Notas de Aula - Física 4 - Carlos E. J. Carneiro

Baseadas no livro Física 3/4 R. A. Serway - 3ª edição

41.6&41.7 A Equação de Schrödinger

Schrödinger propôs sua equação em 1927, como uma alternativa à mecânica matricial desenvolvida por Heisenberg. As duas formulações são equivalentes, mas a abordagens através da função de onda é mais intuitiva.

Comecemos com a equação de onda em 1 dimensão:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2},$$

onde v é a velocidade da onda e $\Psi = \Psi(x,t)$.

Estudaremos os casos em que a energia é constante. Assim, $\overset{\checkmark \text{Freq. de Broglie}}{f = E/h}$ e $\omega = 2\pi f = E/\hbar$ também são constantes. A expressão para uma onda plana:

$$\boxed{\Psi = A\, e^{ikx - i\omega t},}$$

é muito simples pois supõe que, além da energia, o momento $p = \hbar k$ é constante. Tentaremos uma solução do tipo

$$\Psi = \psi(x)\, e^{-i\omega t}.$$

Substituindo na equação de onda obtemos

$$e^{-i\omega t}\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{\omega^2}{v^2} e^{-i\omega t}\psi$$

(96) $$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v^2}\psi = 0$$

$$\frac{\omega}{v} = \frac{2\pi}{Tv} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{\frac{h}{p}} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\psi = 0$$

Vamos, agora, introduzir as características de partícula.

$$E = \frac{p^2}{2m} + U \implies p^2 = 2m(E-U)$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi}$$

Eq. de Schrödinger <u>independente</u> do tempo

A equação de Schrödinger dependente do tempo pode ser obtida colocando $E = \hbar\omega$ e multiplicando por $e^{-i\omega t}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2(e^{-i\omega t}\psi)}{dx^2} + U e^{-i\omega t}\psi = \hbar\omega e^{-i\omega t}\psi$$

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

Eq. de Schrödinger dependente do tempo

$$\omega e^{-i\omega t}\psi = i\frac{\partial(e^{-i\omega t}\psi)}{\partial t}$$

Em mais de uma dimensão a equação de Schrödinger se escreve como

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

<u>Observações</u>

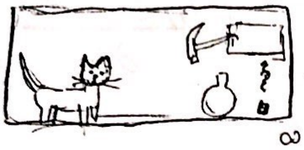
Como U geralmente depende de x, precisamos resolver a eq. de Schrödinger em diferentes regiões do espaço. As soluções em diferentes regiões devem se acoplar suavemente nas fronteiras. Ou seja, (1) ψ

deve ser contínua. (2) Além disto, para que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$ é necessário que $\psi(x) \to 0$ qdo $x \to \pm\infty$. Finalmente, $\psi(x)$ deve ser unívoca e $d\psi/dx$ também deve ser contínua para valores finitos de $U(x)$.

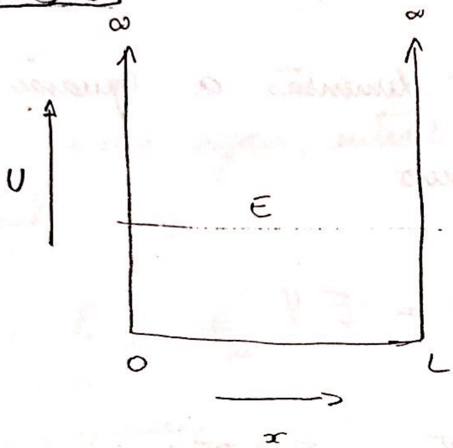
Falar sobre o gato de Schrödinger

$\psi =$ 

superposição de estados



Partícula numa caixa



$U(x) = 0$ p/ $0 < x < L$

A equação de Schrödinger neste caso é dada por

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\overbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}^{\equiv k^2}\psi = -k^2\psi \qquad \text{p/ } 0 < x < L$$

$$\Longrightarrow \psi = A \operatorname{sen} kx + B \cos kx.$$

Como as paredes são infinitamente altas, $\psi(x)$ deve se anular nas paredes e na região exterior.

ψ deve ser contínua ($\frac{d\psi}{dx}$ só é contínua onde o potencial é finito)

$$\Rightarrow \begin{cases} \psi(0) = A \operatorname{sen} 0 \; +B = 0 & \Rightarrow B = 0 \quad (\text{~~automaticamente~~ satisfeita}) \\ \psi(L) = A \operatorname{sen} kL = 0 & \Rightarrow kL = n\pi \end{cases}$$

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

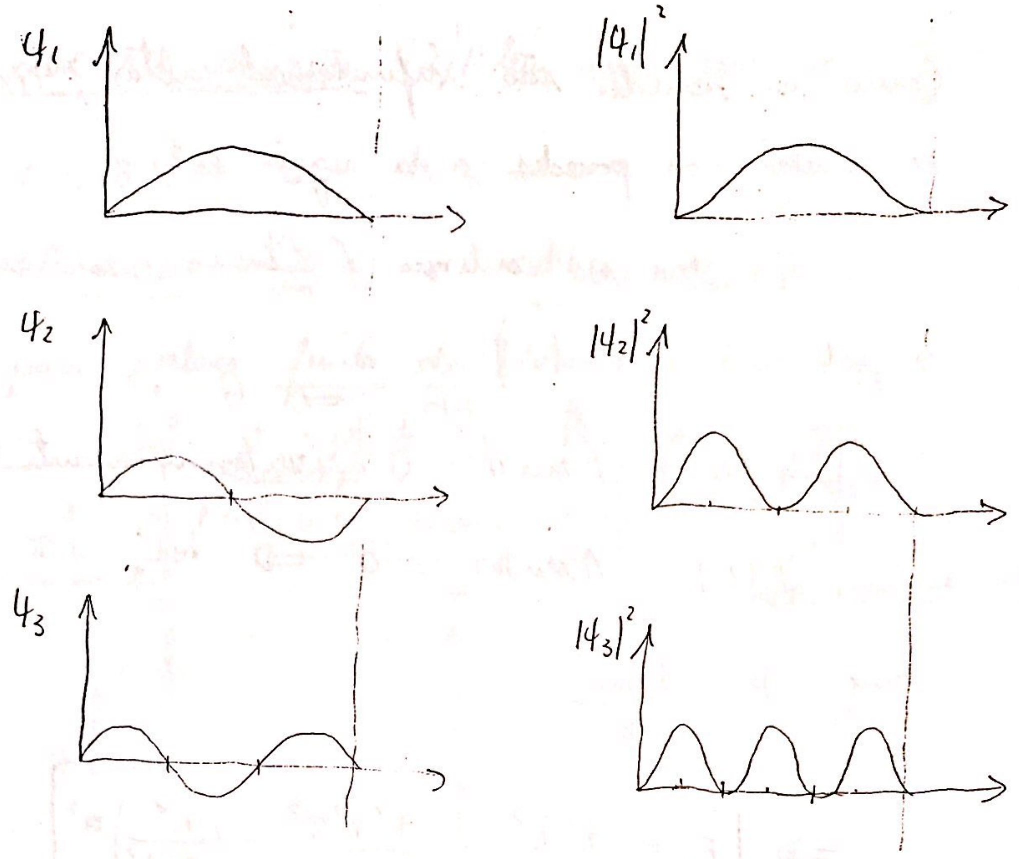
$$\Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) n^2} \; ; \; n = 1, 2, 3, \ldots$$

Ou seja os níveis de energia são discretos e não são regularmente espaçados $E_n = n^2 E_1 \Rightarrow E_2 = 4E_1$, $E_3 = 9E_1$.
O estado de menor energia, E_1, maior que zero, neste caso, é a energia do ponto zero. $E = 0$ não existe neste sistema.

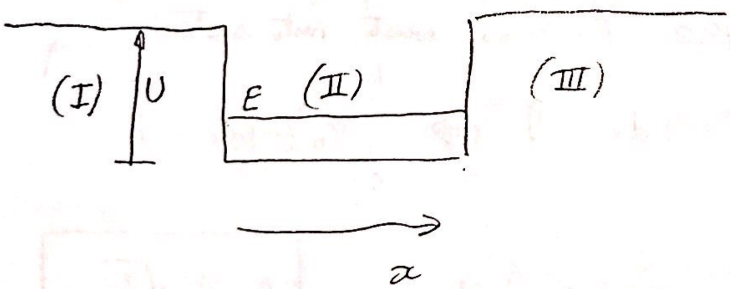
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(x)\, dx = 1 \iff \int_0^L \psi_n^2(x)\, dx = 1$$

$$\int_0^L A^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1 \Rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$



Partícula num poço de altura finita



$E < U$

Nas regiões (I) e (III) a ES se escreve como

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

$\Rightarrow \psi = Ae^{Cx} + Be^{-Cx}$, como ψ deve ser finita

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{Cx} \Rightarrow \frac{d\psi_I}{dx} = ACe^{Cx} \\ \psi_{III}(x) = Be^{-Cx} \Rightarrow \frac{d\psi_{III}}{dx} = -BCe^{-Cx} \end{cases}$$

Na região II a ES é dada por

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\,\psi_{II} = -k^2\psi$$

$$\boxed{\psi_{II}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}} \Rightarrow \frac{d\psi}{dx} = ikFe^{ikx} - ikGe^{-ikx}$$

Devemos ter

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A = F+G$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \Rightarrow AC = ik(F-G)$$

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \Rightarrow Fe^{ikL} + Ge^{-ikL} = Be^{-CL}$$

$$\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=L} = \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=L} \Rightarrow ikFe^{ikL} - ikGe^{-ikL} = -BCe^{-CL}$$

(102)

$$\begin{cases} F + G = A \\ F - G = \dfrac{c}{ik} A \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad F = \frac{A}{2}\left(1 + \frac{c}{ik}\right) \qquad (\mathrm{I})$$

$$G = \frac{A}{2}\left(1 - \frac{c}{ik}\right) \qquad (\mathrm{II})$$

$$\begin{cases} F e^{ikL} + G e^{-ikL} = B e^{-cL} \\ F e^{ikL} - G e^{-ikL} = -\dfrac{Bc}{ik} e^{-cL} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad F e^{ikL} = \frac{B}{2} e^{-cL}\left(1 - \frac{c}{ik}\right) \Rightarrow F = \frac{B}{2} e^{-(c+ik)L}\left(1 - \frac{c}{ik}\right) \quad (\mathrm{III})$$

$$G e^{-ikL} = \frac{B}{2} e^{-cL}\left(1 + \frac{c}{ik}\right) \Rightarrow G = \frac{B}{2} e^{-(c-ik)L}\left(1 + \frac{c}{ik}\right) \quad (\mathrm{IV})$$

(I) e (III) $$\frac{A}{2}\left(1 + \frac{c}{ik}\right) = \frac{B}{2} e^{-(c+ik)L}\left(1 - \frac{c}{ik}\right) \qquad (\mathrm{V})$$

(II) e (IV) $$\frac{A}{2}\left(1 - \frac{c}{ik}\right) = \frac{B}{2} e^{-(c-ik)L}\left(1 + \frac{c}{ik}\right) \qquad (\mathrm{VI})$$

$(\mathrm{V}) \div (\mathrm{VI})$

$$\frac{ik + c}{ik - c} = e^{-2ikL} \frac{(ik - c)}{ik + c}$$

$$ik + c = \sqrt{k^2+c^2}\, e^{i\theta}$$

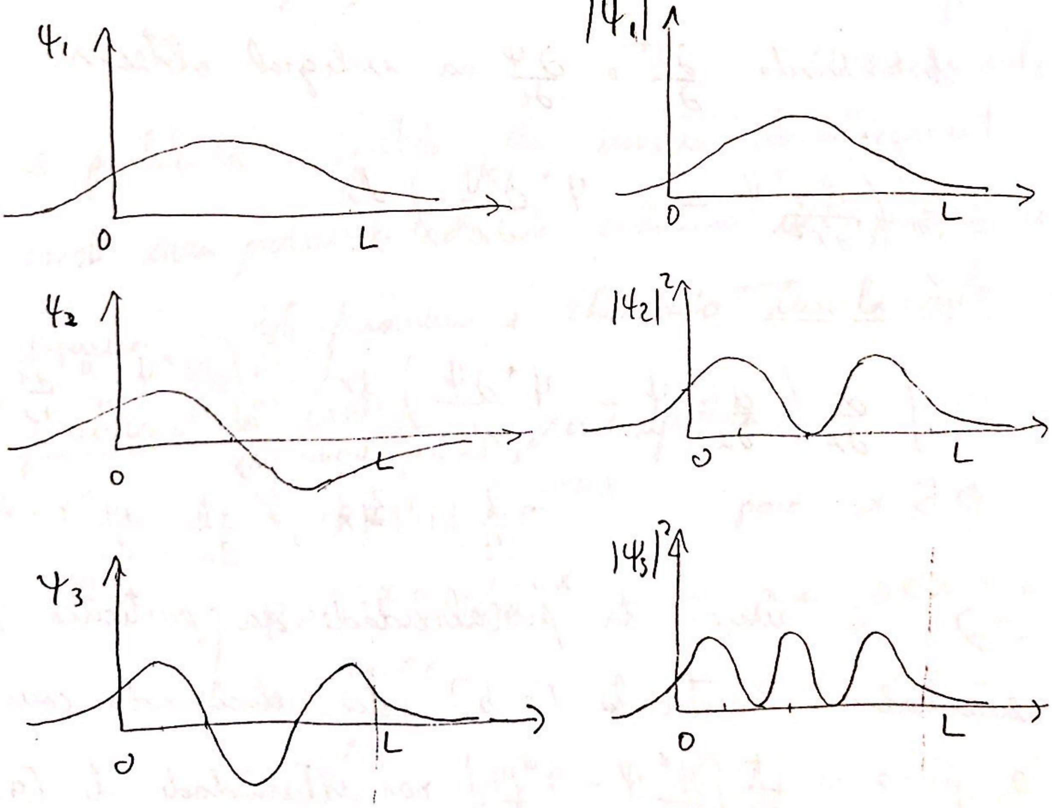
$$-ik + c = \sqrt{k^2+c^2}\, e^{-i\theta}$$

$$\theta = \tan^{-1}\left(\frac{k}{c}\right) = \tan^{-1}\left(\sqrt{\frac{E}{U-E}}\right)$$

$$e^{-2ikL - i4\theta} = 1 \Rightarrow 2kL + 4\theta = 2\pi n$$

$$\boxed{kL + 2\tan^{-1}\theta = n\pi} \Rightarrow E \text{ quantizado}$$

Para $U \to \infty$, $\theta \to 0$ e recuperamos o resultado do poço de potencial infinito.



41.9 Tunelamento através de uma barreira

$$I = \frac{d}{dt}\int_a^b \psi^* \psi \, dx = \int_a^b \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi)\, dx$$

$$= \int_a^b \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + U\psi^* = -i\hbar\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$$

Substituindo $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ e $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ na integral obtemos:

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int_a^b \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}\psi - \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) dx$$

$$= \frac{-i\hbar}{2m}\int_a^b \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx = \frac{-i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}\right]_a^b$$

$$-\frac{d}{dt}\int |\psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}\right]\Big|_a^b$$

$\Rightarrow$ A variação da probabilidade da partícula ser encontrada no intervalo $[a, b]$ está relacionado com o fluxo de $\frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}\right]$ nas extremidades de $[a, b]$

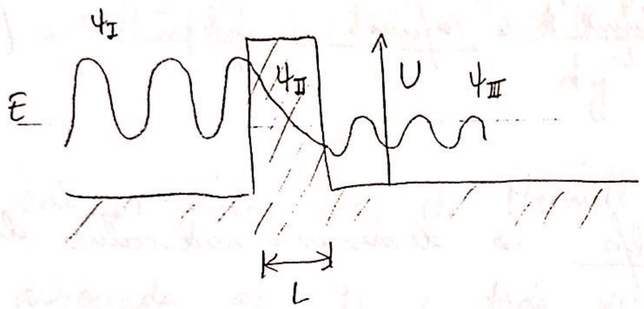
$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi - \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}\right]$$

é chamada de densidade de corrente de probabilidade.

(No caso 3-D $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left[(\vec{\nabla}\psi^*)\psi - \psi^*(\vec{\nabla}\psi)\right]$)

$$-\frac{d}{dt}\int |\psi|^2 dV = \int(\vec{\nabla}\cdot\vec{j})\,dV = \int \vec{j}\cdot d\vec{S}$$

Considere uma partícula que incide sobre uma barreira de potencial de altura U e largura L.



Classicamente, a partícula é refletida pela barreira. Quanticamente, existe uma probabilidade da partícula ultrapassar a barreira. Este fenômeno é chamado tunelamento ou penetração da barreira.

coef. colocado igual a 1 — onda refletida

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx} & \text{para } x < 0 \\ Be^{+Cx} + B'e^{-Cx} & \text{para } 0 < x < L \\ De^{+ikx} & \text{para } x > L \end{cases}$$

onda transmitida

O coeficiente de transmissão (*) é definido como a densidade de corrente de probabilidade associada à onda transmitida (De^{+ikx}) pela da onda incidente (e^{-ikx})

$$T = |D|^2 \simeq G e^{-2CL} \quad , \quad \begin{cases} G = 16\frac{E}{U}\left(1 - \frac{E}{U}\right) \\ C = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar} \end{cases}$$

p/ T muito pequeno

~~(Analogamente, define-se o coeficiente de reflexão $R = |A|^2$)~~

Aplicações

Decaimento alfa → decaimento radioativo de átomos

Microscopia de varredura por tunelamento

Oscilador harmônico simples

Neste caso $U = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ e a ES é dada por

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi$$

(*) Serway: coeficiente de transmissão → mede a probabilidade da partícula atravessar a barreira

Pode-se mostrar que as soluções desta equação são dadas por

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

onde os

$$H_n(y) = (-1)^n e^{+y^2} \frac{d^n(e^{-y^2})}{dy^n}$$

$H_0(y) = 1$

$H_1(y) = -e^{y^2}(-2y)e^{-y^2} = 2y$

são os polinômios de Hermite. A energia associada aos ψ_n é dada por

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Note que o estado fundamental tem energia

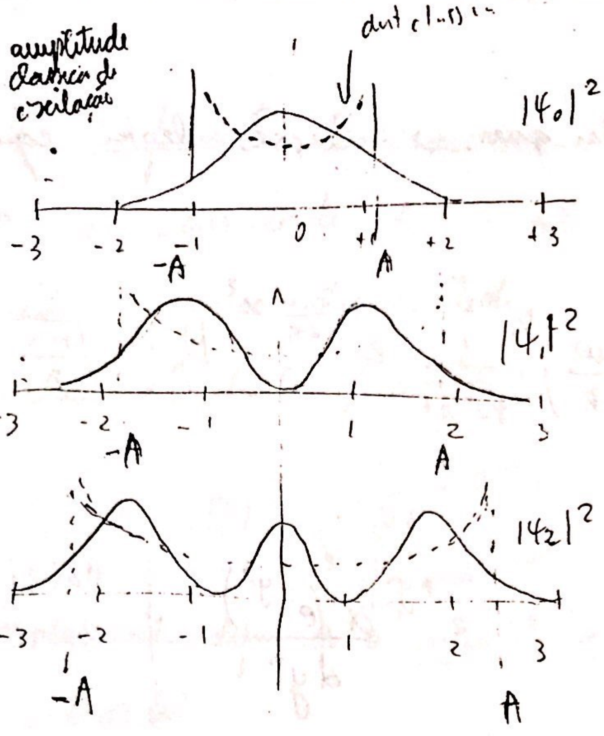
$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$$

e sua auto-função é dada por

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

observe também que os níveis são regularmente espaçados por $\hbar\omega$, como previu Planck.

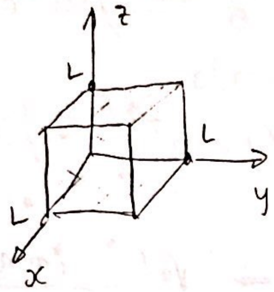
108 $A \Rightarrow$ amplitude clássica de oscilação



A distribuição clássica é em cada pto proporcional ao inverso da velocidade naquele ponto.

Equação de Schrödinger em 3D

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right]+U\psi=E\psi$$



Se a partícula está em uma caixa de lado L, c/

$$U(x)=\begin{cases}0 & \text{p/ } 0<x<L \text{ e } 0<y<L \text{ e } 0<z<L \\ \infty & \text{fora da caixa}\end{cases}$$

$\psi = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$ (método de separação de variáveis

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[YZ\frac{d^2X}{dx^2}+XZ\frac{d^2Y}{dy^2}+XY\frac{d^2Z}{dz^2}\right]=EXYZ$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}+\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}$$

Isto só é possível se

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}=a\,,\quad \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}=b\,,\quad \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}=c$$

$$a+b+c=-\frac{2mE}{\hbar^2}$$

ctes

110

$$X = A e^{\sqrt{a'}x} + A' e^{-\sqrt{a'}x}$$

$$X(0) = 0 \Rightarrow A' = -A$$

$$X = A\left(e^{\sqrt{a'}x} - e^{-\sqrt{a'}x}\right)$$

$$X(L) = 0 \Rightarrow A\left(e^{\sqrt{a'}L} - e^{-\sqrt{a'}L}\right) = 0$$

$$A e^{\sqrt{a'}L}\left(1 - e^{-2\sqrt{a'}L}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \cancel{2}\sqrt{a'}L = i\cancel{2}\pi n_x \Rightarrow \sqrt{a'} = \frac{i\pi n_x}{L}$$

$$X(x) = \breve{A}\ \mathrm{sen}\left(\frac{\pi n_x x}{L}\right)$$

Analogamente, $Y(y) = \tilde{B}\ \mathrm{sen}\left(\frac{n_y \pi x}{L}\right)$,

$$Z(z) = \tilde{C}\ \mathrm{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

$$\boxed{\psi(x,y,z) = A\ \mathrm{sen}\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \mathrm{sen}\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \mathrm{sen}\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)}$$

$$a + b + c = -\frac{n_x^2 \pi^2}{L^2} - \frac{n_y^2 \pi^2}{L^2} - \frac{n_z^2 \pi^2}{L^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)}{2mL^2}}$$

Digitalizada com CamScanner