \hbar\omega_0(n + \tfrac{1}{2})$$

$$\psi_n(x) = (2^n n!\sqrt{\pi})^{-1/2} H_n(\alpha x)\, e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

n	E_n	$\psi_n(x)$
0	$\frac{1}{2}\hbar\omega_0$	$\pi^{-1/4}\, e^{-\alpha^2 x^2/2}$
1	$\frac{3}{2}\hbar\omega_0$	$2^{-1/2}\pi^{-1/4}(2\alpha x)\, e^{-\alpha^2 x^2/2}$
2	$\frac{5}{2}\hbar\omega_0$	$2^{-3/2}\pi^{-1/4}(4\alpha^2 x^2 - 2)\, e^{-\alpha^2 x^2/2}$
3	$\frac{7}{2}\hbar\omega_0$	$(1/4\sqrt{3}\,\pi^{1/4})(8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x)\, e^{-\alpha^2 x^2/2}$
4	$\frac{9}{2}\hbar\omega_0$	$(1/8\sqrt{6}\,\pi^{1/4})(16\alpha^4 x^4 - 48\alpha^2 x^2 + 12)\, e^{-\alpha^2 x^2/2}$

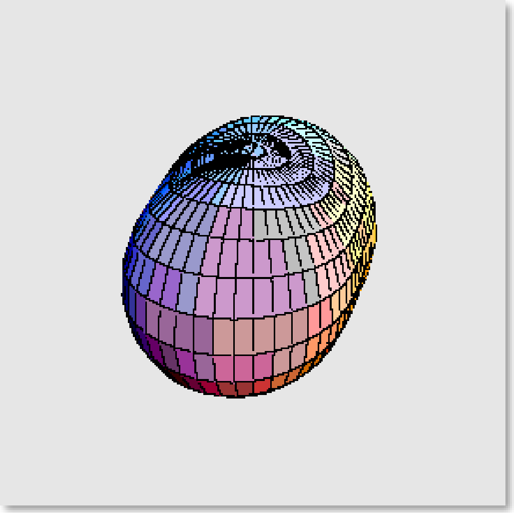


$\psi(x)$
$n = 0$
$n = 1$
$n = 2$
$n = 3$
x
O
$-A$
A



E
5
4
3
2
1
$x^2/2$
Ψ_4
Ψ_3
Ψ_2
Ψ_1
Ψ_0
-4
-2
2
4
x

Núcleo pode girar.



- Spin e momento angular são grandezas relacionadas a rotação.
- Para estudar o efeito da rotação e momento angular devemos então considerar a solução quântica nas três dimensões em coordenadas esféricas.

- Para potenciais centrais do tipo V=V(r) é interessante utilizarmos as coordenadas esféricas.

Potencial partícula livre $V(r) = 0$

Potencial poço esférico:
$$V(r) = 0 \qquad r < a$$
$$= \infty \qquad r > a$$

Potencial oscilador harmônico: $V(r) = \frac{1}{2}kr^2$

Potencial Coulombiano: $V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$

Potencial Woods-Saxon
$$V(r) = -\frac{V_0}{1+\exp(\frac{r-R}{a})}$$