Física IV

2020

Professor: Valdir Guimarães

E-mail: valdir.guimaraes@usp.br

Aula-17: Eq. Schrodinger 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

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

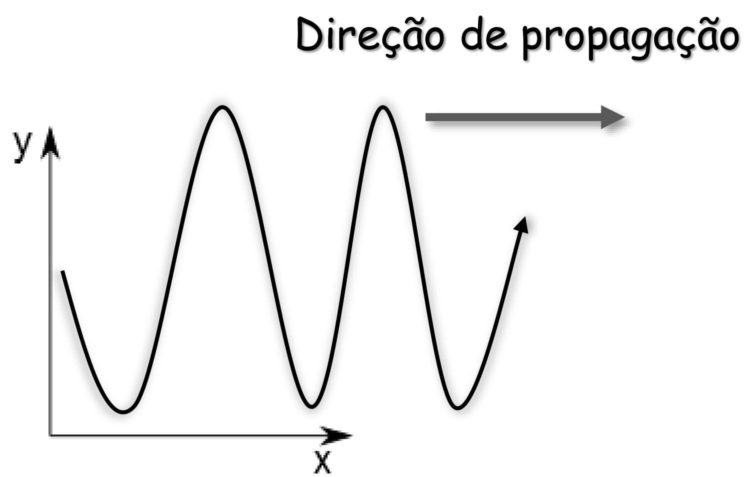
$$\left\{\begin{array}{l} \lambda = 2\pi/k \\ k = 2\pi/\lambda \\ T = 2\pi/\omega\ , \\ \nu = 1/T = \omega/2\pi \\ \omega = 2\pi\nu\ . \end{array}\right.$$

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

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

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

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



❑ 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:

- Estados definidos de energia são importantes para a mecânica quântica.
- Para cada nível de energia em um átomo de hidrogênio existe uma função de onda específica.
- Para um átomo em um estado que não tem um nível de energia definido, a função de onda pode ser escrita como uma combinação de funções de onda de energia definida.

Um estado de energia definida normalmente é chamado de estado estacionário

Importante:

Um estado estacionário não significa que a partícula está parada mas que ela tem um estado de energia definido que não depende do tempo.

Equação de Schrodinger

A equação de Schrodinger é baseada na ideia de conservação de energia

Energia total = Energia cinética + Energia potencial:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x,t)$$

$$E\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi + U(x,t)\Psi$$

Usando que:

$$E\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$p\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

$$p^2\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U(x,t)\Psi$$

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

Equação de Schrodinger

Erwin Schrodinger
(1887-1961)

Nobel 1933

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

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

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

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

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

Coordenadas esféricas

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

Vamos agora analisar algumas situações física com potenciais diferentes.

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

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

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)

Partícula livre

Partícula livre: $U(x) = 0$

Eq. de Schrödinger

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

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

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

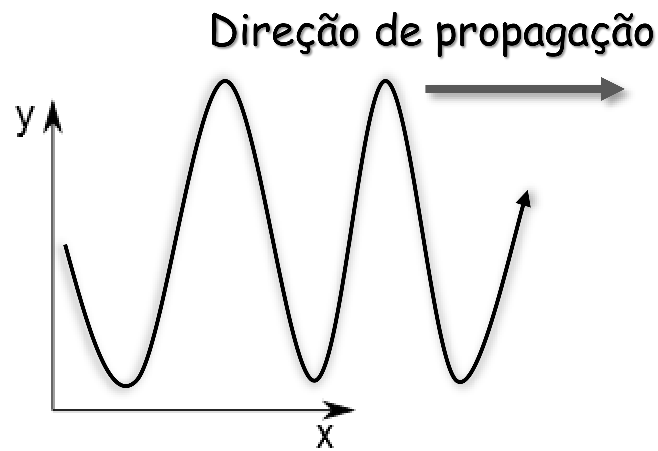
Solução: $\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$ **ou** $\Psi(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}$

Superposição de duas funções de onda

com: $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

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

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

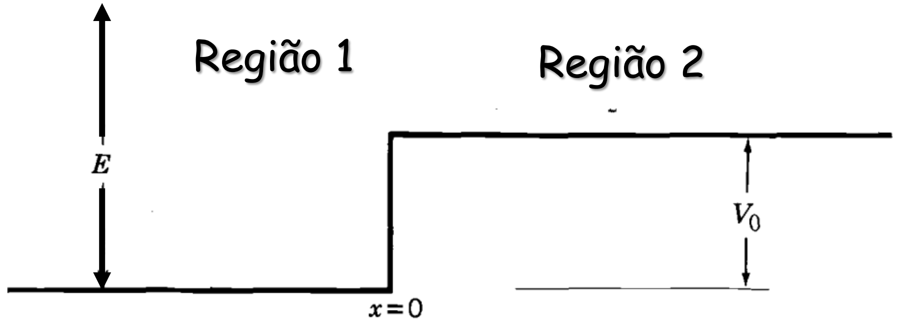


Potencial degrau

Potencial degrau com E>V_0

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

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



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

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

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

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

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

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

Para x=0

$$\begin{cases} (A+B) = C \\ k_1(A-B) = k_2C \end{cases}$$

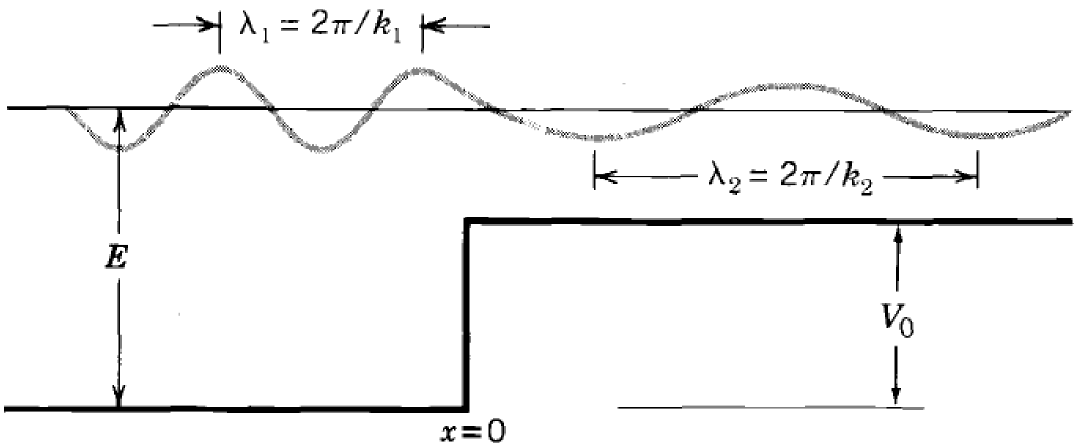
$$B = A\frac{(1-\frac{k_2}{k_1})}{(1+\frac{k_2}{k_1})}$$

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

$$D = 0$$

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

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

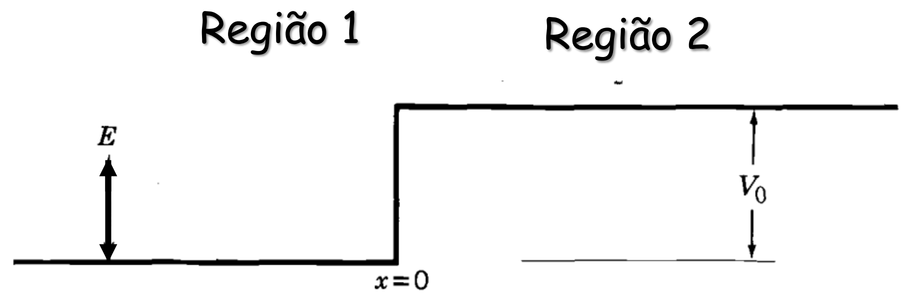
A soma dos coeficientes de transmissão e reflexão deve ser 1 $\Rightarrow$ $R+T=1$

Potencial degrau

Potencial degrau com E<V₀

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

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



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

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

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

$$\Psi_1(x) = Ae^{+ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$$

$$\Psi_2(x) = De^{-k_2 x}$$

Para x=0

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

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

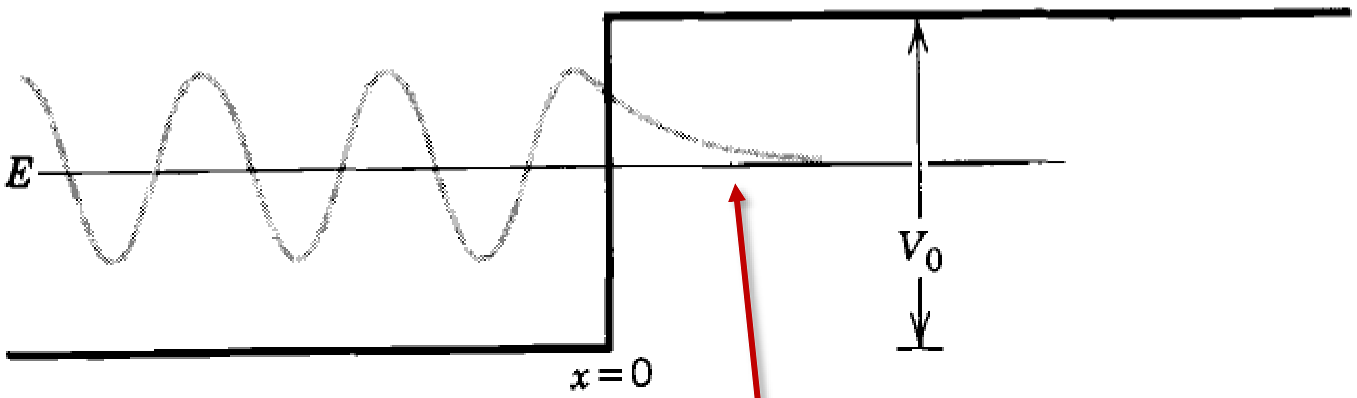
$$D = A\frac{2}{(1+\frac{k_2}{k_1})}$$

$$C = 0$$

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

Região 1

Região 2

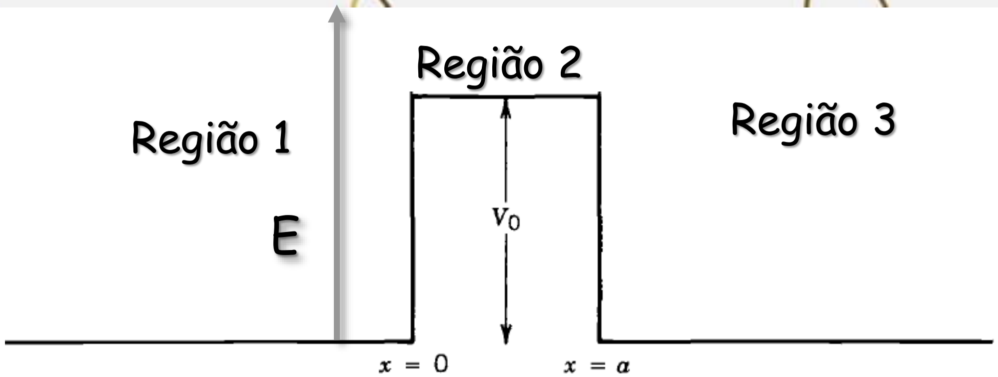


Transmissão de onda pela barreira
(penetrabilidade)
Não tem análogo clássico.

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

Solução $$\Psi_3(x) = Fe^{+ik_3x} + Ge^{-ik_3x}$$ com: $$k_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

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

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

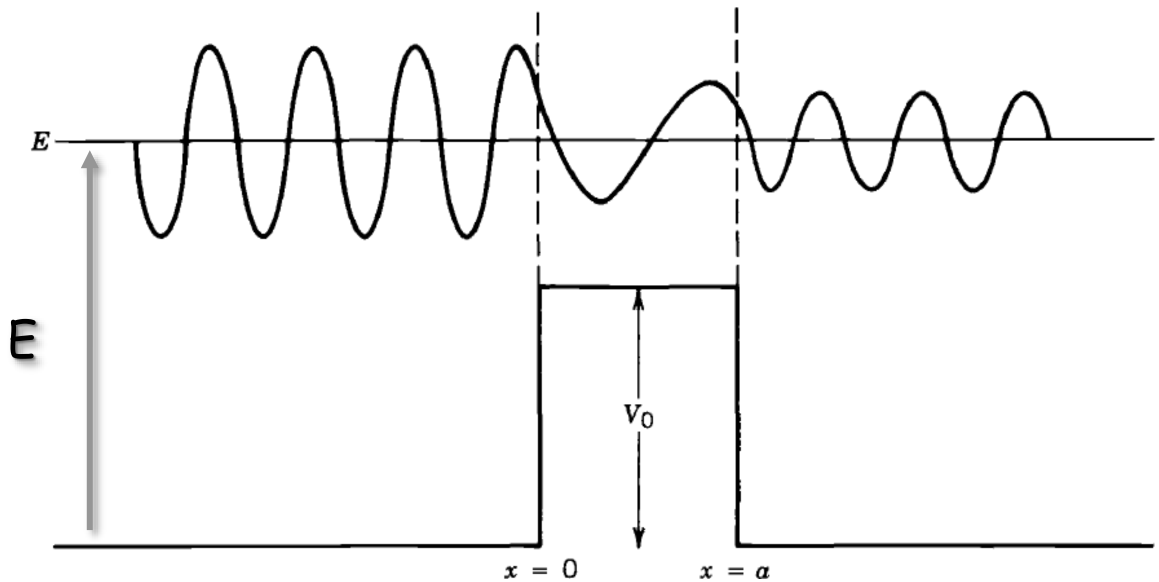
$$Ce^{+ik_2a} + De^{-ik_2a} = Fe^{+ik_3a}$$

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

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 :

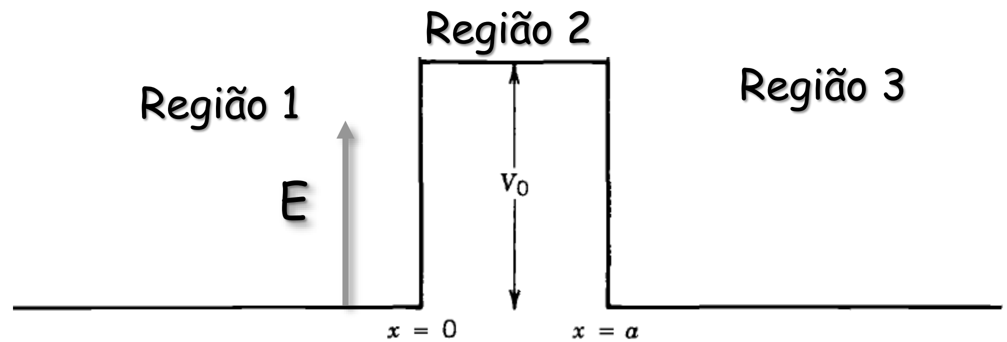
$$T = |F|^2/|A|^2$$

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



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

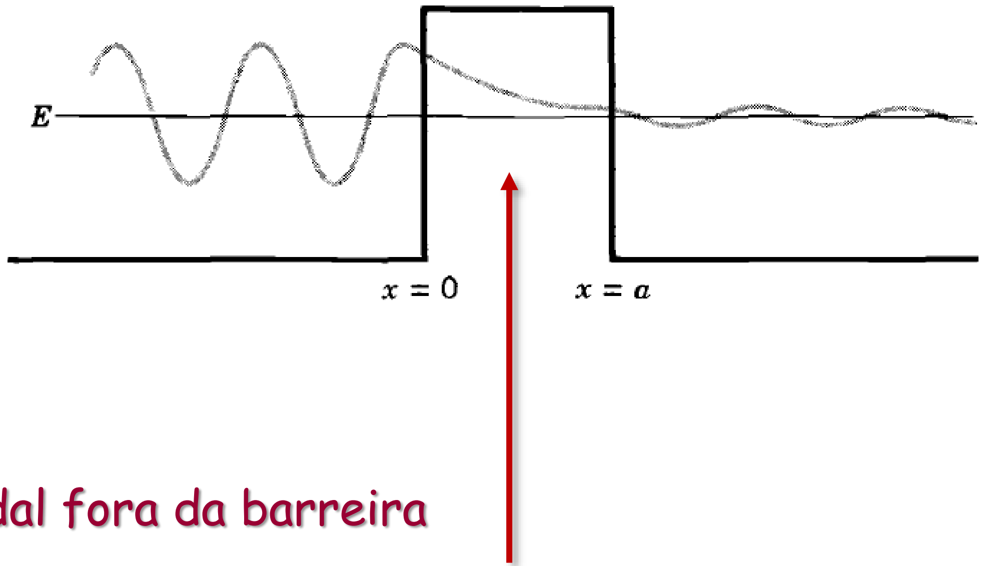
$$\Psi_2(x) = Ce^{+k_2 x} + De^{-k_2 x} \qquad \text{com:} \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

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

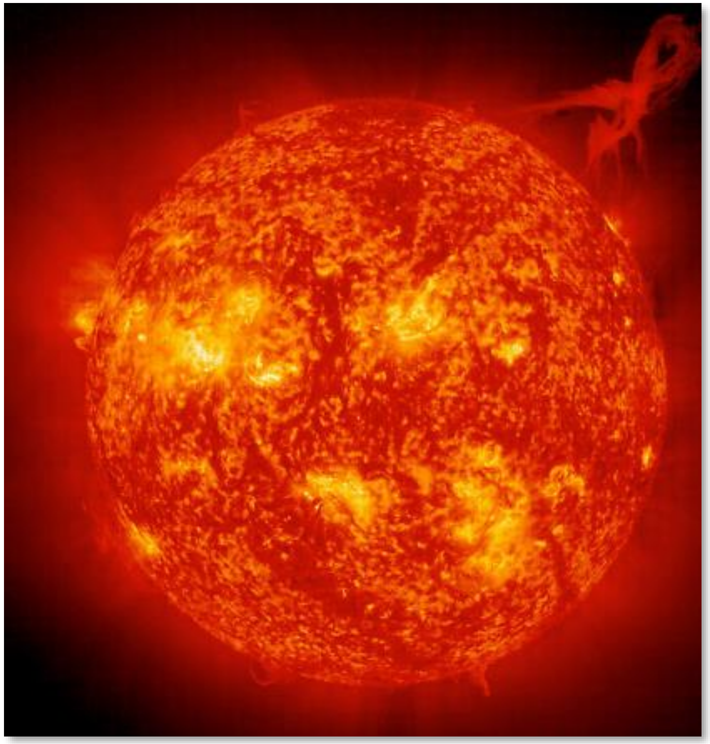
Coeficiente de transmissão

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



- 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 $1{,}5 \times 10^7$ K

Principal processo é transformar 4 prótons em Hélio e gerar energia

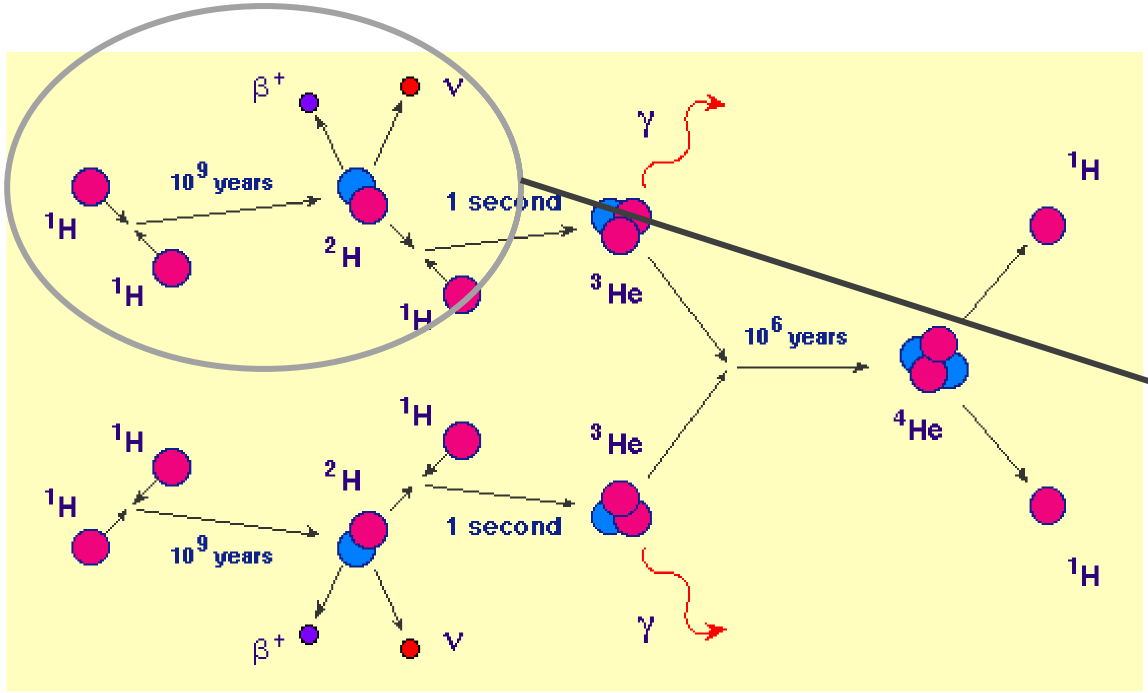
$$4 \times H^1 \rightarrow He^4 + fotons + neutrinos$$

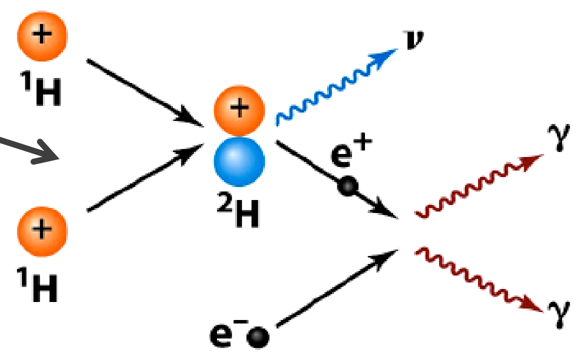
Massa total de 4 prótons = $4 \times 1.0081 = 4.0324 uma$ Massa de um Hélio = $4.0039 uma$

Diferença de massa = $0.0285 uma = 4.7 \times 10^{-26} g$

$$\Delta E = \Delta mc^2 = 4.3 \times 10^{-5} erg = 27 MeV$$

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





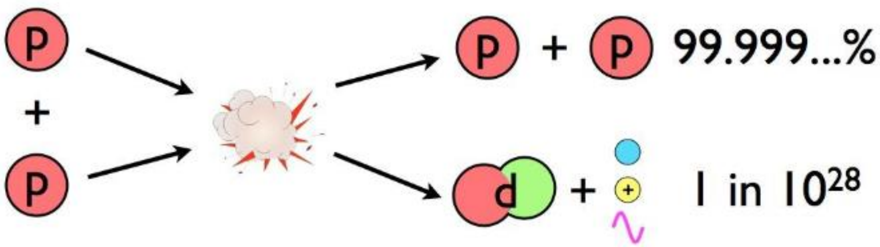
A conversão de prótons em hélio se dá por ciclos (pp-I pp-II pp-III)

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

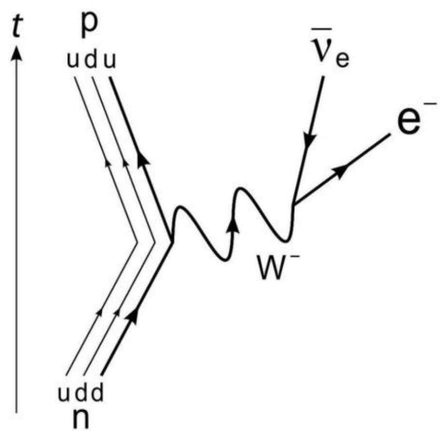
Energia dos prótons dentro do Sol é

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

Barreira Coulombiana para p+p $V_B = 0{,}600$ MeV



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



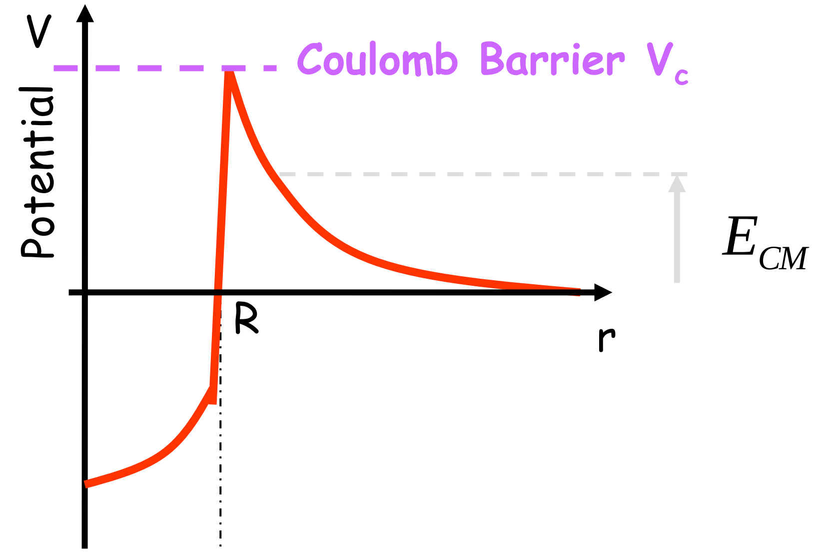
$$V_c\,[\mathrm{MeV}] = 1.44\,\frac{Z_1 Z_2}{R\,[\mathrm{fm}]}$$

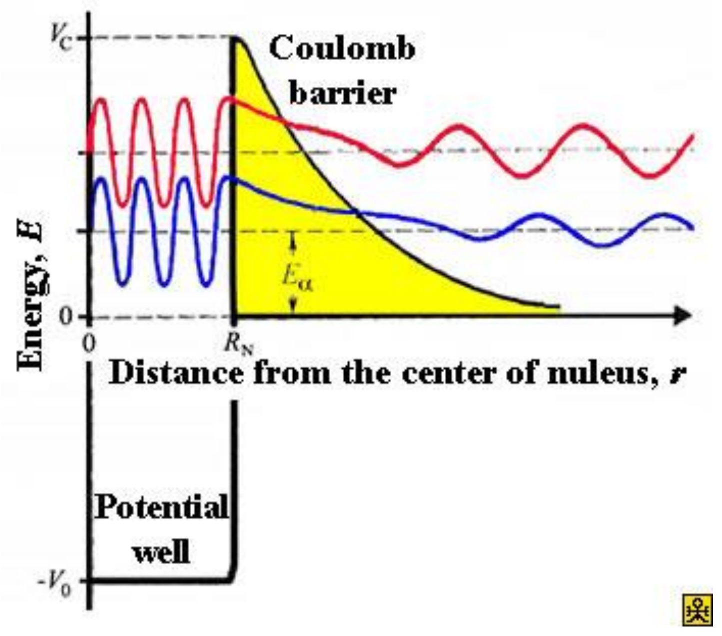
$$V_c\,[\mathrm{MeV}] \approx 1.2\,\frac{Z_1 Z_2}{(A_1^{1/3} + A_2^{1/3})}$$

Penetrabilidade

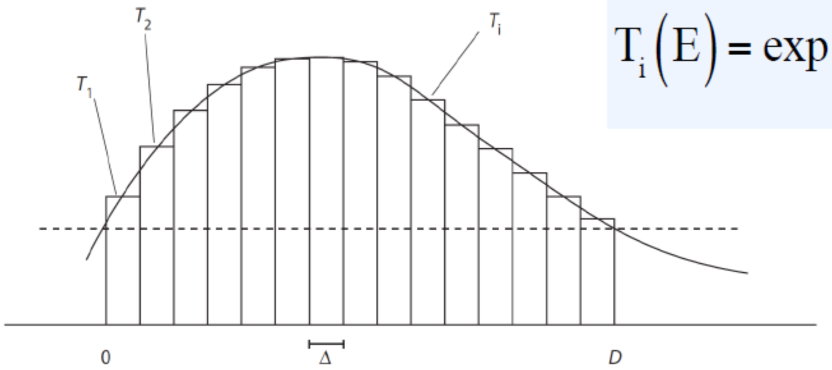
Probabilidade de penetrar a Barreira coulombiana reduz fortemente a seção de choque

Efeito muito importante para partículas carregada (captura de prótons)





Tunneling through a generic barrier



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

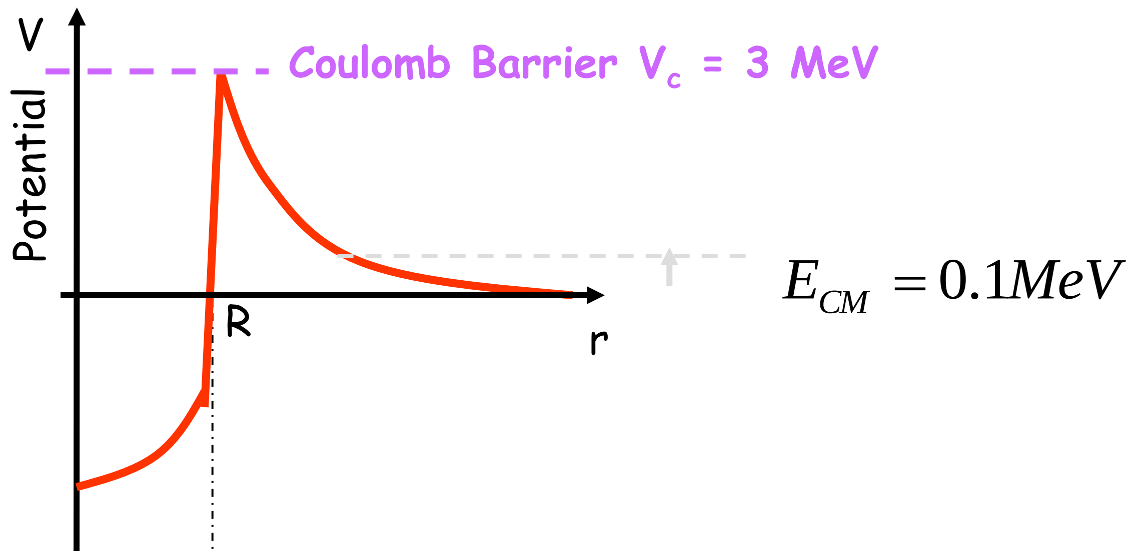
$$T(E) = \prod_i T_i(E) \tag{9.44}$$

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**.

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

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

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



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.