Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I

AULA 20

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br

1o. Semestre de 2015
Monitor: Gabriel M. de Souza Santos

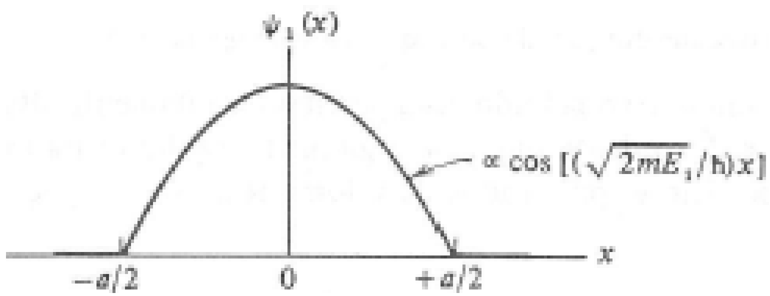
Página do curso:
http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=5215

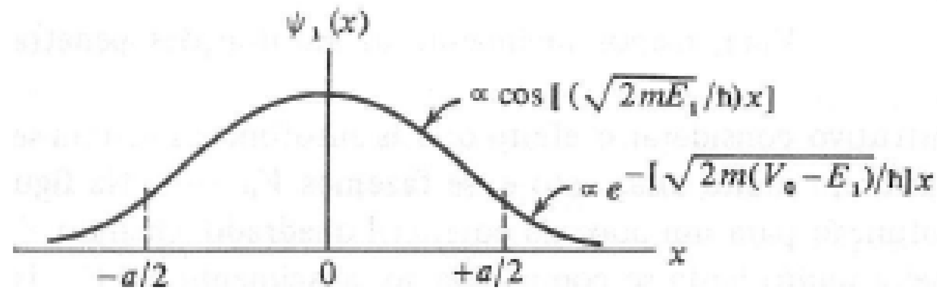
29/05/2015

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito 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 peça 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

$$E_n \approx \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(L+2\delta)^2}$$

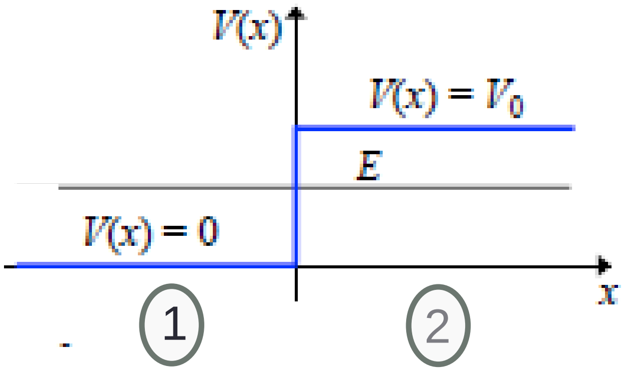
Energia da partícula ligada no poço finito

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

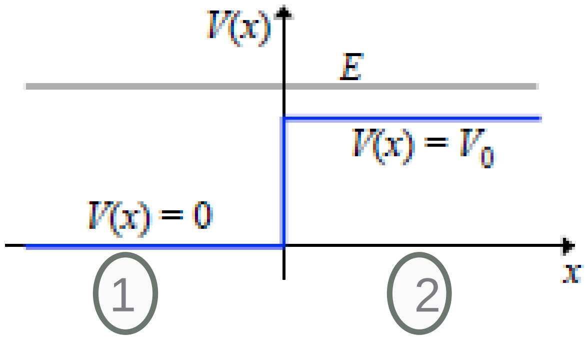
E < Vo

“Potencial Degrau”

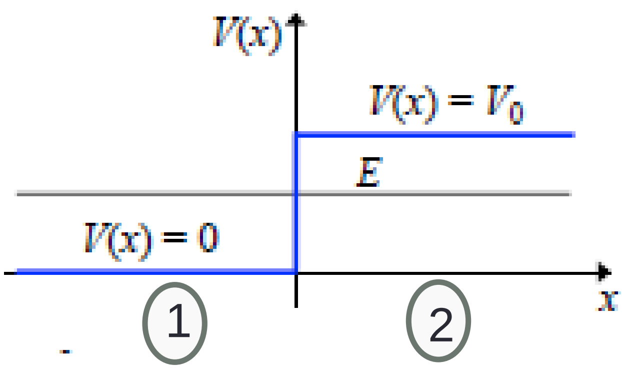
E > Vo



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



1) Caso E< Vo



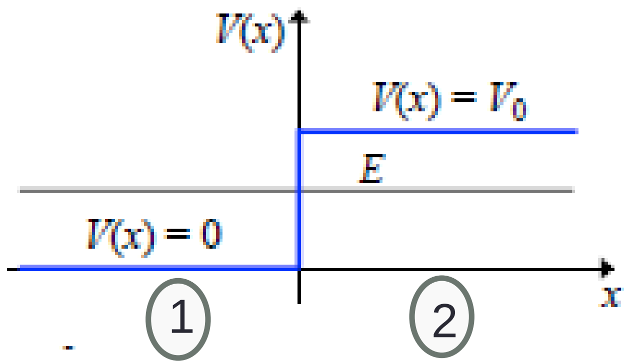
Região 1 x<0

Classicamente a partícula seria refletida em x=0

E quanticamente o que acontecerá?

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

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

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

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$ Região 2

$$R = \frac{B^* B}{A^* A} = \frac{(1 - ik_2/k_1)^*(1 - ik_2/k_1)}{(1 + ik_2/k_1)^*(1 + ik_2/k_1)} = \frac{(1 + ik_2/k_1)(1 - ik_2/k_1)}{(1 - ik_2/k_1)(1 + ik_2/k_1)} = 1$$

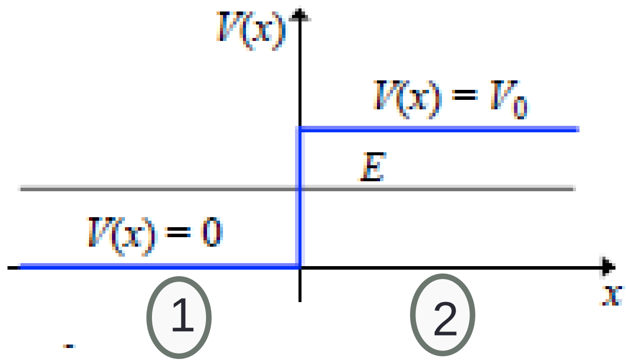
$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2}\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{ik_1x} + \frac{C}{2}\left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : x< 0} \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : x> 0} \end{cases}$$

$$\boxed{R = 1}$$

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

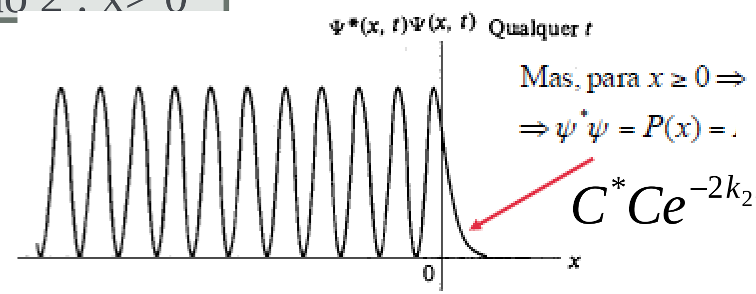
$$\psi^*(x).\psi(x)$$

$$\psi^*(x).\psi(x) = C^*Ce^{-2k_2x}$$

Região 2 : x> 0

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

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$ Região 2



$$C^*Ce^{-2k_2x} > 0$$

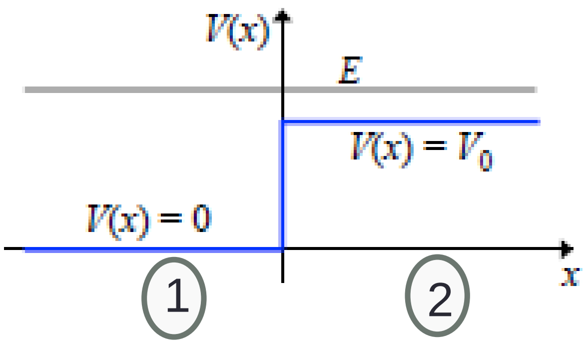
Nesta região temos E<Vo e portanto energia cinética seria negativa

- 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

2) Caso E> Vo **"Potencial Degrau"**



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

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$ Região 2 $$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

1) Condição de finitude

x > 0 região 2

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

D=0 A onda não volta

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$$

2) Condição de continuidade a função e da derivada

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

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

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

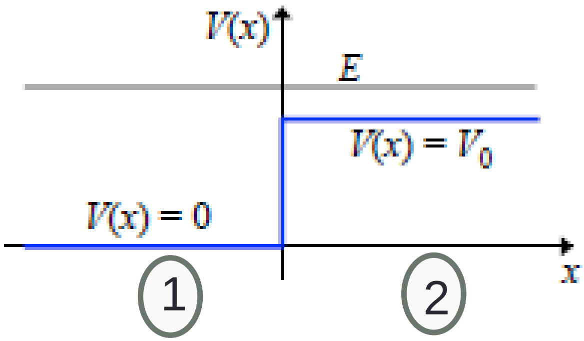
$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

$$Aik_1e^0 - Bik_1e^0 = Cik_2e^0$$

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



Coeficiente de Reflexão e Transmissão:

$$\boxed{R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2}$$

$$\boxed{T = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2}$$

reflexão: + transmissão:

$$R + T = \frac{4k_2k_1}{(k_1+k_2)^2} + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = 1$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

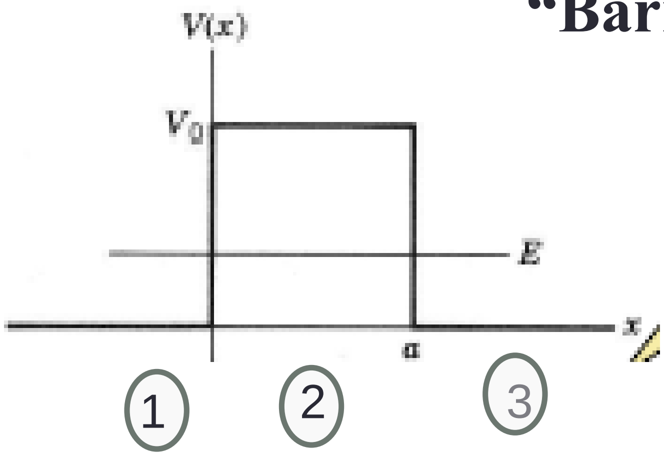
$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

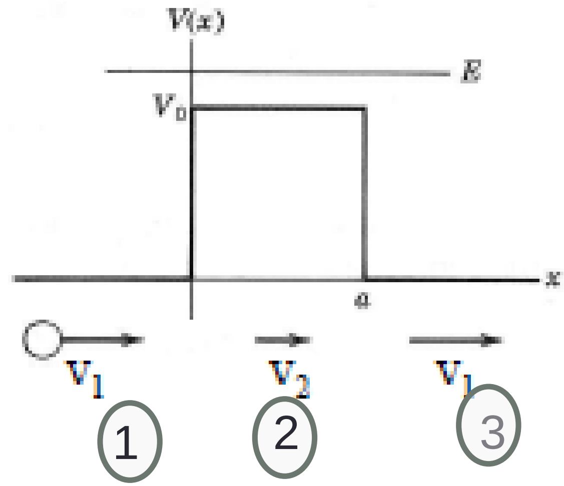
$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}\right)^2 \quad \boxed{E > V_0}$$

$$R = 1 - T = 1 \quad \boxed{E < V_0}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Barreira de potencial”





1) Caso E< Vo
reflexão

2) Caso E> Vo
transmissão

Região 1 x<0

Região 3 x>a

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

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

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

Solução da partícula livre

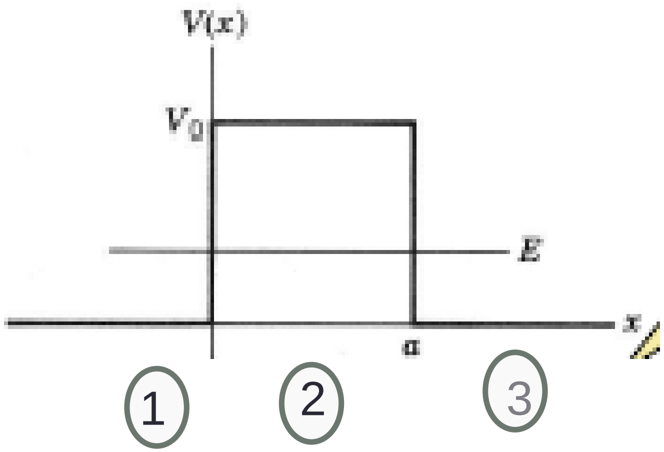
Região 2 0<x>a

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi(x) \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

’otencial Degrau”



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

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$ Região 3

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

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

1) Condição de finitude

Mas não podemos fazer D=0

Se a partícula incide da esquerda

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

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

$$\boxed{G=0}$$

2) Condição de continuidade da função e da derivada para x=0

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

$$Ae^0 + Be^0 = Ce^0 + De^0$$

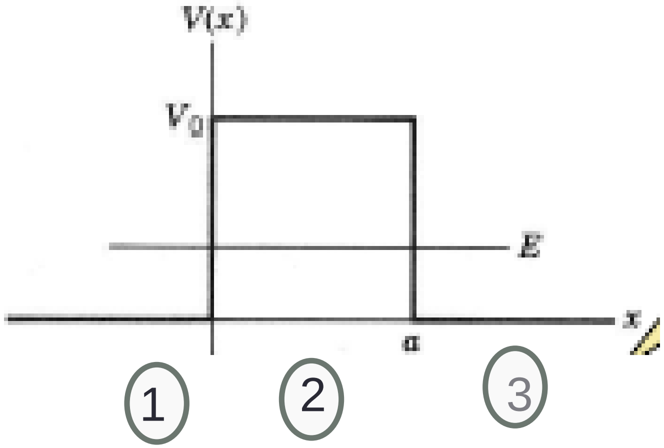
$$\boxed{A + B = C + D}$$

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

$$Aik_1e^0 - Bik_1e^0 = -Ck_2e^0 + Dk_2e^0$$

$$\boxed{ik_1(A - B) = -ik_2(C - D)}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



"Potencial Degrau"

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

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$ Região 3

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

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

3) Condição de continuidade da função e da derivada para x=a

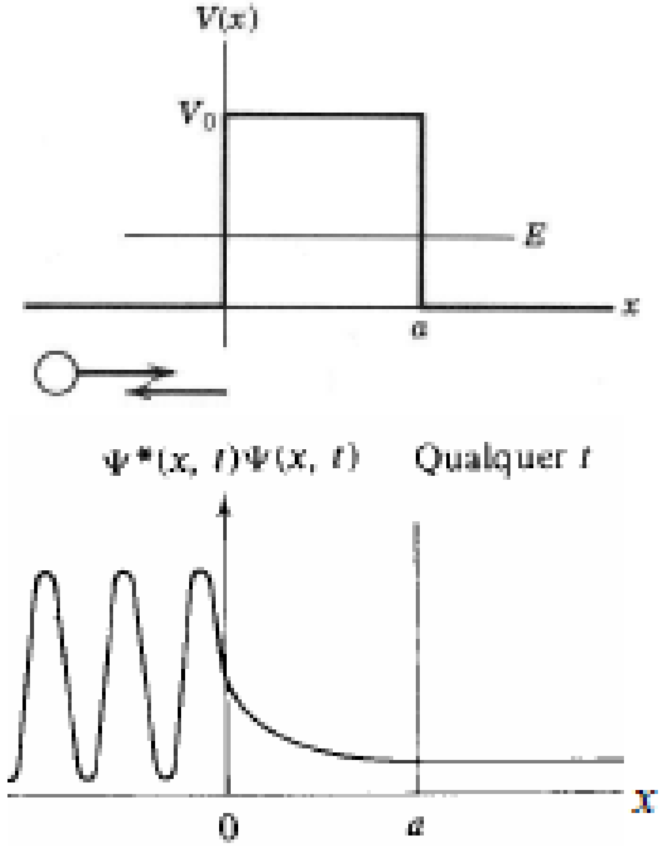
$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

$$\boxed{Ce^{-k_2a} + De^{k_2a} = Fe^{-ik_1a}}$$

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

$$\boxed{-k_2(Ce^{-k_2a} + De^{+k_2a}) = ik_1Fe^{-ik_1a}}$$

Caso $E < V_0$



$$R = \frac{B^* B}{A^* A} \qquad T = \frac{F^* F}{A^* A}$$

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2 senh^2(k_2 a)}{4E(V_0 - E)}\right]^{-1}$$

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

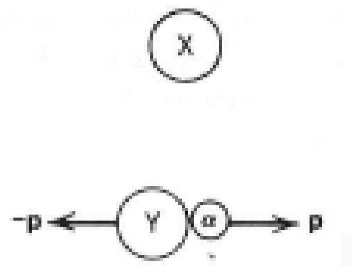
Na situação em que $k_2 a >> 1$

$$T \approx 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2k_2 a}$$

A probabilidade de transmissão se reduz a

Decaimento α

$$^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Y + {}^{4}_{2}\alpha$$

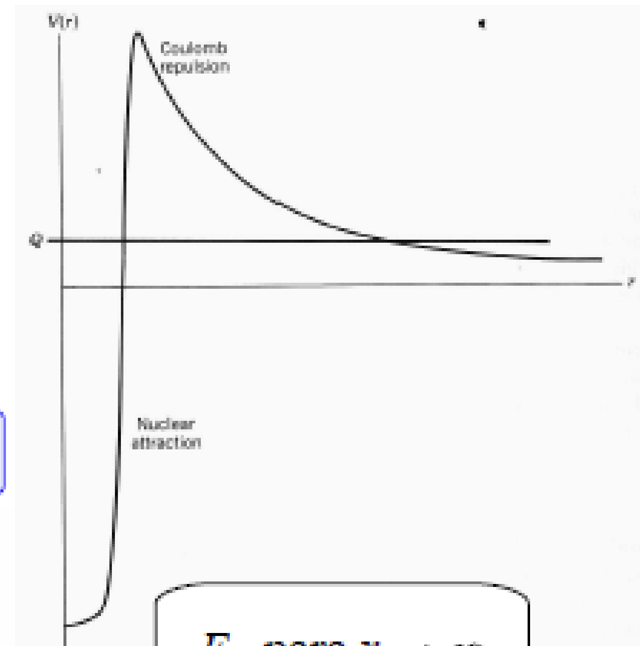


Gamow, Condon & Gurney, 1928: decaimento α ⇒ tunelamento

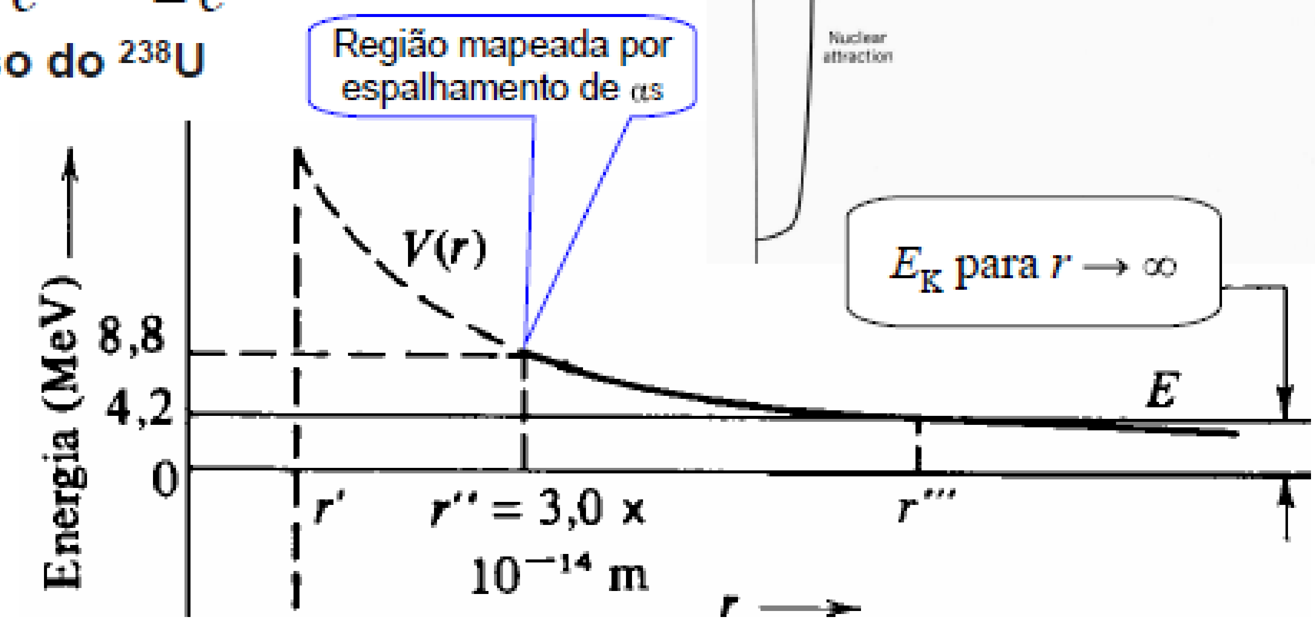
Probabilidade de transmissão:

$$T \approx e^{-2k_2 a} = e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}a/\hbar}$$

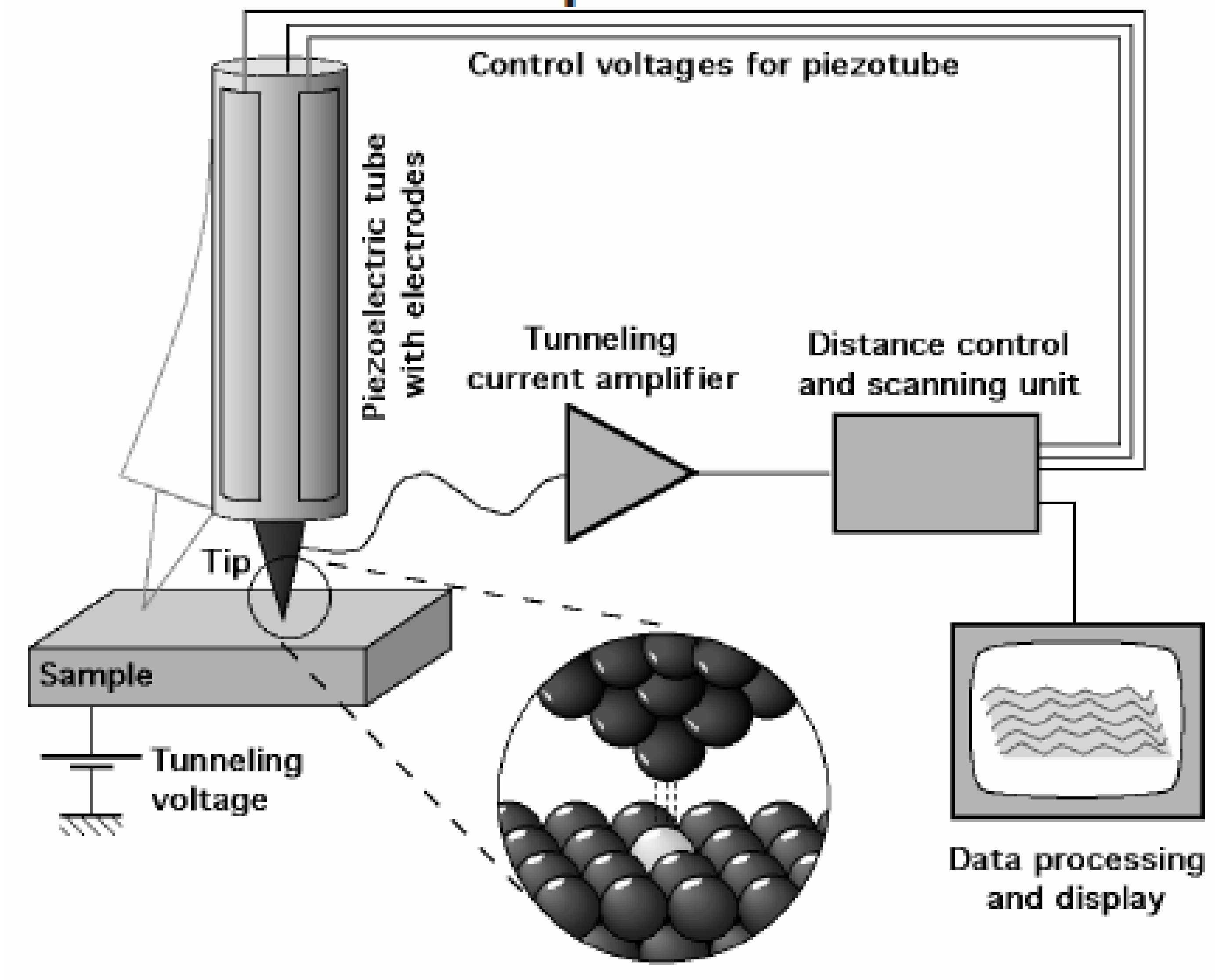
$$T \approx e^{-2k_2 a} = e^{-2\int_{r'}^{r''}\left(\sqrt{2m[V(r)-E]}a/\hbar\right)dr}$$



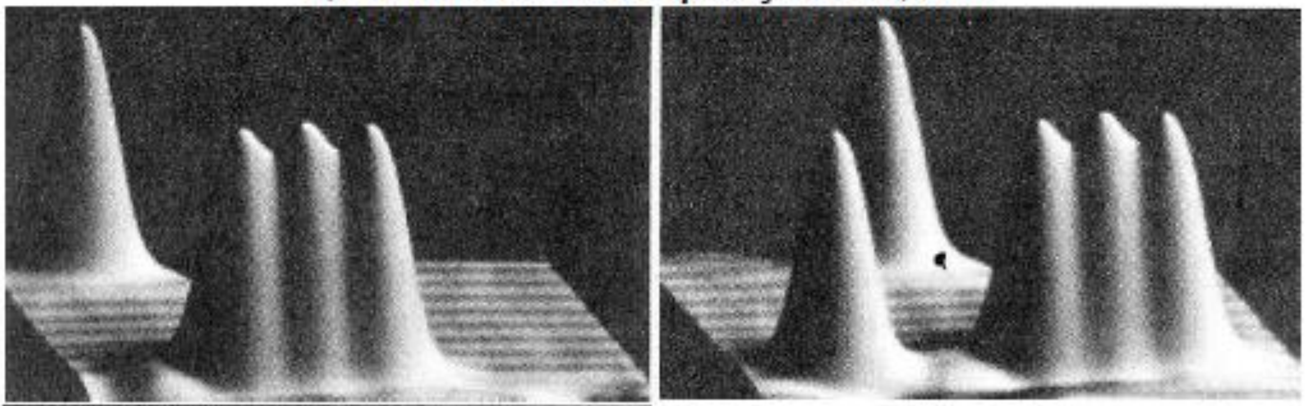
Caso do ^{238}U

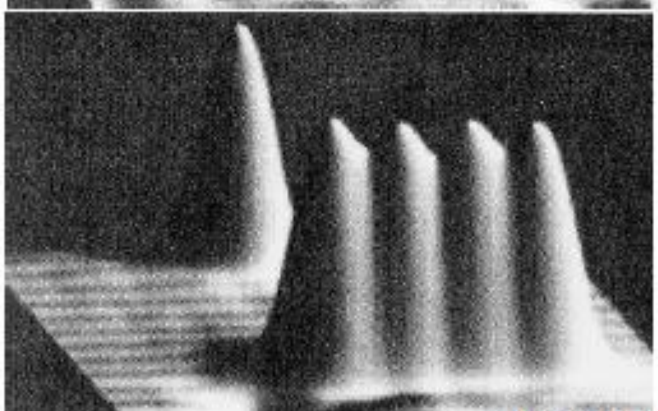


Microscópio de tunelamento



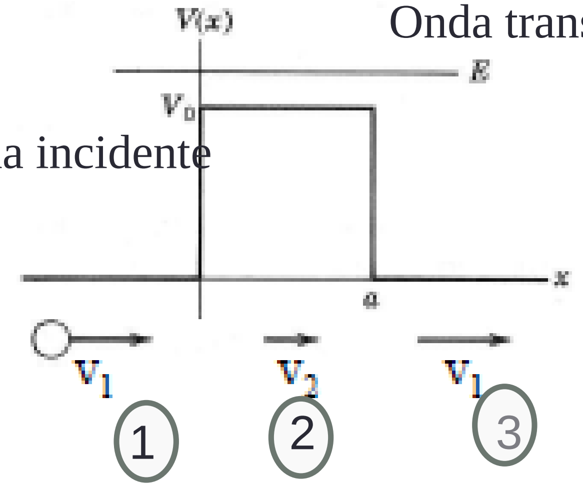
Átomos de Xe na superfície de Ni
0,16 nm de altura e separação de 0,5 nm





Limitação: amostras devem necessariamente ser condutoras.

"Barreira de potencial"



2) Caso E> Vo

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

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$ Região 3

$$\psi_2(x) = Ce^{-ik_2x} + De^{ik_2x}$$ Região 2

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} \qquad T = \frac{F^*F}{A^*A}$$

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2 sen^2(k_2a)}{4E(E-V_0)}\right]^{-1}$$

A probabilidade de transmissão é 1, isto é T=1 quando $k_2a=n\pi$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula sujeita ao potencial dos oscilador harmônico simples"
É muito importante na física pois é um modelo de qualquer sistema que envolva oscilações:

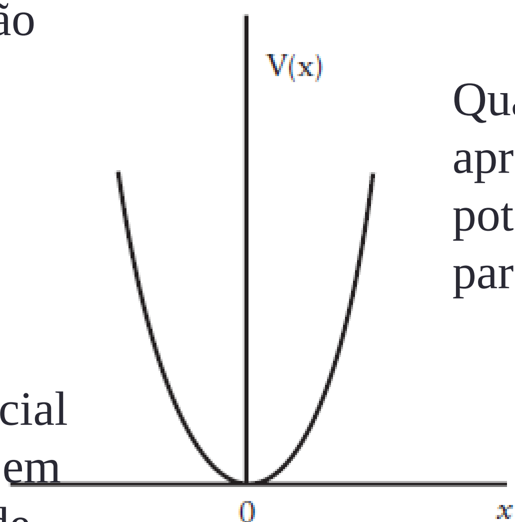
- **Vibração de uma molécula em gases e sólidos**
- **Moléculas diatômicas**
- **Átomos na estrutura cristalina**
- **Partículas no núcleo atômico**

Partícula sujeita a uma força de restauração F=-Kx
Cuja energia potencial é:

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x$$

Frequência angular de vibração

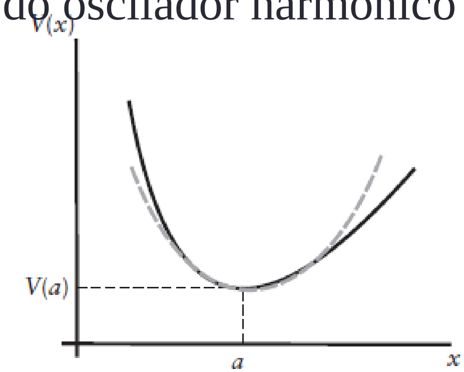
$$\omega = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} = 2\pi f$$



Classicamente temos um potencial deste tipo onde a partícula fica em equilíbrio na origem (x=0), onde V(x) é mínimo e a força é nula

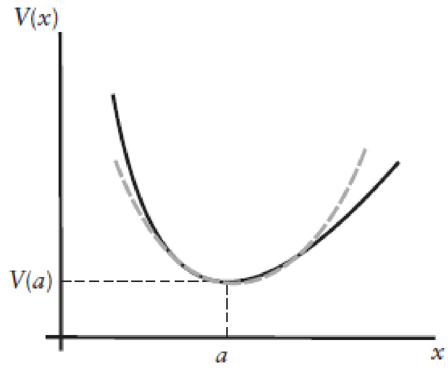
$$F_x = -\frac{dV}{dx} = 0$$

Quanticamente sempre podemos aproximar o ponto de equilíbrio de um potencial qualquer, V(x), pelo potencial parabólico do oscilador harmônico



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Em torno do ponto x=a temos que V(x) tem um mínimo



$$\frac{d^2V}{dx^2} > 0$$ No ponto de equilíbrio estável

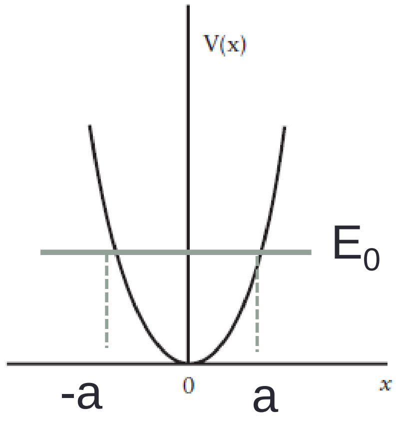
$$\frac{d^2V}{dx^2} < 0$$ No ponto de equilíbrio instável

Próximo ao ponto de equilíbrio estável (como a), V(x) pode ser ajustada a uma parábola

Equação de Schrödinger

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

Queremos estudar agora a descrição quântica quando a partícula é afastada da posição de equilíbrio passa a oscilar entre x=-a e x=a



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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

Vamos analisá-la antes de resolve-la

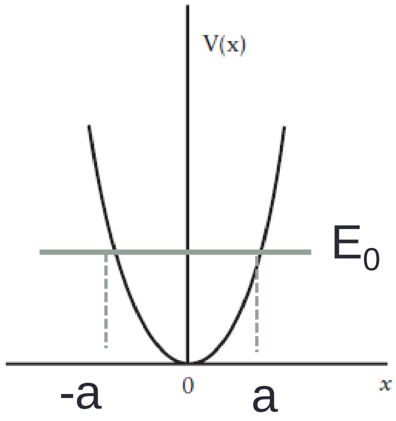
Como a partícula está confinada dentro do potencial pelas paredes, centrada em x=0, eu tenho zero probabilidade de encontra-la em x=infinito

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

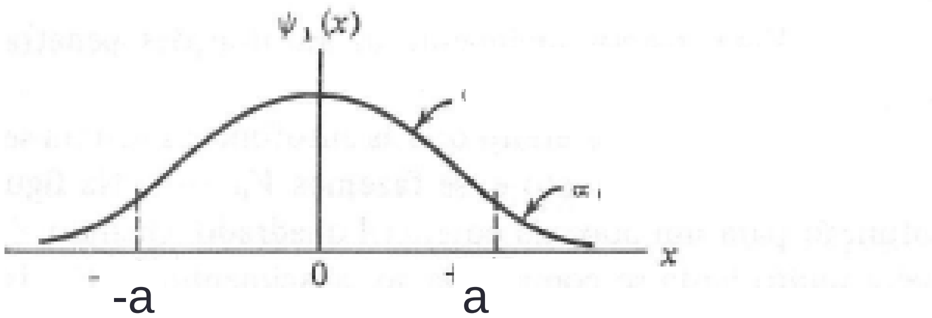
Sobre a energia:
Energia pode ser zero? Se E=0 então em x=0 V=0 então Ec=0
Mas se x=0 e p=0 o princípio de incerteza é violado já que conheço exatamente a posição e momento

$$\Rightarrow \quad E\neq 0$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



Sabemos que a função de onda não é zero em x= +a ou em x = -a, há uma pequena probabilidade de encontrar a partícula fora dos paredes do potencial,
A função de onda decai rapidamente para zero do outro lado da barreira

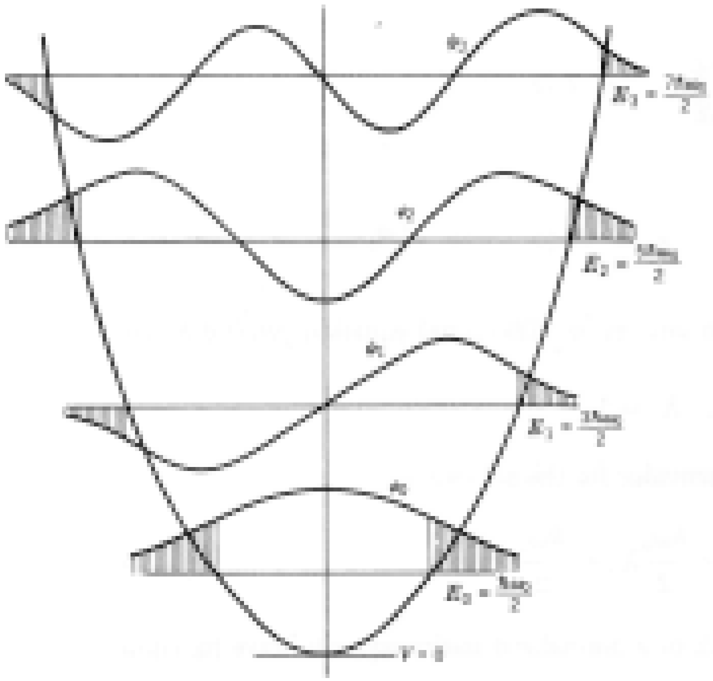


$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{C}{2}x^2\psi(x)=E\psi(x)$$

$$\beta^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

x<<<0 próximo do equilíbrio $\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\beta^2\psi(x) \quad \psi(x)=A\cos\beta x+A sen\beta x}$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



$$E_n = (n + 1/2)h\nu \qquad n=0,1,2,3....$$

Podemos escrever a solução da função de onda como:

$$\psi_n(x) = H_n[u(x)]e^{-\frac{u(x)^2}{2}}$$

$$u(x) = \left[\frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}\right]x$$

Onde H_n são polinômios de ordem n, com n>=0

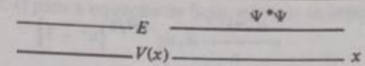
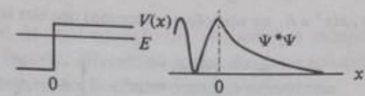
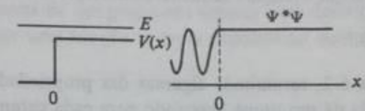
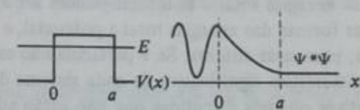
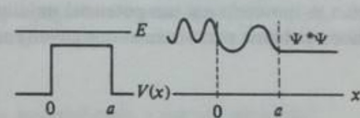
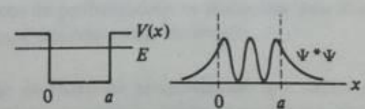
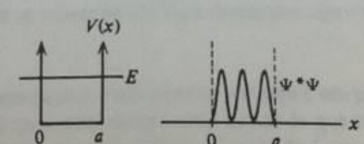
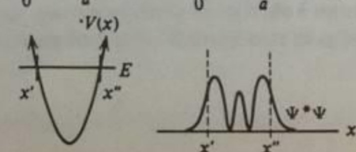
As funções H_n são relacionadas aos polinômios de Hermite que são tabelados tabulado

$$H_0[u(x)] = 1$$
$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$
$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$
$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$

$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}} \qquad \psi_2 = A_2(1 - 2u^2)e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_1 = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}} \qquad \psi_3 = A_3(3u - 2u^3)e^{-\frac{u^2}{2}}$$

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

Nome do Sistema	Exemplo Físico	Energias Total e Potencial	Densidade de Probabilidade	Característica Significativa
Potencial nulo	Próton em um feixe de um cíclotron			Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal			Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo			Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula α tentando escapar de barreira coulombiana			Efeito túnel
Barreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados			Nenhuma reflexão em certas energias
Poço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo			Quantização da energia
Poço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa			Aproximação para um poço de potencial finito
Potencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando			Energia de ponto zero

Equação de Schrödinger em três dimensões

Até o momento com consideramos apenas uma dimensão (x)
Na realidade para o sistema físico temos 3 dimensões

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t)+V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Podemos fazer separação de variáveis:

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