

Mecânica Quântica

Na última aula, vimos que uma onda de matéria (\equiv partícula) podia ser descrita por uma função de onda $\Psi(x, y, z, t)$.

Ψ não é uma grandeza física mas $|\Psi|^2 dV$ é a probabilidade de encontrar a partícula num volume dV centrado em x, y, z , no instante t ($|\Psi|^2$ é a densidade de probabilidade).

Vimos qual era a função de onda da partícula livre e da "partícula numa caixa". Hoje veremos como calcular a função de onda de modo geral.

Equação de Schrödinger §2.3

Obteremos a função de onda de modo geral resolvendo a "equação de Schrödinger". Veremos como fazer isto analiticamente em alguns casos simples. Casos mais complexos necessitam de computador.

[Na época onde descobriu a equação que tem seu nome, Erwin Schrödinger era um físico austríaco moderadamente sucedido, trabalhando em Zurique. O Prof. Debye, chefe de um grupo de pesquisa, lhe pediu um colóquio sobre a ideia de de Broglie. Foi assim que Schrödinger se interessou à questão e passou a formular sua equação (1925).]

Esta equação não pode ser derivada. É um princípio novo. Mas ela pode ser motivada.

Consideramos uma partícula com uma energia potencial $U(x, t) = U(x)$.

\Rightarrow sua energia E é conservada

$$(W = \int F(x) dx = -\Delta U = \Delta K)$$

$\Rightarrow |\Psi|^2$ independente de t (\equiv estado estacionário)

Supomos $\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t)$ (cf. $y(x, t) = A \sin kx \cos \omega t$)

$|\Psi|^2$ independente de $t \Rightarrow |\varphi(t)|^2 = \text{constante}$
 \Rightarrow podemos escolher $\varphi(t) = e^{-i\omega t}$ (com $\omega = 2\pi f = 2\pi E/\hbar = E/\hbar$)

Numa onda, a equação de onda é:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v_{\text{onda}}^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

Vamos tentar isto:

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

$$\frac{1}{v_{\text{onda}}^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \frac{(-i\omega)^2 \psi(x) e^{-i\omega t}}{v_{\text{onda}}^2} = -\frac{\omega^2 \psi(x) e^{-i\omega t}}{v_{\text{onda}}^2}$$

$$= -\frac{(2\pi \lambda_{\text{onda}} / \lambda)^2 \psi(x) e^{-i\omega t}}{v_{\text{onda}}^2} = -\frac{(2\pi f)^2 \psi(x) e^{-i\omega t}}{\hbar^2}$$

$$= -\frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \psi(x) e^{-i\omega t}$$

Juntando:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U\psi = E\psi \quad \text{eq. de Schrödinger em 1 dim. independente do tempo.}}$$

Existem condições que ψ deve satisfazer:

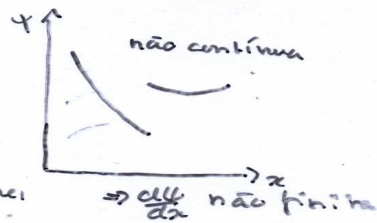
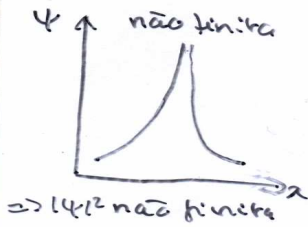
ψ contínua

$\frac{d\psi}{dx}$ contínua exceto nos pontos em U infinita

ψ e $\frac{d\psi}{dx}$ unicuicas e finitas

$\psi(x) \rightarrow 0$ se $x \rightarrow \pm\infty$ (para normalizar Ψ)

Contra exemplos:



Obs. 1: a eq. de Schrödinger em 1d, dependendo do tempo é:

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

Isto é sugerido pelo fato que $E e^{-iEt} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-iEt}$

Obs. 2: a eq. de Schrödinger em 3d, dependendo do tempo é:

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

A equação de Schrödinger tem um papel tão fundamental na Mecânica Quântica como as leis de Newton na Mecânica Clássica e as equações de Maxwell no Eletromagnetismo. Ela tem muito sucesso ao explicar o comportamento dos sistemas atômicos e nucleares enquanto a física clássica fracassa. Além disso, quando aplicada aos corpos macroscópicos, os resultados concordam com os da mecânica clássica. É isto que a justifica. (Ela não pode ser derivada.)

Vamos resolver esta equação em alguns casos.

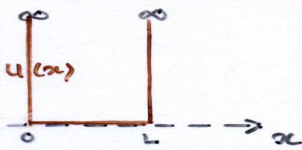
Partícula livre

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -\left(2\pi\right)^2 \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \psi = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \psi$$

$$\equiv -k^2 \psi \Rightarrow \psi(x) = A \sin(kx + \varphi)$$

(Uma partícula livre com certeza Δx como esperado na posição e Δp no momento, será representada por um pacote de ondas).

Partícula numa caixa



$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi & \text{com } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \psi(0) = \psi(L) = 0 \end{cases}$$

$U(x) = 0$ entre 0 e L

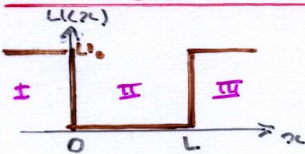
$$\Rightarrow \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$\psi(0) = B = 0$$

$$\psi(L) = A \sin kL = 0 \Leftrightarrow kL = n\pi$$

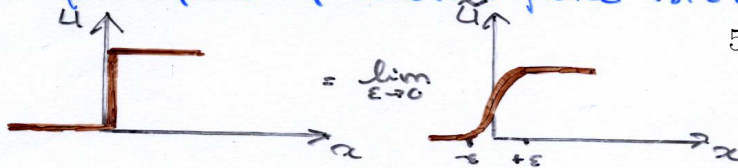
Assim as funções de onda são do tipo $\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x$ e as energias $E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2$ como esperado.

Partícula num poço de altura finita § 42-6



O potencial degrau

A que tipo de problema físico isto corresponde?



A força $\tilde{F}(x) = -\frac{d\tilde{U}}{dx} = \begin{cases} 0 & \text{se } x < -\epsilon \text{ ou } x > \epsilon \\ -\frac{U_0}{2\epsilon} & \text{se } x = 0 \end{cases}$

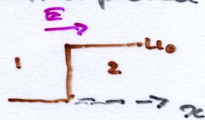
\Rightarrow a força $F(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{F}(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \neq 0 \\ -\infty & \text{se } x = 0 \end{cases}$

É uma força impulsiva $F(x) = (-\infty)\delta(x)$

Assim,

um degrau abrupto ^{em $x=0$} subindo para zero significa que tem uma força infinita em $x=0$, apontando pra cá. (Isso vale mesmo p/ $U_0 = \infty$).

[Por exemplo, pode-se descrever assim um elétron se movimenta perpendicularmente à superfície de uma placa de metal ($U=0$ dentro e U_0 na superfície)]



Classicamente, a partícula vinda da esquerda é:

- freada se $E > U_0$ (pois $p_1 = \sqrt{2mE} > p_2 = \sqrt{2m(E-U_0)}$)
- refletida se $E < U_0$ (se $U_0 = \infty$ só temos este caso)

Poço de altura finita + partícula com $E < U_0$

Classicamente, o movimento é o mesmo do que a "partícula numa caixa" (cf. aula anterior)

Quanticamente:

$\left\{ \begin{array}{l} \text{Nas regiões I e III:} \\ \quad \downarrow \quad \downarrow \\ \quad x < 0 \quad x > 0 \end{array} \right. \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{(E-U_0)}{<0} \psi \equiv c^2\psi$
 $\left\{ \begin{array}{l} \text{Na região II:} \end{array} \right. \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \equiv -k^2\psi$

Nas regiões I e III: $\psi(x)$ é do tipo $Ae^{+cx} + Be^{-cx}$.
Como $\psi(\pm\infty)$ tem que ser finito:

$\psi_I(x) = Ae^{+cx}$

$\psi_{III}(x) = Be^{-cx}$

com $c = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$

A solução da equação na região II é:

$$\psi_{II}(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx} \text{ com } k = \frac{\sqrt{E}}{\hbar}$$

Como ψ e $\frac{d\psi}{dx}$ são contínuas em particular em $x=0$:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Leftrightarrow A = F + G \quad (i)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0) \Leftrightarrow AC = ik(F - G) \quad (ii)$$

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \Leftrightarrow F e^{ikL} + G e^{-ikL} = B e^{-cL} \quad (iii)$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx}(L) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(L) \Leftrightarrow ikF e^{ikL} - ikG e^{-ikL} = -Bc e^{-cL} \quad (iv)$$

(i) e (ii)

$$\begin{cases} F + G = A \\ F - G = \frac{c}{ik} A \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} F = \frac{A}{2} \left(1 + \frac{c}{ik}\right) \\ G = \frac{A}{2} \left(1 - \frac{c}{ik}\right) \end{cases} \quad (*)$$

(iii) e (iv)

$$\begin{cases} F e^{ikL} = \frac{B}{2} e^{-cL} \left(1 - \frac{c}{ik}\right) \\ G e^{-ikL} = \frac{B}{2} e^{-cL} \left(1 + \frac{c}{ik}\right) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} F = \frac{B}{2} e^{-(c+ik)L} \left(1 - \frac{c}{ik}\right) \\ G = \frac{B}{2} e^{-(c-ik)L} \left(1 + \frac{c}{ik}\right) \end{cases} \quad (**)$$

Juntamos (*) e (**)

$$\begin{cases} \frac{A}{2} \left(1 + \frac{c}{ik}\right) = \frac{B}{2} e^{-(c+ik)L} \left(1 - \frac{c}{ik}\right) \\ \frac{A}{2} \left(1 - \frac{c}{ik}\right) = \frac{B}{2} e^{-(c-ik)L} \left(1 + \frac{c}{ik}\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{ik+c}{-ik+c} = e^{-2ikL} \frac{-ik+c}{ik+c} \quad \text{: equação para } E \text{ (A, B, F, G eliminados)}$$

Podemos escrever $c+ik = \sqrt{c^2+k^2} e^{i\theta}$
com $\theta = \arctan k/c = \arctan \sqrt{E/(U_0-E)}$
e a equação anterior se torna:

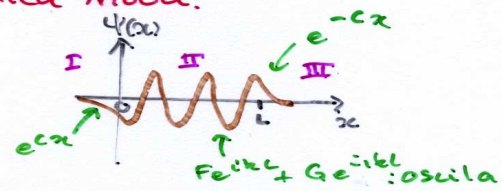
$$e^{-2ikL - i4\theta} = 1 \Rightarrow 2kL + 4\theta = 2\pi n \quad]$$

Finalmente: $kL + 2fn^{-1} \sqrt{\frac{E}{U_0 - E}} = n\pi$

dai E é quantizada (mas não tem fórmula simples). $E < U_0$

Obs.: Se $U_0 \rightarrow \infty$, a equação se reduz a $kL = n\pi$ e recuperamos o resultado da "partícula numa caixa".

Além disto as funções de onda ψ_n tem uma característica nova!



$E < U_0$

Existe alguma probabilidade de encontrar a partícula fora do poço, embora para a mecânica clássica, isto seja proibido.

Este fenômeno de quantização das frequências possíveis aparece quando uma onda é confinada numa região, não precisa ser uma onda de matéria.

- Por exemplo: onda dedilhada
- onda eletromagnética (microonda entre placas metálicas)
 - onda de matéria com energia potencial do tipo \square , \cup , osc. harmônico, etc.

A penetração da onda fora da região de confinamento também é possível para onda dedilhada ou eletromagnética.

Questão 4

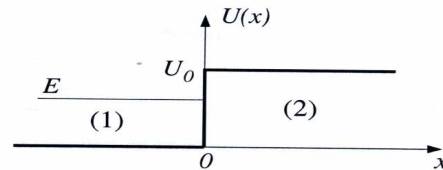
Considere o movimento unidimensional de uma partícula de massa m sob um potencial $U(x)$ que é nulo na região $0 < x < L$ e infinito para $x \leq 0$ ou $x \geq L$.

- (a) (0,5 ponto) Escreva a função de onda $\psi(x)$ nas regiões $x \leq 0$ e $x \geq L$. Justifique.
- (b) (0,5 ponto) Escreva a equação de Schrödinger para a região $0 < x < L$.
- (c) (0,5 ponto) Qual é a relação que deve haver entre k e a energia E para que a função de onda $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$ (k real; A e B constantes) satisfaça a equação de Schrödinger na região $0 < x < L$?
- (d) (1,0 ponto) Utilizando as condições de contorno, determine os possíveis valores de k e os níveis de energia.

Questão 3

Uma partícula de massa m e energia constante E ($0 < E < U_0$), move-se ao longo do eixo x e através de valores negativos de x , aproxima-se da barreira de potencial

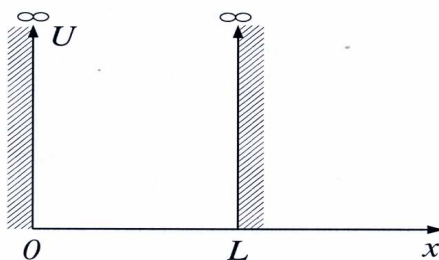
$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & x \geq 0 \end{cases}$$



- (a) (0,5 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo desta partícula para $x < 0$ (região (1)) e para $x \geq 0$ (região (2)).
- (b) (1,0 ponto) Determine as soluções gerais da equação de Schrödinger em cada uma das regiões. Imponha, em seguida, a condição de que a função de onda seja finita.
- (c) (0,5 ponto) Imponha as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada. Não é necessário resolver estas equações.
- (d) (0,5 ponto) É possível a partícula penetrar na barreira, isto é ser encontrada na região (2) ($x > 0$)? Justifique e esboce o gráfico da função de onda.

Questão 3

Uma partícula de massa m está sujeita a um potencial unidimensional na forma de uma “caixa” de lado L ($U(x) = 0$ para $0 < x < L$, e $U(x) = \infty$ fora deste intervalo), conforme a figura .



As funções de onda normalizadas para este potencial são:

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

- (a) (1,0 ponto) Determine os níveis de energia desse potencial (mostre claramente como deduziu este resultado).
- (b) (0,5 ponto) Esboce um gráfico da função de onda para $n = 2$, indicando os valores de x correspondentes a zeros e pontos de máximos e mínimos da função de onda.
- (c) (1,0 ponto) Determine, usando a função de onda para o estado com $n = 2$, a probabilidade de encontrar a partícula na região $3L/4 \leq x \leq L$.

Dado: $\int \operatorname{sen}^2(x) dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4} \operatorname{sen}(2x)$.