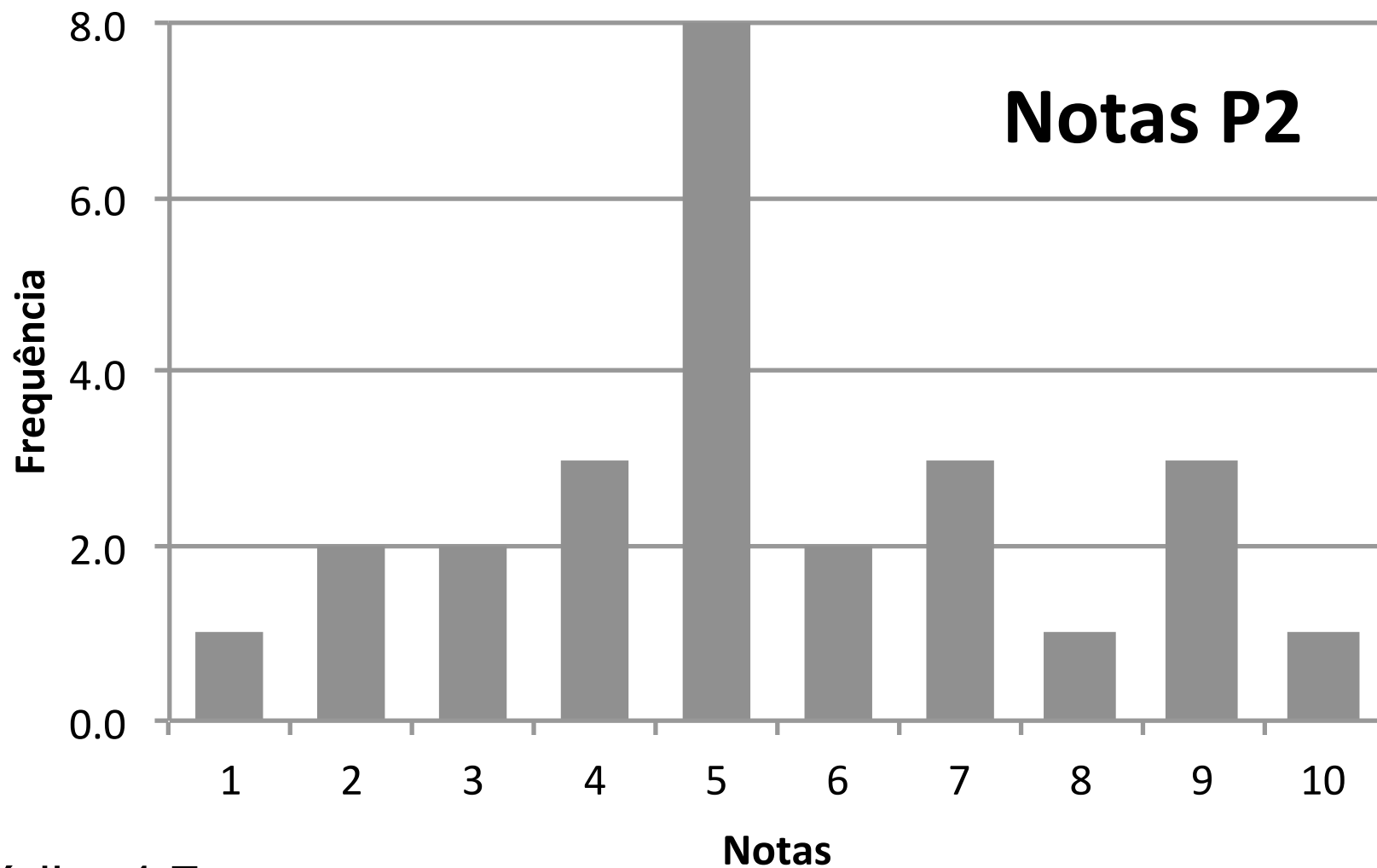




Média: 4,7
Desvio padrão: 2,3
26 provas

A equação de Schrödinger em 3D

Extensão do que fizemos em 1D: $p^2/2m + V(x,y,z) = E$. Com

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} . \text{ Usando: } p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \quad p_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

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

$$\text{Lembrando que } \psi \equiv \psi(x,y,z) \text{ e o Laplaciano: } \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\text{A eq. independente do tempo: } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x,y,z)\psi = E\psi$$

A interpretação probabilística, nesse caso, envolve a integração sobre um elemento de volume: $dV = dxdydz$. A probabilidade de se encontrar a partícula, no instante t em torno do ponto (x,y,z) é

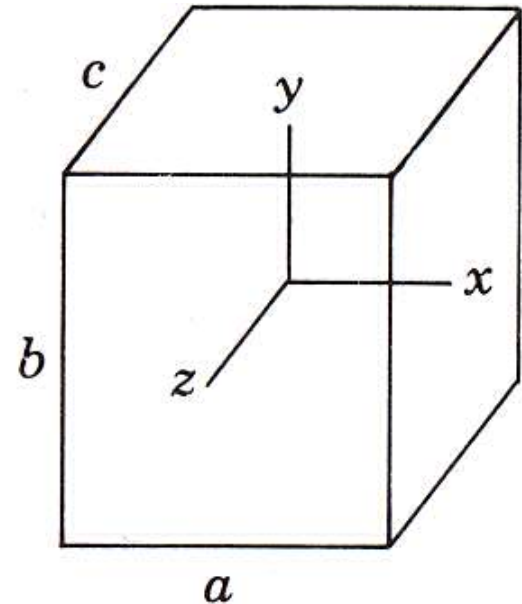
$$\text{dada por: } |\Psi(x,y,z,t)|^2 dxdydz , \text{ com: } -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{r})\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

O poço quadrado em 3D

A eq. de Schrödinger em 3D: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\vec{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$

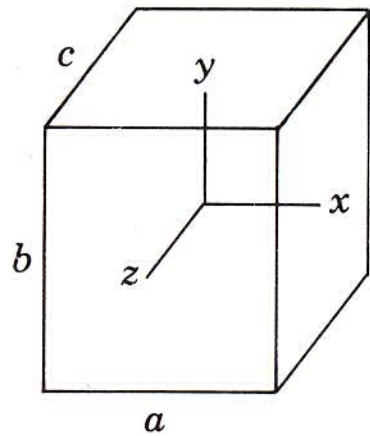
A eq. independente do tempo: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$

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



No caso específico do poço quadrado:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & \text{se: } -a/2 < x < a/2; -b/2 < y < b/2; -c/2 < z < c/2 \\ \infty & \text{no resto do espaço} \end{cases}$$



O poço quadrado em 3D

Nessas condições, a autofunção deve se anular para qualquer ponto fora do poço e deve apresentar nós nas faces. Podemos montar as autofunções a partir daquelas determinadas para o caso 1D (aula 19):

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \psi_{n_1}(x) \psi_{n_2}(y) \psi_{n_3}(z)$$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \begin{Bmatrix} \cos \\ \text{sen} \end{Bmatrix} \left(\frac{n_1 \pi x}{a} \right) \cdot \sqrt{\frac{2}{b}} \begin{Bmatrix} \cos \\ \text{sen} \end{Bmatrix} \left(\frac{n_2 \pi y}{b} \right) \cdot \sqrt{\frac{2}{c}} \begin{Bmatrix} \cos \\ \text{sen} \end{Bmatrix} \left(\frac{n_3 \pi z}{c} \right)$$

As funções entre chaves nos lembram que devemos escolher entre as funções cosseno ou seno, conforme n_i for par ou ímpar, respectivamente.

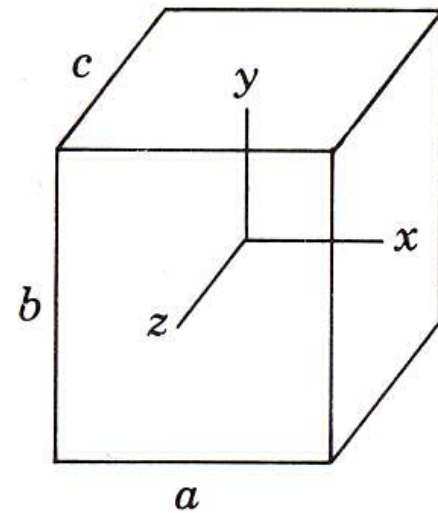
Substituindo essa função na equação de Schrödinger, obtemos:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{n_1 n_2 n_3} = E_{n_1 n_2 n_3} \psi_{n_1 n_2 n_3} = \\
& = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\left(\frac{n_1 \pi}{a} \right)^2 \psi_{n_1 n_2 n_3} - \left(\frac{n_2 \pi}{b} \right)^2 \psi_{n_1 n_2 n_3} - \left(\frac{n_3 \pi}{c} \right)^2 \psi_{n_1 n_2 n_3} \right] = \\
& = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\left(\frac{n_1}{a} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{b} \right)^2 + \left(\frac{n_3}{c} \right)^2 \right] \psi_{n_1 n_2 n_3}
\end{aligned}$$

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

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z, t) = \psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) e^{\frac{-iE_{n_1 n_2 n_3} t}{\hbar}}$$

Situações novas e importantes surgem quando a caixa apresenta 2 ou mais lados de mesmo tamanho: suponhamos inicialmente $b \rightarrow a$:



———— 222

———— 212

———— 122

———— 221

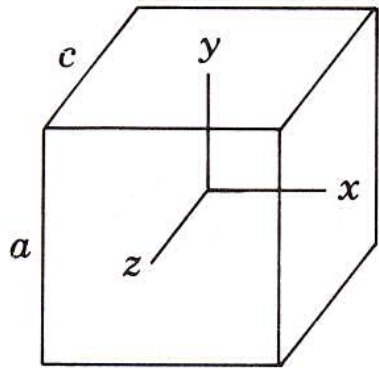
———— 112

———— 211

———— 121

———— 111

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



_____ 222

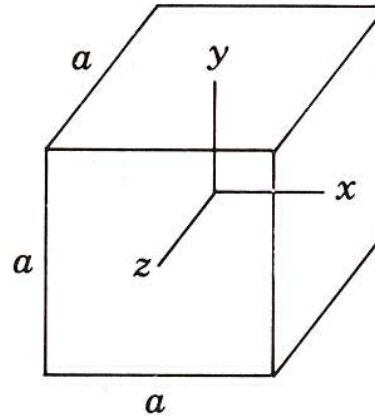
_____ 212, 122
 _____ 221

_____ 112
 _____ 211, 121

_____ 111

No caso em que todas as arestas são iguais:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$



_____ 222

_____ 221, 212, 122

_____ 211, 121, 112

_____ 111

Vamos verificar um caso específico, no qual $b = 10a/9$ e $c = 10a/11$. As energias ficam:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(n_1^2 + \frac{81}{100} n_2^2 + \frac{121}{100} n_3^2 \right) = E_1 \frac{100n_1^2 + 81n_2^2 + 121n_3^2}{100}$$

$$\text{Se } b \rightarrow a \Rightarrow E_{n_1 n_2 n_3} = E_1 \frac{100n_1^2 + 100n_2^2 + 121n_3^2}{100}$$

$$\text{Se } c \rightarrow a \Rightarrow E_{n_1 n_2 n_3} = E_1 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

Degenerescência: diferentes estados apresentam a mesma energia

$n_1 \quad n_2 \quad n_3$

$$\frac{100}{E_1} E_{n_1 n_2 n_3}$$

$$\sqrt{\frac{a^3}{8}} \psi_{n_1 n_2 n_3}$$

1 1 1

302 → 321 → 300

$$\cos \frac{\pi x}{a} \cos \frac{\pi y}{a} \cos \frac{\pi z}{a}$$

1 1 2

665 684 600

$$\cos \frac{\pi x}{a} \cos \frac{\pi y}{a} \sin \frac{2\pi z}{a}$$

1 2 1

545 → { 621 → 600

$$\cos \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a} \cos \frac{\pi z}{a}$$

2 1 1

602 { 621 600

$$\sin \frac{2\pi x}{a} \cos \frac{\pi y}{a} \cos \frac{\pi z}{a}$$

1 2 2

908 984 900

$$\cos \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a} \sin \frac{2\pi z}{a}$$

2 1 2

965 → 984 → 900

$$\sin \frac{2\pi x}{a} \cos \frac{\pi y}{a} \sin \frac{2\pi z}{a}$$

2 2 1

845 921 900

$$\sin \frac{2\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a} \cos \frac{\pi z}{a}$$

2 2 2

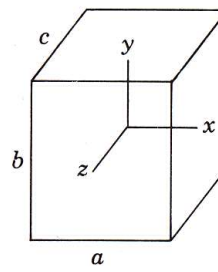
1208 → 1284 → 1200

$$\sin \frac{2\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a} \sin \frac{2\pi z}{a}$$

...

$a = b \Rightarrow$
degenerescência dupla

$a = b = c \Rightarrow$
degenerescência tripla

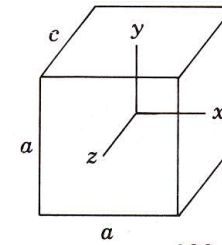


— 222

— 212
— 122
— 221

— 112
— 211
— 121

— 111

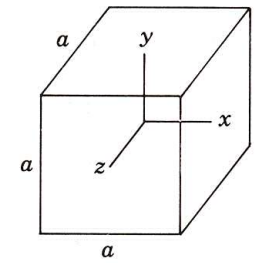


— 222

— 212, 122
— 221

— 112
— 211, 121

— 111

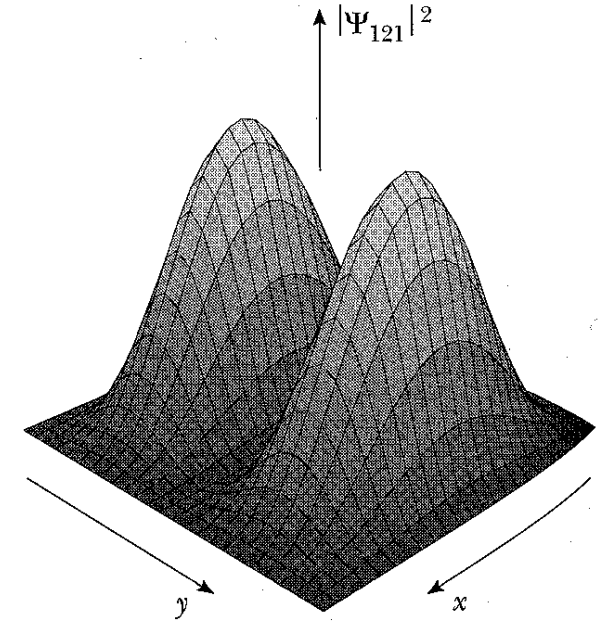
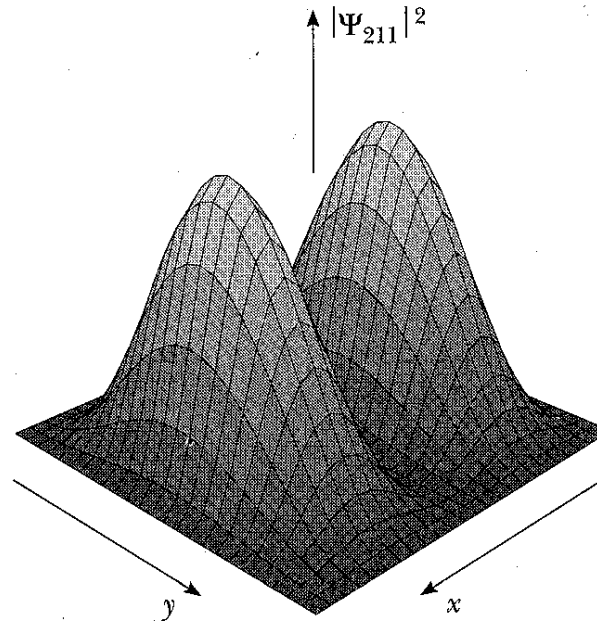
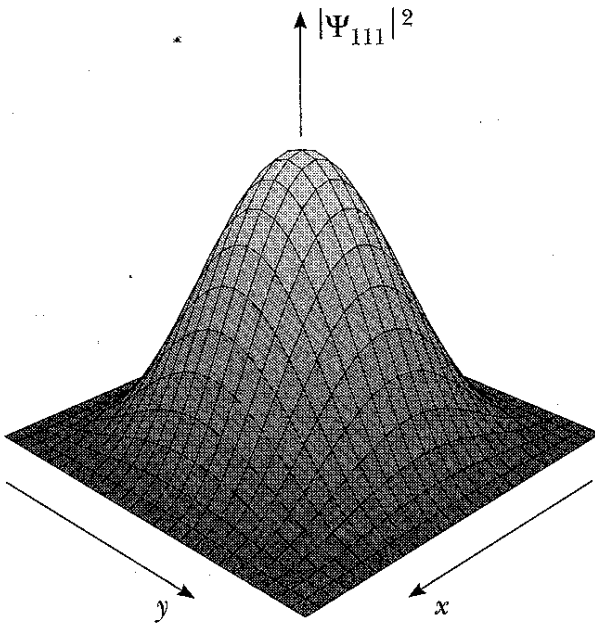


— 222

— 221, 212, 122

— 211, 121, 112

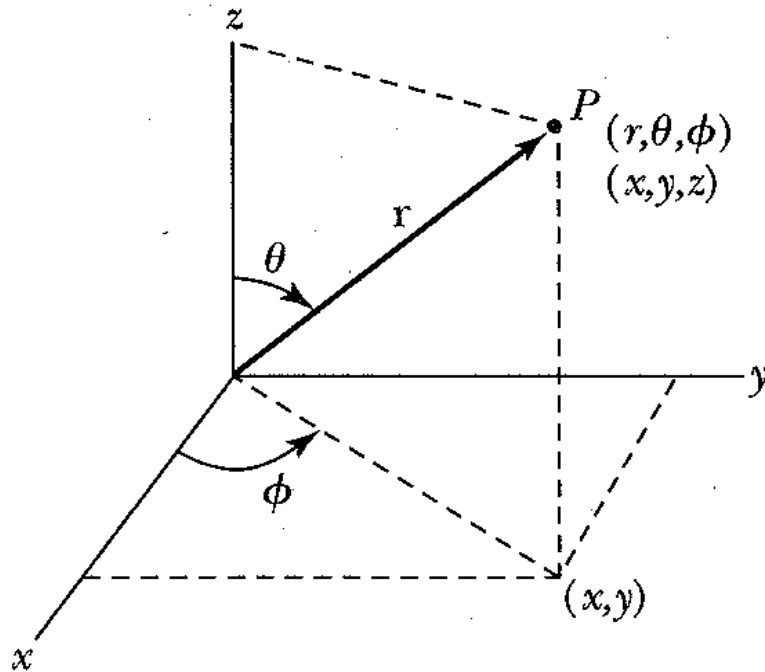
— 111



A eq. independente do tempo: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi$

Coordenadas esféricas: $\psi \equiv \psi(r, \theta, \phi)$ e

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$



$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

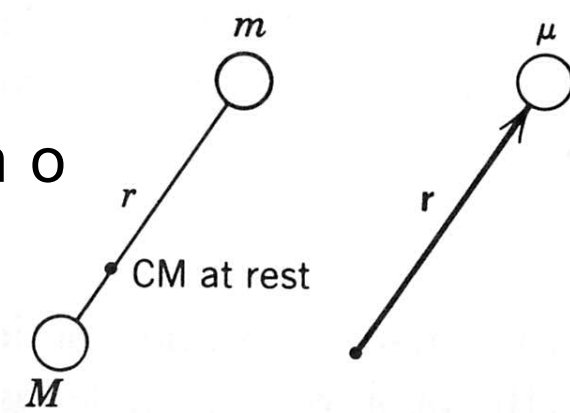
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\theta = \cos^{-1} \frac{z}{r} \quad (\text{Ângulo polar})$$

$$\phi = \tan^{-1} \frac{y}{x} \quad (\text{Ângulo azimutal})$$

Forças centrais

Problema de 2 corpos (massas m e M), com o CM em repouso.



Redução ao problema de 1 corpo: $\mu = \frac{mM}{M + m}$

Força conservativa, portanto: $\mathbf{F} = -\hat{\mathbf{r}} \frac{dV(r)}{dr}$
com $V(r)$ arbitrário.

Força central $\Rightarrow$ torque na partícula = 0:

$$\mathbf{p} = \mu \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad \text{e} \quad \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

$$\Rightarrow \frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = 0$$

Forças centrais

Como $\mathbf{L}$ é constante, a órbita está contida em um plano, que contém a origem e é $\perp$ a $\mathbf{L}$.

Nesse plano, o momento tem componentes:

$$p_r = \mu \frac{dr}{dt} \quad \text{e} \quad p_\perp = \mu r \frac{d\chi}{dt}$$

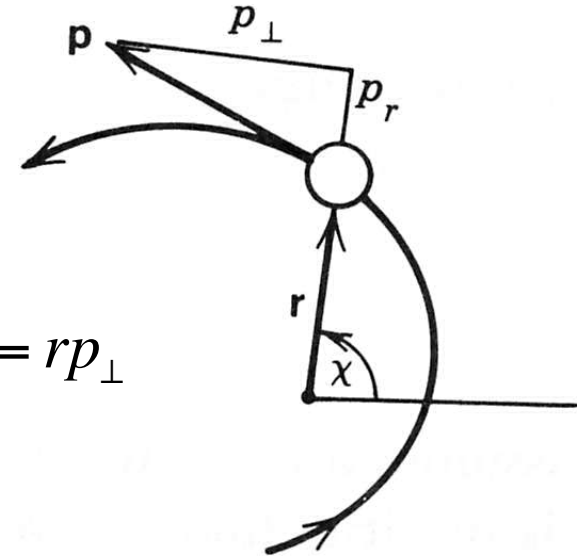
e portanto o momento angular é dado por: $L = rp_\perp$

A energia cinética pode ser escrita como:

$$\frac{p^2}{2\mu} = \frac{p_r^2 + p_\perp^2}{2\mu} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

e a energia total:

$$\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) = E$$



Essa equação foi assinalada, pois é a partir dela que vamos examinar como fica a equação de Schrödinger para o potencial coulombiano.

Mas vamos aproveitar e analisar um pouco esse resultado, que só envolve a coordenada radial, e no qual L e E são constantes, que definem a órbita clássica.

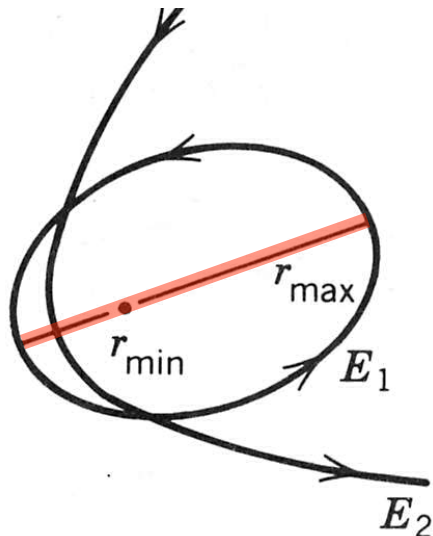
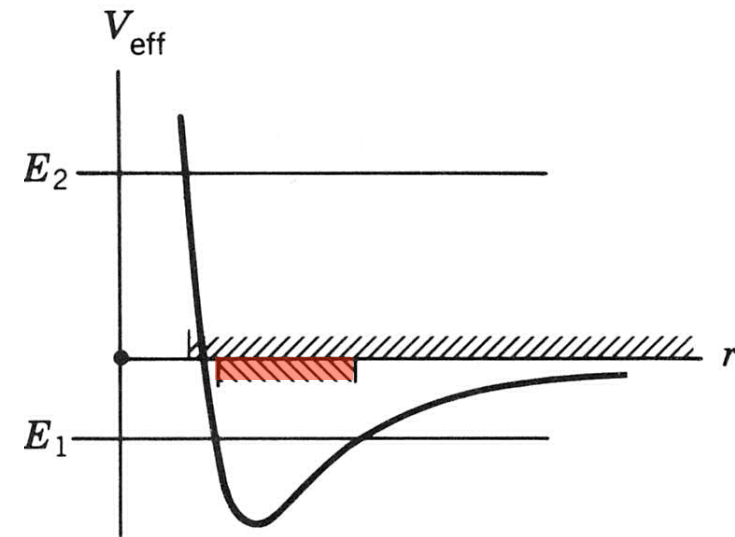
Podemos definir um potencial efetivo como: $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2}$

E a eq. para a energia total fica: $\frac{p_r^2}{2\mu} + V_{\text{eff}}(r) = E$

No caso de um potencial atrativo,

$$V(r) = -V_0 / r$$

para um dado valor de L , o potencial efetivo tem a forma ao lado.



O valor da energia total define o tipo de órbita da partícula.