S T Q Q S S D

Aula 20/

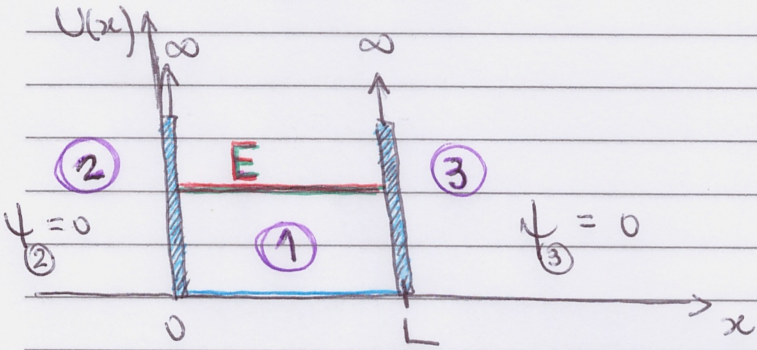
1/

Soluções da Eq. de Schrödinger:

Exemplos em 1 dimensão espacial

(1) Partícula em uma caixa ("altura infinita")

... ou "potencial infinito"



$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & \begin{cases} x > L \\ x < 0 \end{cases} \end{cases}$$

- Dados: A energia da partícula é E, massa m

Iremos procurar por soluções estacionárias

$$\boxed{\Psi(x,t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \cdot \psi(x)}$$

tais que $\psi(x)$ satisfaz à Eq. Schrö. independente do tempo:

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

- Dada a CI: a partícula inicialmente encontra-se dentro da "caixa".

Dentro da caixa : $U(x) = 0$

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

com condições de contorno (C.C.)

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

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\,\psi}$$

(Em ①)

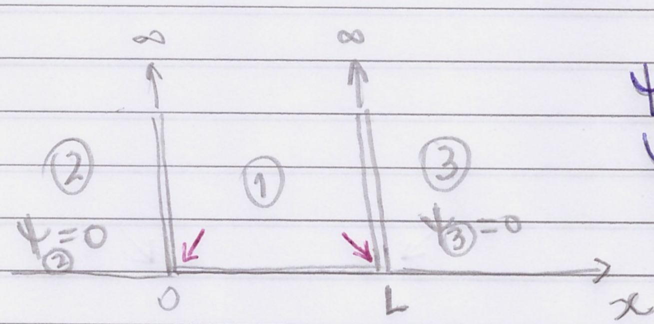
onde definimos $\boxed{k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}}$

CONDIÇÕES DE CONTORNO

nas paredes da caixa : $\psi_{①}(0) = \psi_{①}(L) = 0$ (a)

CONTINUIDADE DA FUNÇÃO $\psi(x)$:

$\psi_{②}(x) = 0$ $\qquad$ $\psi_{③}(x) = 0$ $\qquad$ (b)



$\psi_{①}(x) \equiv \psi(x) \quad 0 \leq x \leq L$

$\psi_{②}(x) = \psi(x) \quad x < 0$

$\psi_{③}(x) = \psi(x) \quad x > L$

Solução geral de $\frac{d^2\psi_{①}}{dx^2} = -k^2 \psi_{①}$:

$$\psi_{①}(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{\text{progressiva}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\text{retrógrada}} \qquad \Psi(x,t) = \psi(x) e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

- Condições de contorno (a) :

$$\psi_{①}(0) = A e^{ik\cdot 0} + B e^{-ik\cdot 0} = A + B = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{A = -B}$$

$$\psi_{①}(L) = A e^{ikL} + B e^{-ikL} = A\left(e^{ikL} - e^{-ikL}\right)$$

$$= 2iA \underbrace{\sin kL} = 0$$

$$\Rightarrow \underbrace{\sin kL} = 0 \qquad \boxed{k = k_n = \frac{n\pi}{L}}$$

$n = \cancel{0}, 1, 2, 3, \ldots$

princípio da Incerteza

Com isso :

$$\psi^{①}_{n}(x) = A\left(e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}\right)$$

$$= \underbrace{2iA}_{C} \sin(k_n x) = C \sin(k_n x)$$

SOLUÇÃO COMPLETA $\boxed{\Psi_{①}(x,t) = C \sin(k_n x)\, e^{-iE_n t/\hbar}}$

estacionária

- $\boxed{E_n = ?}$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad\qquad k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

mas $k_n = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \frac{n^2\pi^2}{L^2} = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$

$$\left[E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{L^2} n^2 \frac{1}{2m} = \underbrace{\left(\frac{h^2}{8mL^2}\right)}_{E_1} n^2 \right]$$

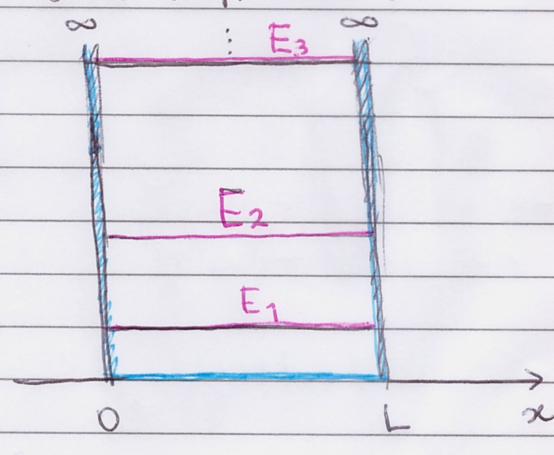
E_1 = estado de energia mais baixa =
= energia do "estado fundamental"

A energia é quantizada! $\qquad E_n = E_1 n^2$

A partícula dentro da caixa em um estado estacionário possui energia bem definida.

NÍVEIS DISCRETOS DE ENERGIA :

CONFINAMENTO



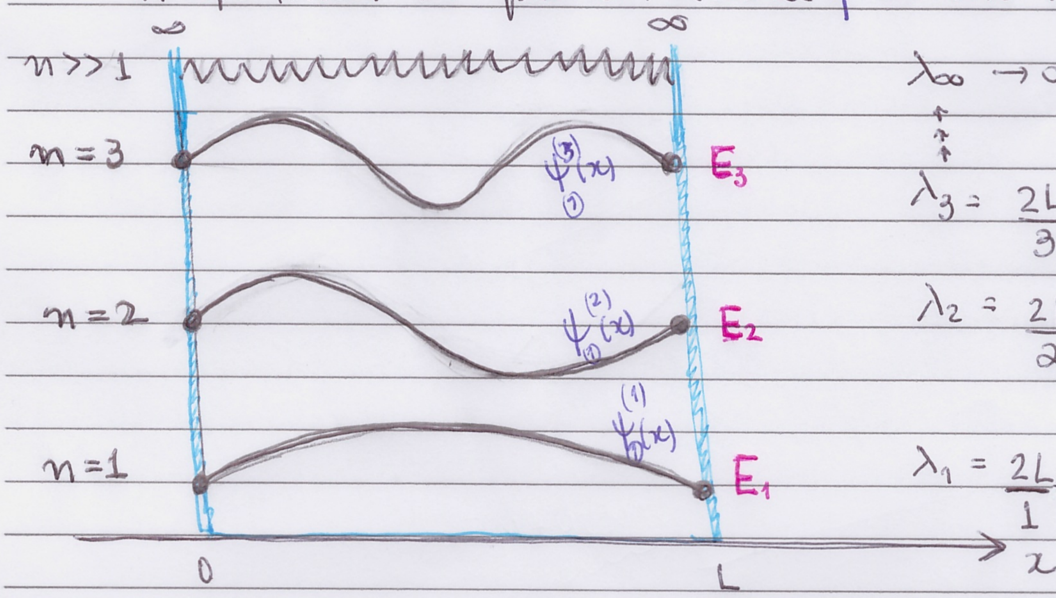
- compimento de onda

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} \Rightarrow \left[\lambda_n = \frac{2\pi}{n\pi/L} = \frac{2L}{n} \right] \quad k_n = n\pi/L$$

$$\Psi^{(n)}_{I}(x,t) = C \,\text{sen}(k_n x)\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$= C \,\text{sen}\left(\frac{n\pi}{L} x\right) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Amplitudes de probabilidade ψ dentro da caixa:



$\lambda_\infty \to 0$ (limite clássico)

bola: Ex. 10^{-34} m

$\lambda_3 = \frac{2L}{3}$

$\lambda_2 = \frac{2L}{2} = L$

$\lambda_1 = \frac{2L}{1} = 2L$

- Normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n(x,t)|^2\, dx \underset{\uparrow}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2\, dx = 1$$

estacionário

Como $\psi_{②}(x) = \psi_{③}(x) = 0$ (fora da caixa)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi^{(n)}(x)|^2\, dx = \int_0^L |\psi^{(n)}_{①}(x)|^2\, dx =$$

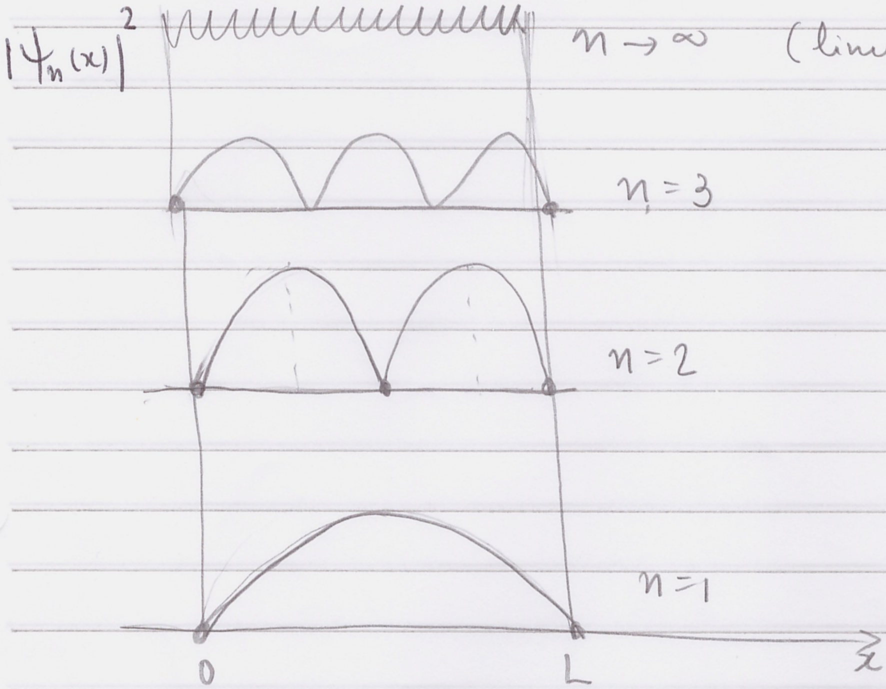
$$= |C|^2 \cdot \underbrace{\int_0^L \sin^2 k_n x\, dx}_{L/2} = 1 \qquad \boxed{k_n = \frac{n\pi}{L}}$$

$$\Rightarrow |C| = \sqrt{2/L}$$

$$\psi^{(n)}_{①}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

$$\begin{cases} \Psi^{(n)}_{①}(x,t) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\, \sin\left(\dfrac{n\pi x}{L}\right) \cdot e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} & 0 \le x \le L \\ \Psi^{(n)}(x,t) = 0 & \begin{cases} x > L \\ x < 0 \end{cases} \end{cases}$$

Densidade de probabilidade



$(n+1)$ zeros

---

* se $\underline{n=0}$ $\Rightarrow E = 0$ ~~[illegible]~~

$E = \dfrac{p^2}{2m} \longrightarrow p = \pm\sqrt{2mE}$

E bem definida $\not\Rightarrow$ p definida

Mas para ~~[illegible]~~ $E = 0 \Rightarrow p = 0$ $(n=0)$

$\Rightarrow$ partícula em repouso $\Rightarrow \Delta p_x = 0$

No entanto, na caixa: $\Delta x \sim L$ finito!!

p. incerteza $\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar/2$ ...violado...

Para outros níveis, E é bem definido, mas p não

$+\vec{p}$ $\quad -\vec{p}$ $\quad \psi$: combinação linear estados $\pm\vec{p}$.

<u>Exercício</u> :

Considere uma partícula dentro de um poço de potencial ∞. As funções de onda que representam os estados estacionários desta partícula são: (estados ligados)

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

onde E_n são as energias correspondentes. <u>Determine E_n</u>

<u>Solução</u> : Eq. Schrö independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2} = E_n \psi_n(x)$$

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

com $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \cancel{\sqrt{\frac{2}{L}}\, \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)} \left[-\frac{n^2\pi^2}{L}\right] = E_n \cdot \cancel{\sqrt{\frac{2}{L}}\, \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2\pi^2}{L} = E_n \quad \Rightarrow \quad \boxed{E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) \cdot n^2}$$