* Partícula em uma caixa :

18ª AULA

(1)

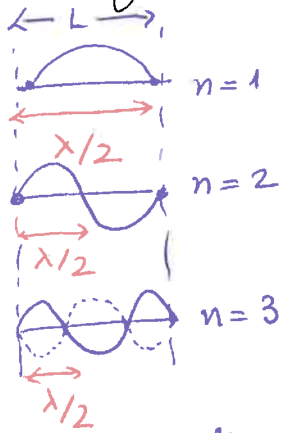
- Situação clássica de ondas estacionárias = análoga ao problema de partícula numa caixa.

Corda de comprimento L, presa nas pontas (as ondas estacionárias na corda têm nó nas pontas)

A funcão de onda deve ser nula na fronteira

Ressonância $\Rightarrow$ $L = \dfrac{n\lambda}{2}$

$\lambda = \dfrac{2L}{n}$



* Parte da funcão de onda dependente da posição numa onda estacionária : $y(x) = A\,\text{sen}(kx)$

$\lambda = 2L/n$

onde $k = \dfrac{2\pi}{\lambda} = \dfrac{n\pi}{L}$

$y(x) = A\,\text{sen}\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)$

Satisfaz as condições de contorno :

$$\begin{cases} y = 0 \text{ para } x = 0 \\ y = 0 \text{ para } x = L \end{cases}$$

Figura 1

$|\Psi|^2 = 0$
- $n=1$ nas pontas $x=0$ e $x=L$ e máximo em $L/2$
- $n=2$ em $x = \dfrac{L}{2}$ e pontas
- $n=3$ em $x = \dfrac{L}{3}$ e $\dfrac{2L}{3}$ e pontas.

Por analogia $\Psi(x) = A\,\text{sen}\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)$

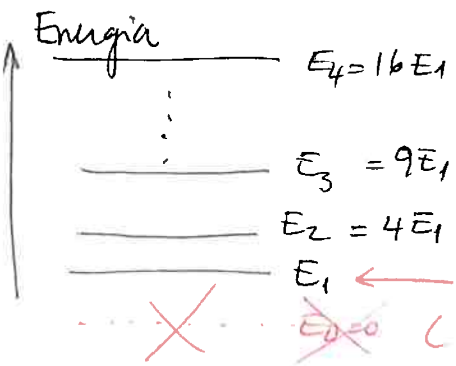
* Momento:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2L/n} = \frac{nh}{2L}$$

$$E_n = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{(nh/2L)^2}{2m} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{h^2}{8mL^2}\, n^2}$$

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

$$\boxed{E_n = E_1 n^2} \quad \text{onde} \quad \underbrace{E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}}_{\text{energia permitida mais baixa.}}$$



E_1 ← energia do ponto 0

(a partícula nunca pode estar em repouso

* Equação de Schrödinger:

A equação foi proposta por Schrödinger em 1927 ⇒ as funções de onda de de Broglie devem obedecê-la ⇒ foi escrita em analogia à equação de ondas progressivas num meio

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

(v é a velocidade da onda e ψ é função de x e t)

Sistema ligado ⇒ a energia permanece constante ⇒ $\psi(x,t)$ ($\boxed{E = cte} = hf \Rightarrow f = cte$) pode ser escrita como um termo que só depende de x e um que só depende de t

$$\psi(x,t) = \psi(x) \cos(\omega t)$$

* Aplicando na equação: $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$ (3)

$$[\cos(\omega t)]\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\omega^2}{v^2}\psi\,[\cos(\omega t)]$$ ou

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\omega^2}{v^2}\psi$$, como $\omega = 2\pi f = \frac{2\pi v}{\lambda}$ e $p = \frac{h}{\lambda}$

Temos $\frac{\omega^2}{v^2} = \left(\frac{2\pi v}{\lambda}\right)^2 \cdot \frac{1}{v^2} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 = \frac{4\pi^2 p^2}{h^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}$ ($\frac{1}{\lambda^2}$)

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

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \Rightarrow$$

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

Equação de Schröedinger independente do tempo

(analogia com sistemas ondulatórios conhecidos)

Se $U(x)$ é conhecido $\Rightarrow$ ψ e E.

Como $U(x)$ varia com a posição $\Rightarrow$ resolve-se a equação em diferentes pontos do espaço $\Rightarrow$ as fronteiras tem que ser suavemente acopladas.

$\psi(x)$ é contínua

$\psi(x) \to 0$ para $x \to \begin{smallmatrix}+\infty \\ -\infty\end{smallmatrix}$ } normalizável

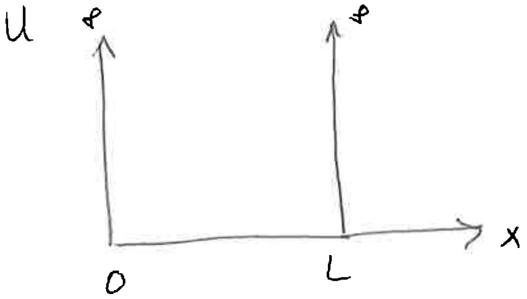
$\psi(x)$ é unívoca

$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{d\psi}{dx}$ é contínua para valores finitos de $U(x)$

Tarefa difícil porque $U(x)$ pode ter uma forma complicada

Sucesso p/ descrever sistemas atômico e nuclear. Fracasso Mec. class

* Partícula numa caixa: (4)



$U = \infty$ para $x=0$ e $x=L$

$U = \text{cte} \Rightarrow U=0$ no interior da caixa.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$

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

Solução: $\psi = A \,\text{sen}(kx)$

onde $\psi = 0$ p/ $x=0$

$\psi = 0$ p $x = L$ $\Rightarrow$ $kL = n\pi$

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)n^2$$

$$\text{Como } \hbar = \frac{h}{2\pi} \Rightarrow \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right) = \frac{h^2\cancel{\pi^2}}{4\cancel{\pi^2}\,2mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)n^2}$$

$$\psi(x) = A\,\text{sen}\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \Rightarrow$$ resultado coincidente com o da seção anterior

Normalização: $$\int_0^L |\psi^2|\,dx = 1 \Rightarrow \int_0^L A^2\,\text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx = 1$$

$$v = -\frac{\cos kx}{k}$$

$$\int_0^L \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx = \int_0^L \underbrace{\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}_{u}\underbrace{\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx}_{dv} = \cancel{\text{sen}\frac{n\pi x}{L}\left(-\frac{\cos \frac{n\pi x}{L}}{k}\right)\Big|_0^L} \to 0\; +$$

$$+ \int_0^L \frac{\cancel{k}}{\cancel{k}}\cos^2\frac{n\pi x}{L}\,dx = \int_0^L \left(1 - \text{sen}^2\frac{n\pi x}{L}\right)dx = \int_0^L dx - \int_0^L \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx$$

$$\Rightarrow 2\int_0^L \text{sen}^2\frac{n\pi x}{L}\,dx = L \Rightarrow A^2\cdot\frac{L}{2} = 1 \Rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{L}}} \Rightarrow$$

PARTÍCULA EM UMA CAIXA