

**Universidade de São Paulo  
Instituto de Física**

# FÍSICA MODERNA I

---

## AULA 21

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

**1o. Semestre de 2015**

**Monitor: Gabriel M. de Souza Santos**

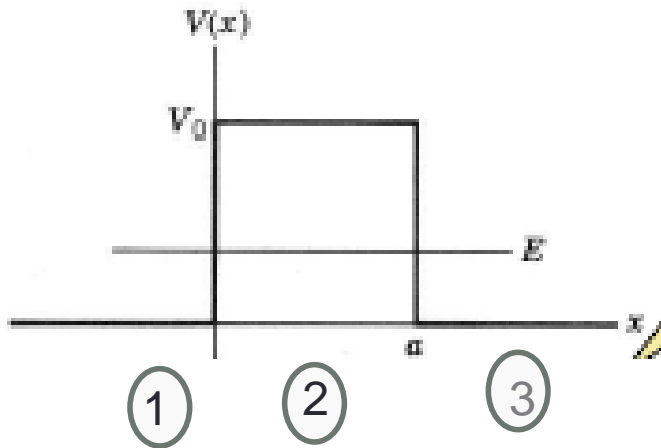
Página do curso:

<http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=5215>

**03/06/2015**

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Potencial Degrau”



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

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

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

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

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

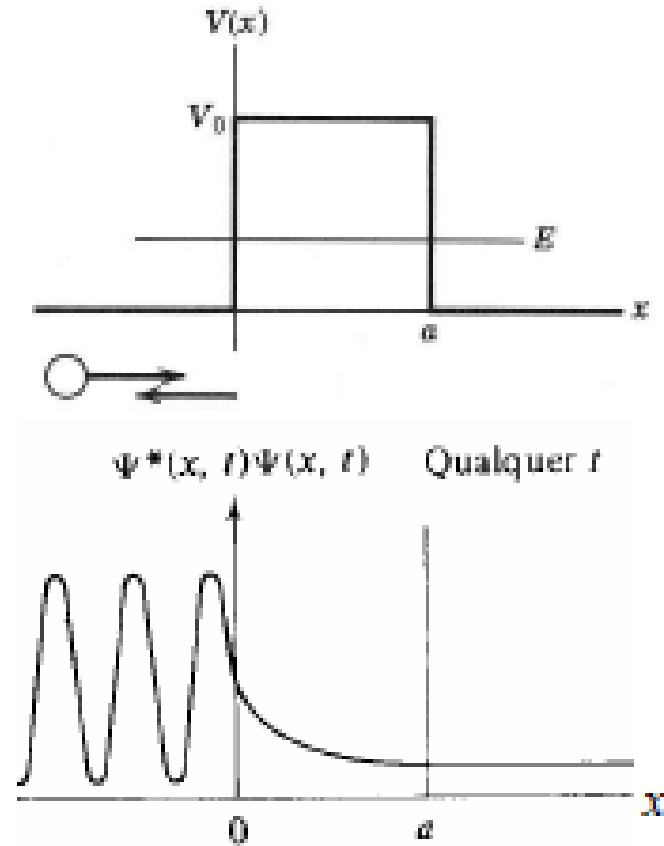
$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

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

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

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

Caso  $E < V_0$



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

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

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

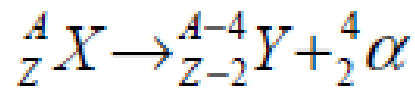
Na situação em que  $k_2 a \gg 1$

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



A probabilidade de transmissão se reduz a

# Decaimento $\alpha$



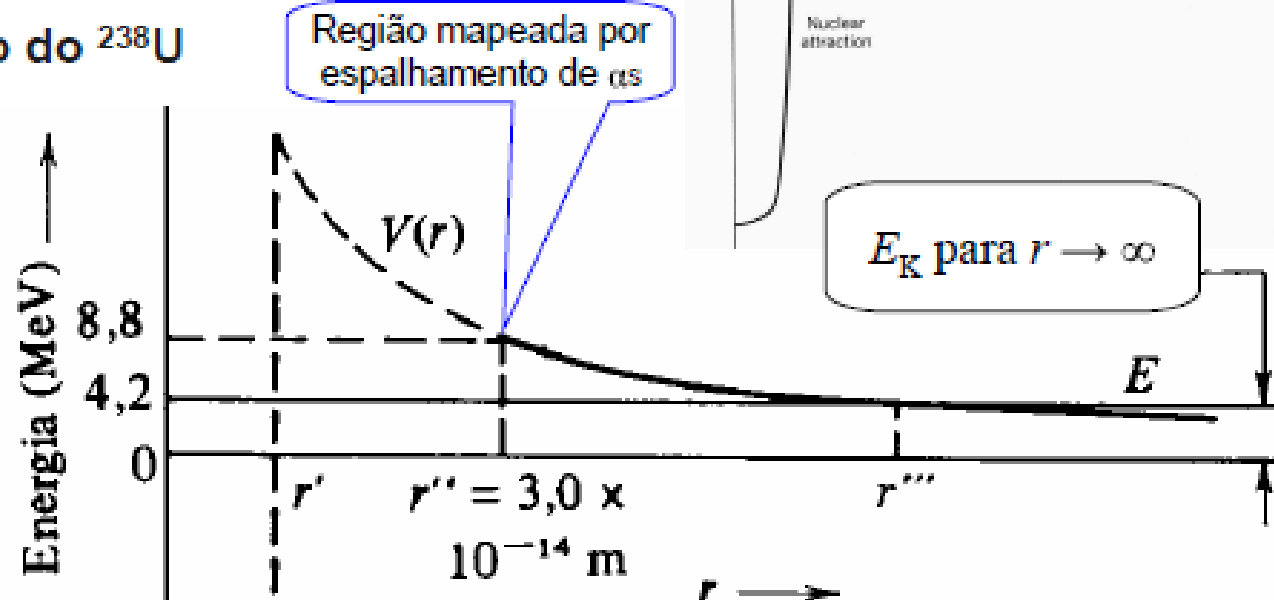
**Gamow, Condon & Gurney, 1928:**  
decaimento  $\alpha \Rightarrow$  tunelamento

Probabilidade de transmissão:

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

$$T \approx e^{-2k_2 a} = e^{-2 \int_r^r (\sqrt{2m[V(r) - E]}/\hbar) dr}$$

Caso do  ${}^{238}\text{U}$

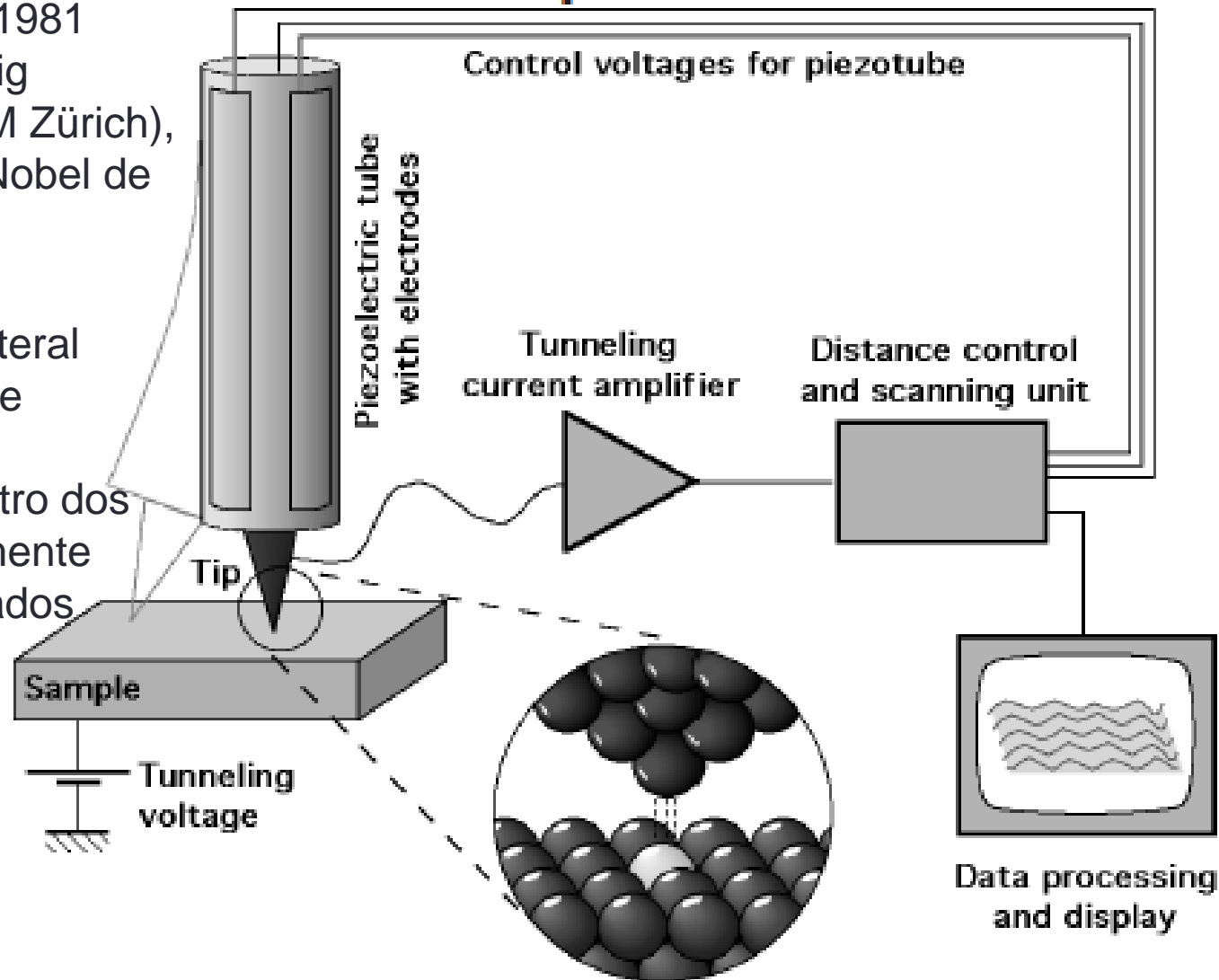


# Microscópio de tunelamento

Desenvolvimento em 1981  
Inventores, Gerd Binnig  
e Heinrich Rohrer (IBM Zürich),  
receberem o Prêmio Nobel de  
Física em 1986.

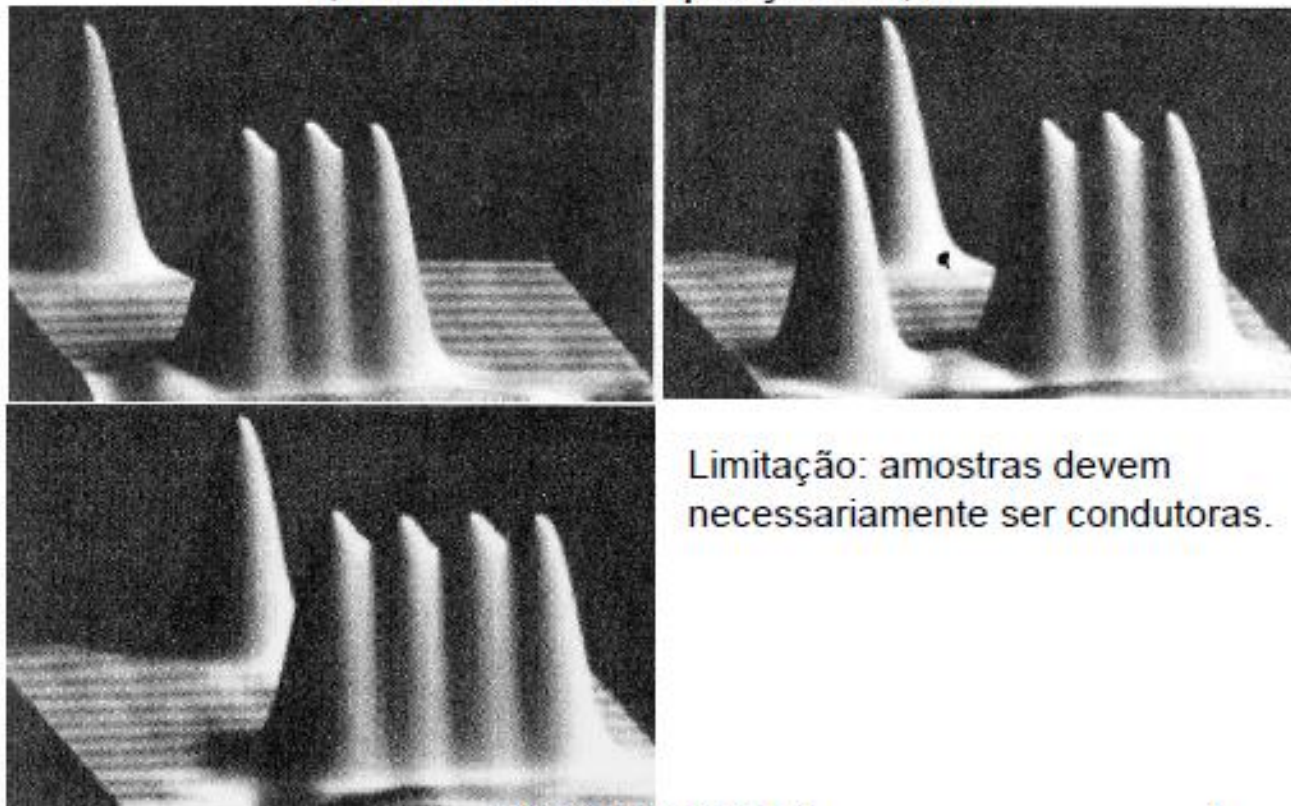
0.1 nm de resolução lateral  
0.01 nm de resolução de  
profundidade.

átomos individuais dentro dos  
materiais são rotineiramente  
visualizados e manipulados



Quando a ponta condutora é posicionada muito próxima da superfície à ser analisada, uma corrente de polarização (diferença de voltagem) aplicada entre os dois pode permitir que os elétrons passem através do vácuo entre ambos.

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



## Equação de Schrödinger em três dimensões

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

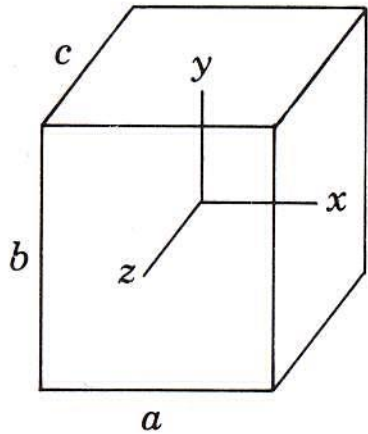
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

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

Podemos fazer separação de variáveis:

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

# Aplicação: Partícula confinada em uma caixa retangular



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

lembrando o caso unidimensional  
com  $-a/2 < x < a/2$ ,  $V = 0$

Cuja solução é:  $\cos kx$  ou  $\sin kx$

Com autovalores de energia

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} & \text{Para } n \text{ ímpar} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} & \text{Para } n \text{ par} \end{cases}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

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

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

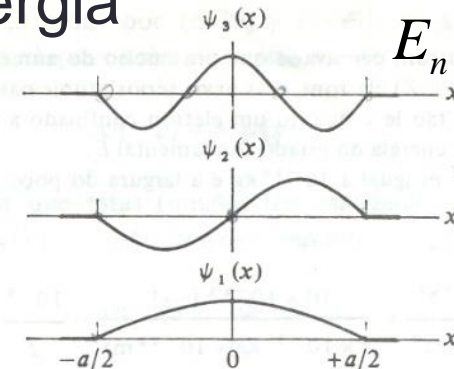
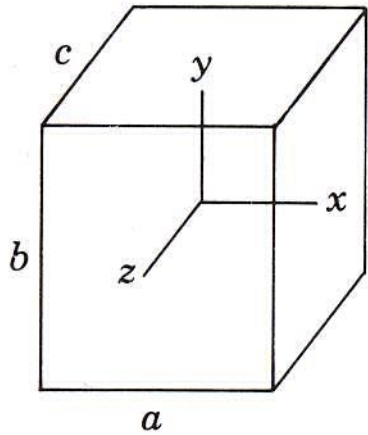


FIGURA 6-31. Algumas das primeiras autofunções de um poço de potencial quadrado infinito.



# Aplicação: Partícula confinada em uma caixa retangular



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

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

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

$a \neq b \neq c$

——— 222

——— 212

——— 122

——— 221

Os autovalores de energia são dados em termos dos 3  $n^{\text{os}}$  quânticos ( $n_1, n_2$  e  $n_3$ )

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

——— 112

——— 211

——— 121

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}$$

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

——— 111

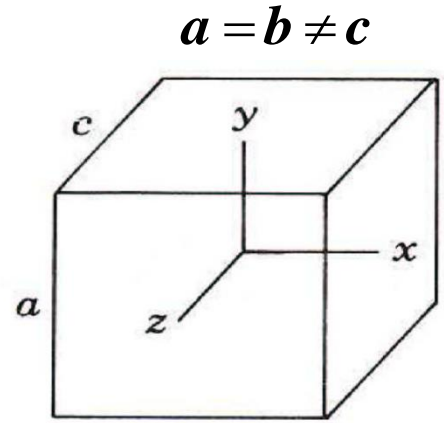
No caso em que duas arestas são iguais

$$a = b \neq c$$

Porém, se os lados do retângulo forem iguais, isto é, existir uma **simetria** no problema, diferentes combinações de números quânticos  $(n_1, n_2, n_3)$  podem levar ao mesmo valor de energia

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

Degenerescência: diferentes estados com a mesma energia

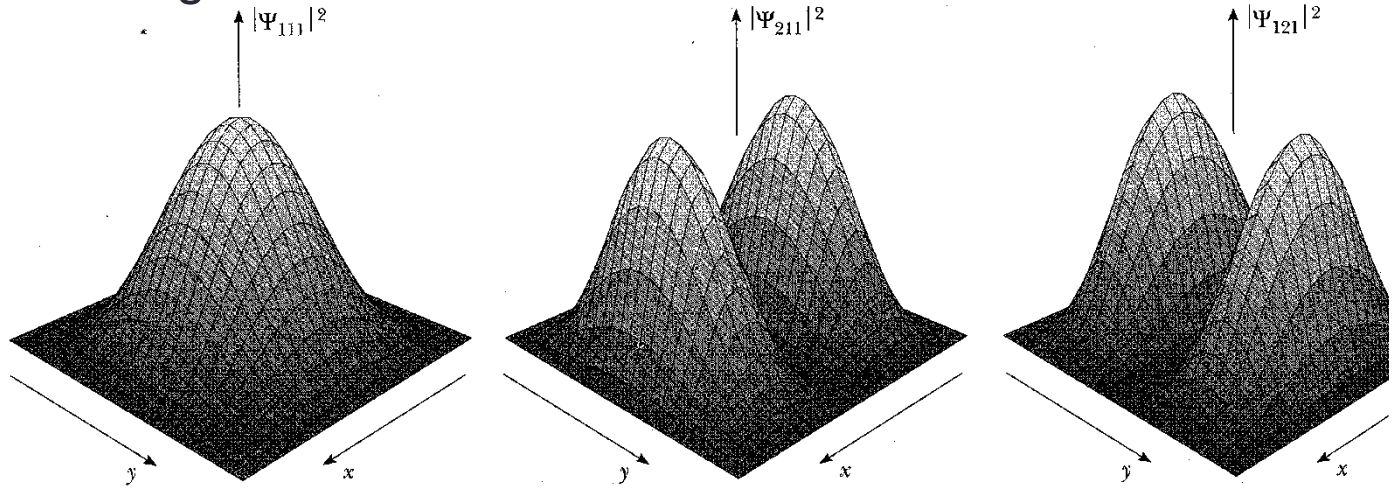


$a$  ————— 222

————— 212, 122  
 ————— 221

————— 112  
 ————— 211, 121

————— 111



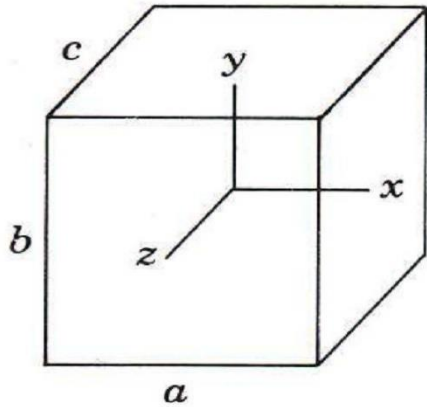
Temos aqui as densidades de probabilidades para a partícula dentro da caixa:

- Estado fundamental  $|\psi_{111}|^2$
- Primeiro estado excitado  $|\psi_{211}|^2$  e  $|\psi_{121}|^2$

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

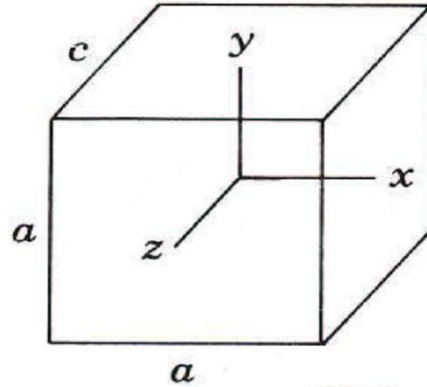
Degenerescência: diferentes estados apresentam a mesma energia

$a \neq b \neq c$



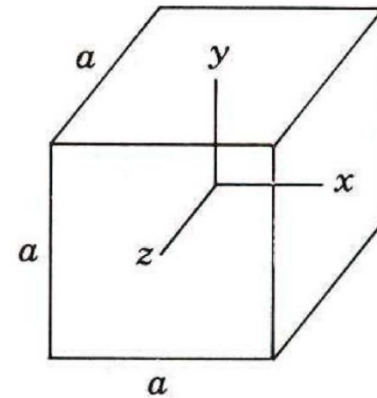
- 222
- 212
- 122
- 221
- 112
- 211
- 121
- 111

$a = b \neq c$



- 222
- 212, 122
- ==== 221
- 112
- ==== 211, 121
- 111

$a = b = c$



- 222
- 221, 212, 122
- 211, 121, 112
- 111

# Equação de Schrödinger para o átomo de H

Para uma boa aproximação para a energia potencial do sistema elétron-próton : é eletrostática:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

O potencial depende somente da distância entre o próton e o elétron

Este será o primeiro sistema que será necessário a complexidade total da Equação de Schroedinger em três dimensões.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x, y, z)} \left( \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} \right) = E - V(r)$$

Massa reduzida

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