Física IV

2020

Professor: Valdir Guimarães

E-mail: valdir.guimaraes@usp.br

Aula-18: Eq. Schrodinger Potenciais – Poço - Caixa

❑ Equação de Schrodinger

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

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

Erwin Schrodinger
(1887-1961)

Nobel 1933

Podemos separar a dependência temporal e espacial:

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

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \qquad E = \hbar\omega \rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar}$$

dependência espacial

dependência temporal

Onda estacionária: Estado de energia definida

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

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

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** $\Psi(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx}$

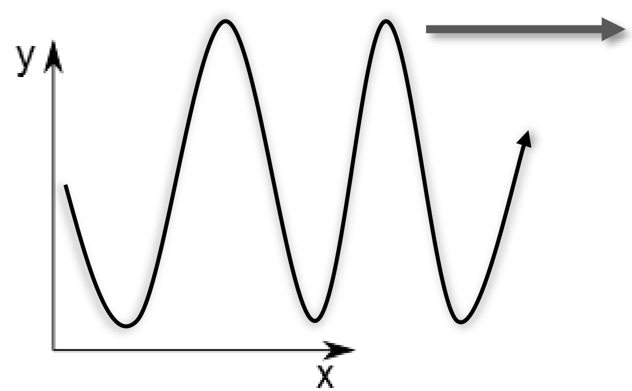
Superposição de duas funções de onda

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

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

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

Direção de propagação



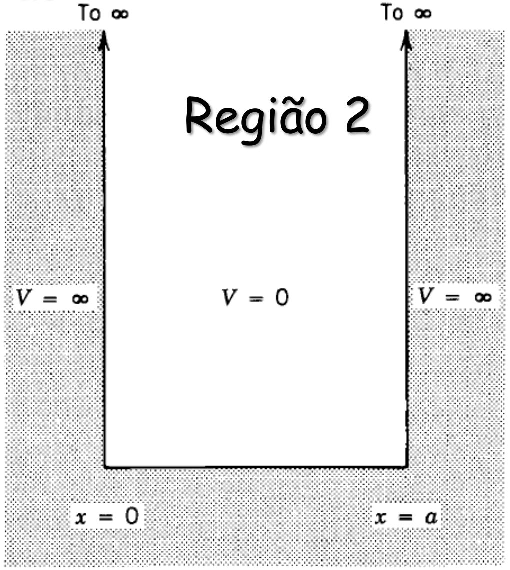
Poço de potencial infinito

Poço de potencial infinito:

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

Região 1

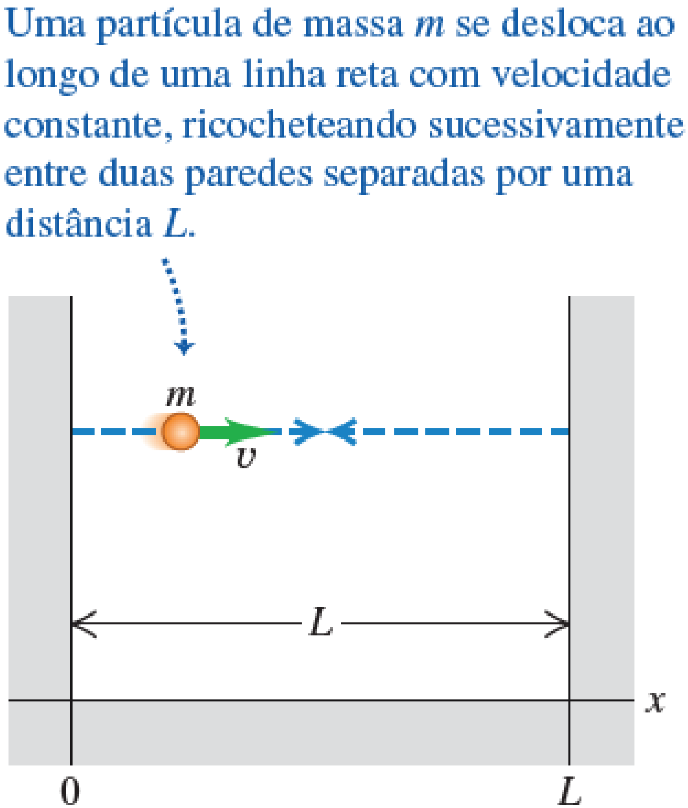
Região 3



- 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 muita vezes chamada de partícula confinada em uma caixa.
- No entanto, uma caixa corresponderia a uma partícula presa nas 3 dimensões.
- Vamos analisar primeiro em uma dimensão:

Figura 40.8 Visão newtoniana de uma partícula em uma caixa.



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 $0 \leq x \leq L$
- A probabilidade de encontrar a partícula fora do poço é nula, portanto a função probabilidade $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$ 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

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

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:

$$\Psi_2(x) = A(\cos kx + i\sin kx) + B[\cos(-kx) + i\sin(-kx)]$$

$$\Psi_2(x) = A(\cos kx + i\sin kx) + B(\cos kx - i\sin kx)$$

$$\Psi_2(x) = (A + B)\cos kx + i(A - B)\sin kx$$

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 $\quad \Psi_2(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad (A + B) = 0 \quad \Rightarrow \quad A = -B$

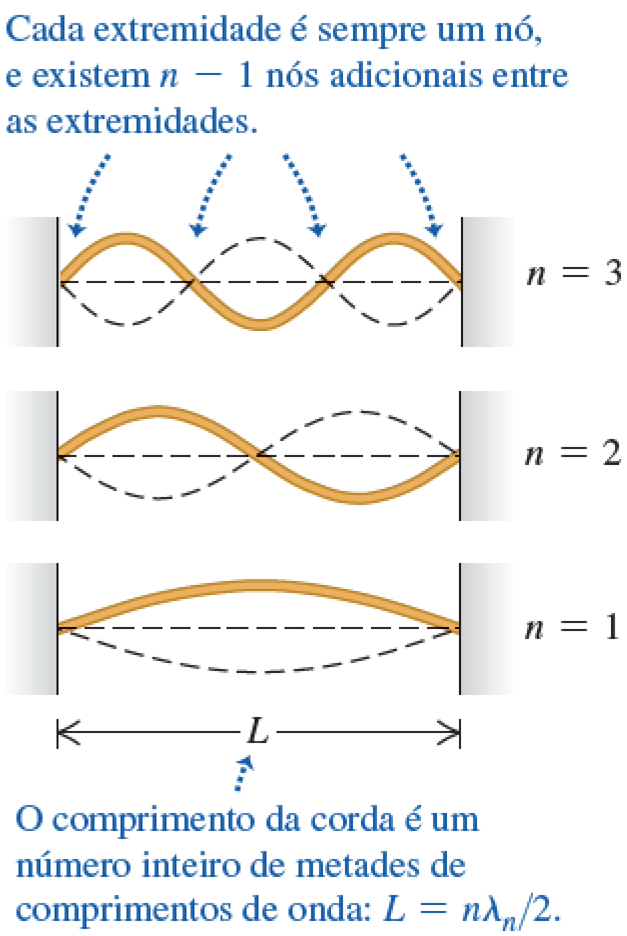
$$\Psi_2(x) = 2iB\sin kx = C\sin kx$$

Em x=a $\quad \Psi_2(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Psi_2(x) = C\sin ka = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = n\pi$

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

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.



Aplicando as condições de contorno em x=a

$\sin ka = 0$, or

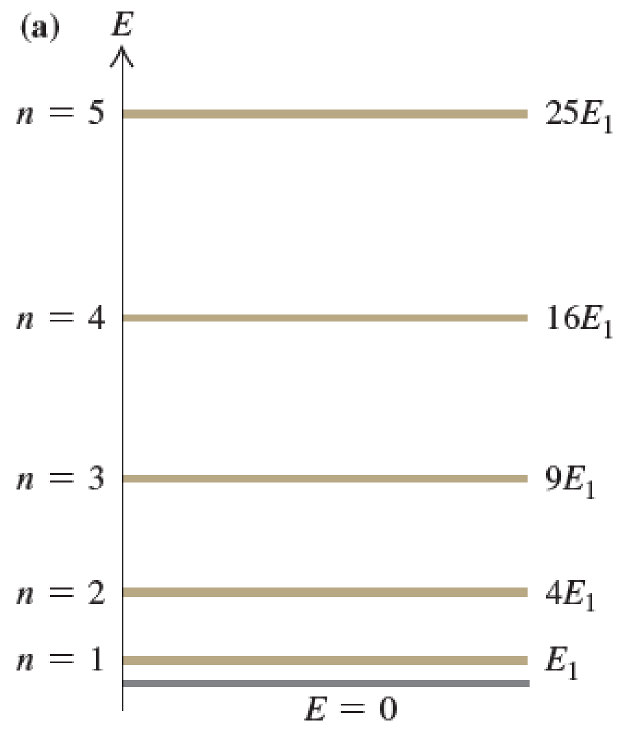
$$ka = n\pi \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

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

- 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.

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

- O potencial infinito é uma aproximação ! ! !

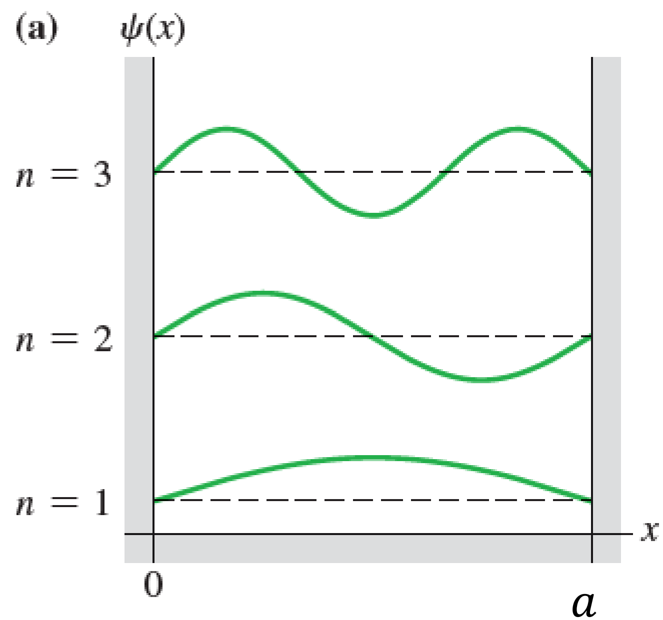


Função de onda:

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

$$ka = n\pi$$

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



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

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

$$C^2\frac{a}{2} = 1$$

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

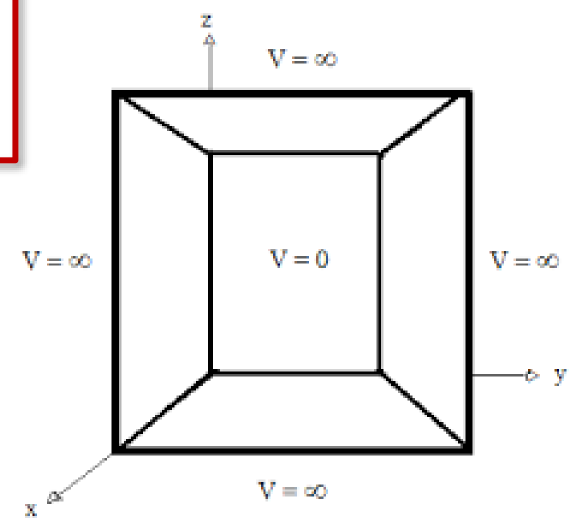
$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}}$$

Caixa de Potencial

Potencial caixa (3 dimensões):

$$V(x, y, z) = 0 \qquad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq a, \quad 0 \leq z \leq a$$

$$= \infty \qquad x < 0, \quad x > a, \quad y < 0, \quad y > a, \quad z < 0, \quad z > a$$



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

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

Solução para uma dimensão

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Solução para 3 dimensões (cartesiana)

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)^3} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{a} \sin \frac{n_z \pi z}{a}$$

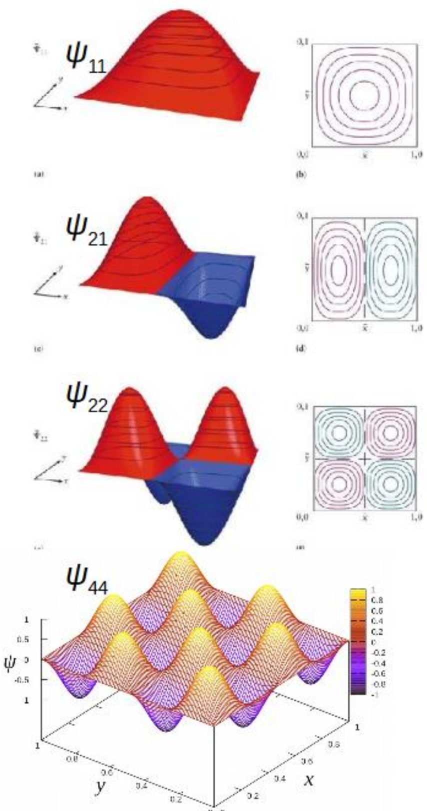
Energia é quantizada

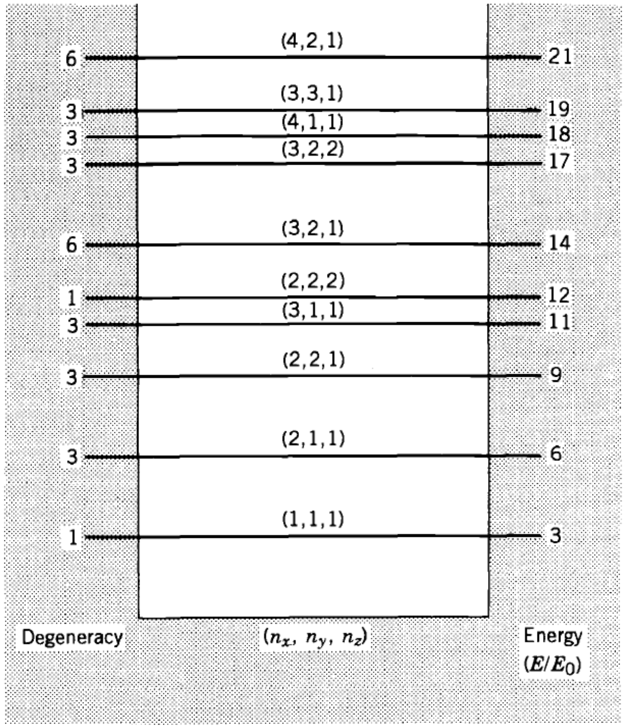
$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

Podemos ter degenerecência:
Combinação de 3 números que fornecem a mesma 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)



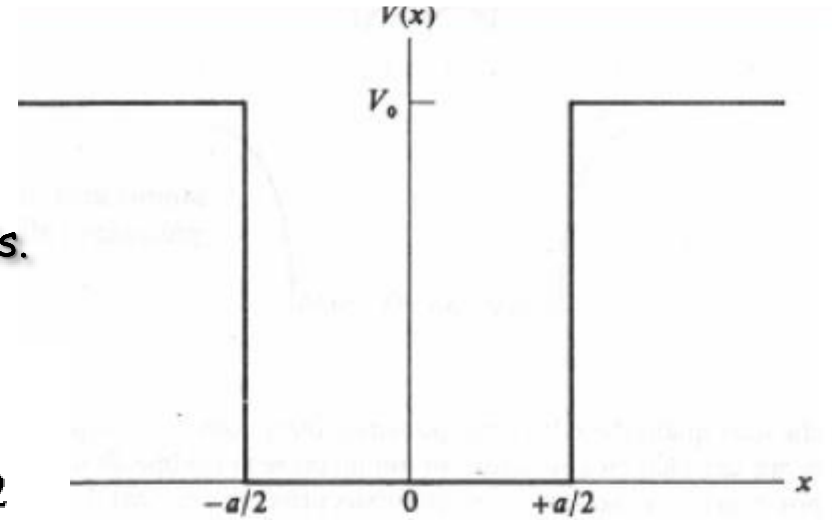


Poço de potencial finito

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

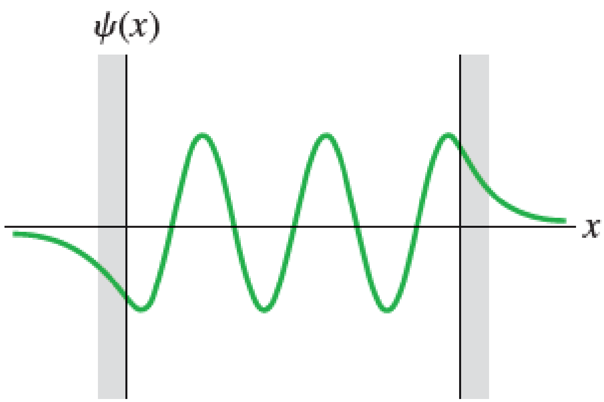
$$\psi_1 = A e^{k_1 x} + B e^{-k_1 x} \qquad x < -a/2$$

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

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

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

- Região 1 e 3 a função de onda deve ser uma exponencial decrescente para que seja finita.
- Portanto B=0 e F=0
- Função de onda na região 2 deve ser oscilatória.



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

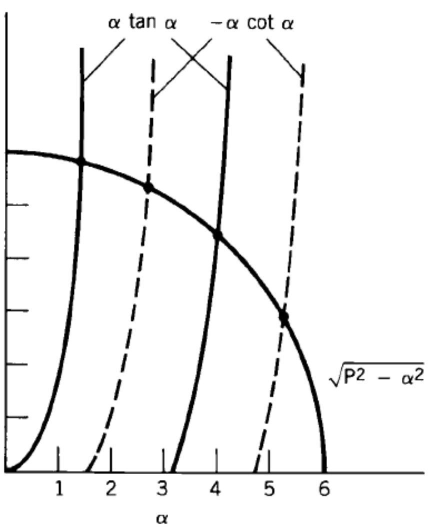
$$k_2 \tan \frac{k_2 a}{2} = k_1$$

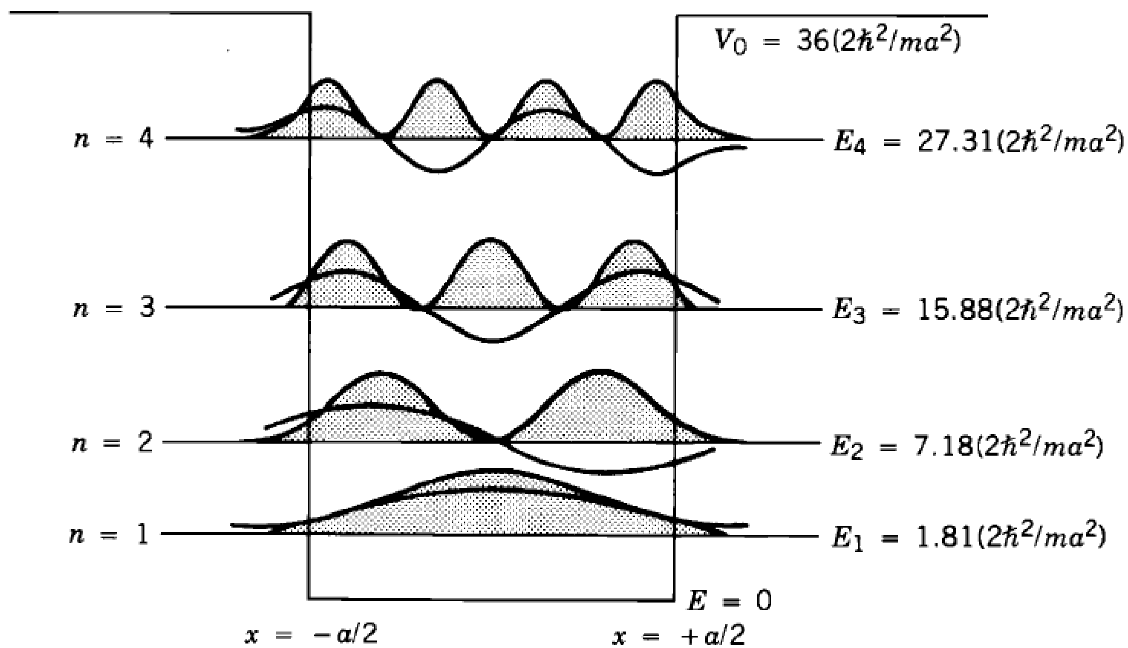
$$-k_2 \cot \frac{k_2 a}{2} = k_1$$

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

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

Solução analítica muito difícil mas podemos resolver numericamente ou por gráfico





Isso gera a quantização da energia

Diferenças importantes entre potencial finito e infinito:

Mostre que 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 e o que acontece no limite de $V_0 \rightarrow \infty$?

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x) + V_0(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

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

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = +\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\Psi(x)$$

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

$$k^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

que acontece no limite de $V_0 \rightarrow \infty$ para as funções de onda fora do poço

$$\Psi(x) = Ce^{+kx} + De^{-kx} \qquad k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

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

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

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

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

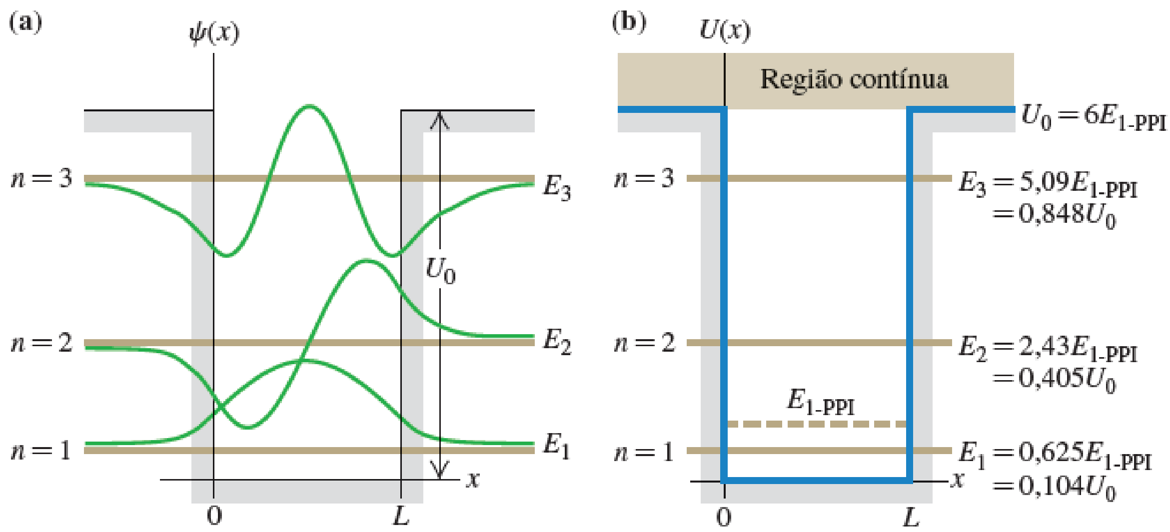
As energias dos estados ligados de um poço infinito é dada por:

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

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

A energia mais baixa é dada para n=1 $\quad E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$

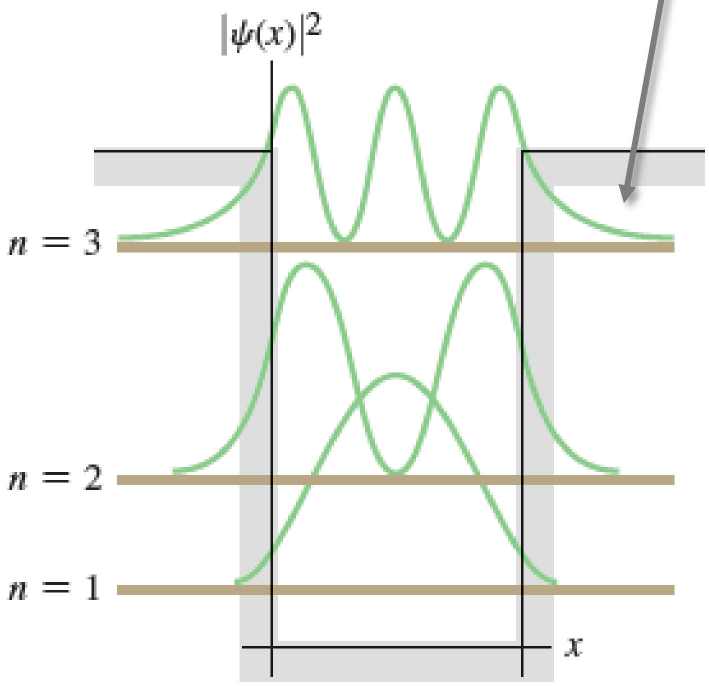
Quando o poço não é muito profundo podemos ter alguns estados ligados e para energia muito grande os estados não são mais ligados.



um poço finito com profundidade 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

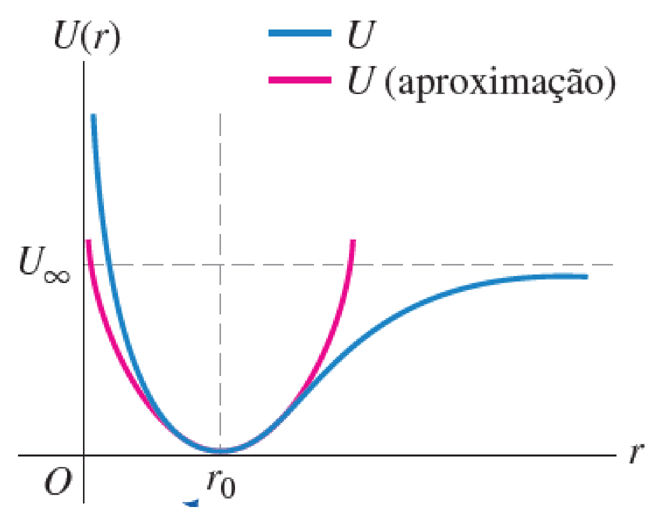
Probabilidade não nula de encontrar a partícula



Poço de oscilador harmônico

Poço de potencial oscilador harmônico:

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



Potencial bem comportado com um mínimo em x=a pode ser expandido em série de Taylor.

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

- 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

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

Precisamos então resolver a equação de Schrodinger em uma dimensão

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right] + V(x,y,z,t)\varphi$$

Sendo que:

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

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

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

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

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

para x→∞ a solução não deve divergir uma possível solução seria do tipo: $\varphi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}h(\xi)$

usando essa função teremos: $$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (\lambda-1)h(\xi) = 0$$

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

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

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

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 principio 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 $H_1(x) = 2x$

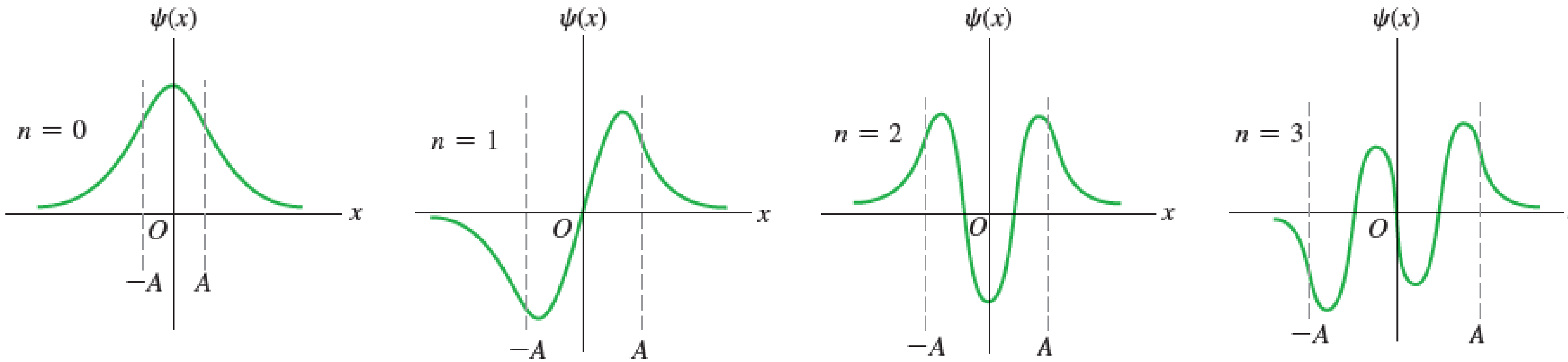
$n = 2$ we have $H_2(x) = 4x^2 - 2.$

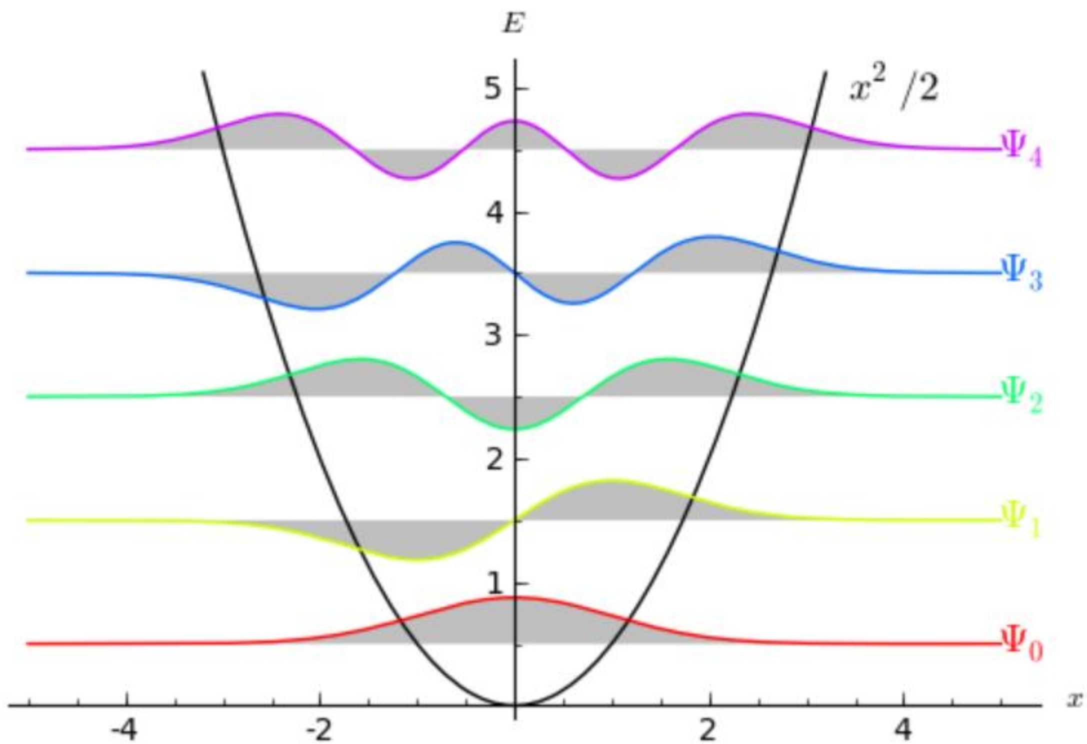
Solução para função de onda:

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

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

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


ψ(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
x
-4
-2
2
4