Mecânica Quântica

Na última aula, vimos que uma onda de matéria (≡ partícula) podia ser descrita por uma <u>função de onda $\Psi(x,y,z,t)$</u>.
Ψ não é uma grandeza física mas <u>$|\Psi|^2 dV$</u> 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 §42.3

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 moderamente sucedido, trabalhando em Zurique. O Prof. Debye, chefe de um grupo de pesquisa, lhe pediu um colóquio sobre a idéia do 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

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

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

Supomos $\Psi(x,t) = \psi(x)\,\varphi(t)$ (cf. $y(x,t) = A \operatorname{sen} kx \cos \omega t$)

$|\Psi|^2$ independente de $t \Rightarrow |\varphi(t)|^2 = $ constante

$\Rightarrow$ podemos escolher $\varphi(t) = e^{-i\omega t}$ (com $\omega = 2\pi f = 2\pi E/h = E/\hbar$)

Numa onda, a equação de onda é:

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

vamos tentar isto:

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

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

$$= -\frac{(2\pi \cancel{v_{onda}}/\lambda)^2}{\cancel{v_{onda}^2}}\psi(x)\,e^{-i\omega t} = -\left(\frac{2\pi p}{h}\right)^2\psi(x)\,e^{-i\omega t}$$

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

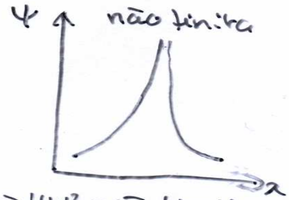
juntando:

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

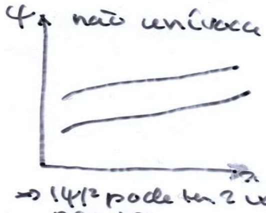
Existem condições que ψ deve satisfazer:

- ψ contínua
- $\frac{d\psi}{dx}$ contínua exceto nos pontos onde U infinita
- ψ e $\frac{d\psi}{dx}$ unívocas e finitas
- $\psi(x) \to 0$ se $x \to \pm\infty$ (para normalizar Ψ)

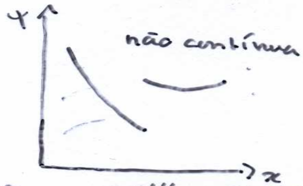
Contra exemplos:



$\Rightarrow |\psi|^2$ não finita



$\Rightarrow |\psi|^2$ pode ter 2 valores para 1 x



$\Rightarrow \frac{d\psi}{dx}$ não finita

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 $E e^{-i\omega t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\omega t}$

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 disto, 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

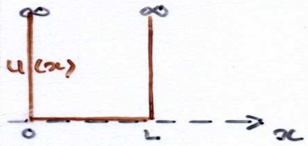
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \iff \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -(2\pi)^2\left(\frac{p}{h}\right)^2\psi = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\psi$$

$$\equiv -k^2\psi \Rightarrow \psi(x) = A\,\mathrm{sen}(kx+\varphi)$$

como esperado

(Uma partícula livre com incerteza Δx na posição e Δp no momento, será representada por um pacote de onda).

Partícula numa caixa



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

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

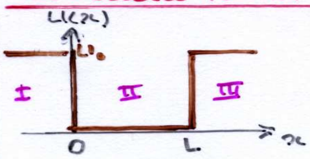
$\Rightarrow \psi(x) = A\,\mathrm{sen}\,kx + B\cos kx$

$\psi(0) = B = 0$

$\psi(L) = A\,\mathrm{sen}\,kL = 0 \iff kL = n\pi$

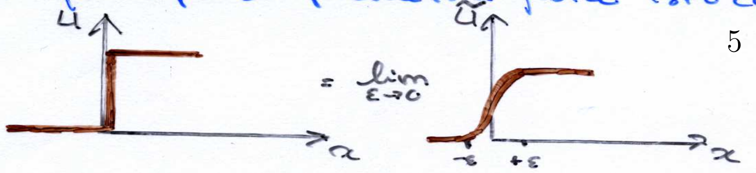
Assim as funções de onda são do tipo $\psi_n(x) = A\,\mathrm{sen}\frac{n\pi}{L}x$ e as energias $E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$ como esperado.

Partícula num poço de altura finita § 42-4



O potencial degrau

A que tipo de problema físico isto corresponde?

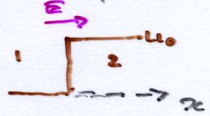


A força $\tilde{F}(x) = -\frac{d\tilde{U}}{dx} = \begin{cases} 0 & \text{se } x < -\varepsilon \text{ ou } > \varepsilon \\ -\frac{U_0}{2\varepsilon} & \text{se } x = 0 \end{cases}$

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

é uma força impulsiva $\vec{F}(x) = (-\infty)\hat{x}$

Assim,
um <u>degrau abrupto</u> em $x=0$ subindo para $x>0$ significa que tem uma <u>força infinita</u> em $x=0$, apontando p/ $x<0$.
(Isto vale mesmo p/ $U_0 = \infty$).
[Por exemplo, pode-se descrever assim um elétron se movimentando 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:

Nas regiões I ($x<0$) e III ($x>L$): $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(E-U_0)}_{<0}\psi \equiv C^2\psi$

Na região II: $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \equiv -k^2\psi$

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

$\psi_I(x) = Ae^{Cx}$

$\psi_{III}(x) = Be^{-Cx}$ com $C = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$

A solução da equação na região II é:

$\psi_{II}(x) = F\,e^{ikx} + G\,e^{-ikx}$ com $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

[Como ψ e $\frac{d\psi}{dx}$ são contínuas em particular temos:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \iff A = F + G & (i) \\ \frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0) \iff AC = ik(F - G) & (ii) \\ \psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \iff F e^{ikL} + G e^{-ikL} = B e^{-CL} & (iii) \\ \frac{d\psi_{II}(L)}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx}(L) \iff ikF e^{ikL} - ikG e^{-ikL} = -BC e^{-CL} & (iv) \end{cases}$$

(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)

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

Juntando (*) e (**)

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

$$\Rightarrow \frac{ik + C}{-ik + C} = e^{-2ikL} \frac{-ik + C}{ik + C}$$

: equação para E (A, B, F, G eliminados)

Podemos escrever $C + ik = \sqrt{C^2 + k^2}\, e^{i\theta}$

com $\theta = \tan^{-1} k/C = \tan^{-1}\sqrt{E/(U_0 - E)}$

e a equação anterior se torna:

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

finalmente: $kL + 2\tan^{-1}\sqrt{\dfrac{E}{U_0-E}} = n\pi$

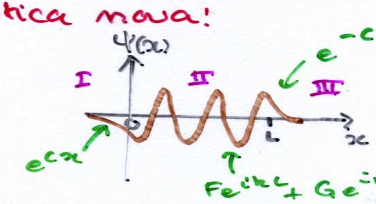
daí

E é quantizada (mas não tem fórmula simples).

$E < U_0$

Obs.: Se $U_0 \to \infty$, 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!

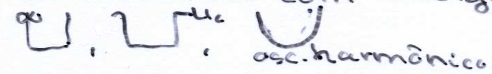


$E < U_0$

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



, etc.

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

2010

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 $\psi(x) = A\text{sen}(kx) + B\cos(kx)$ (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.

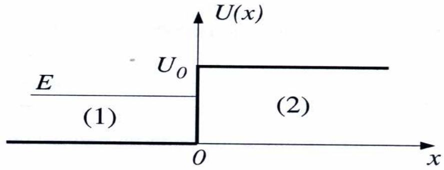
9

2009

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.

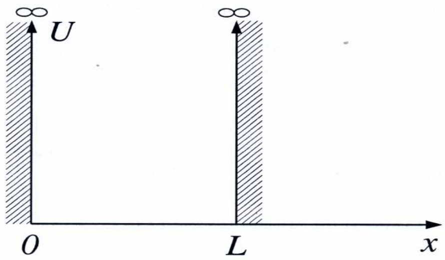
(d) (0,5 ponto) É possível a partícula penetrar na barreira, isto é ser encontrada na região (2) $(x > 0)$? Justifique e esboce o gráfico da função de onda.

10

2003

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 $3L/4 \leq x \leq L$.

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

11

Questão 3

Uma partícula de massa m executa oscilações harmônicas ao longo do eixo x num potencial $m\omega^2 x^2/2$, onde ω é uma constante.

(a) (0,5 ponto) Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para a partícula.

(b) (1,0 ponto) Considere a função de onda $\psi(x) = Ae^{-bx^2}$, onde A e b são constantes. Determine o valor de b para que ψ seja solução da equação do item (a). Qual é o valor da energia associada a esta função de onda?

(c) (1,0 ponto) Calcule a constante de normalização A.

<u>Dado:</u> $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) = \sqrt{\pi/\alpha}$