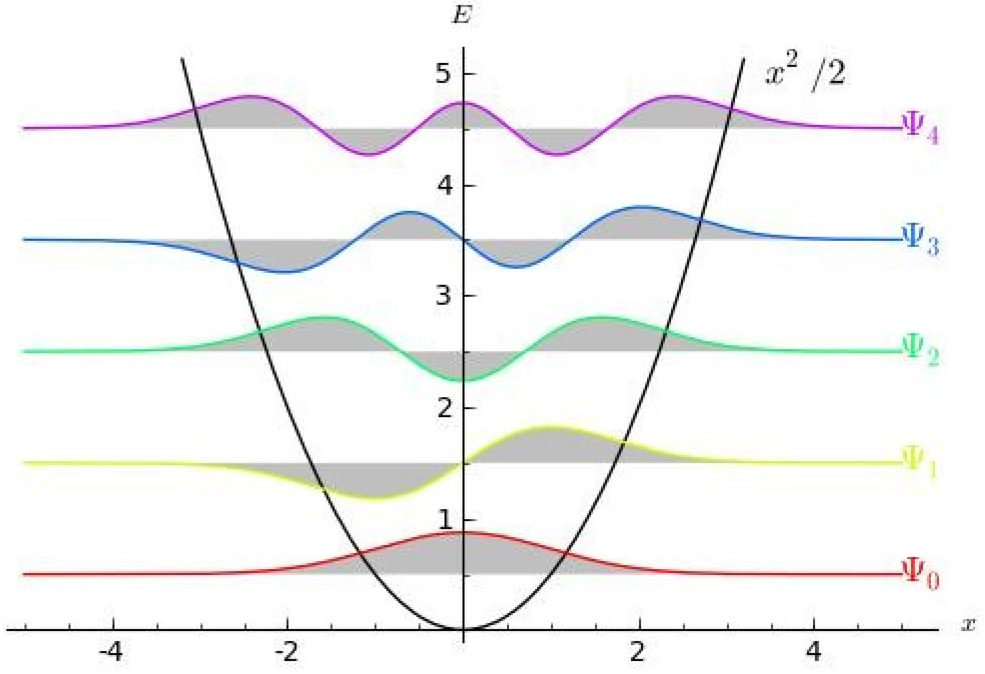
Física Quântica

Aula 7:
Equação de Schrödinger,
Potenciais Simples I,
Transições

Pieter Westera
pieter.westera@ufabc.edu.br

Universidade Federal do ABC



http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html

A Equação de Schrödinger

Lembrete

Equação de Schrödinger (dependente do tempo):

$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 + V(x, t)\cdot\Psi(x, t) = i\hbar \cdot \partial\Psi(x, t)/\partial t$

(Esta não usaremos muito)

A Equação de Schrödinger independente do tempo:

$-\hbar^2/2m \cdot d^2\psi(x)/dx^2 + V(x)\cdot\psi(x) = E\cdot\psi(x)$

Erwin Schrödinger

Serve para achar, para um dado potencial, as funções de onda e as energias correspondentes da onda/partícula submetida e este potencial

Condições, que uma função de onda tem que satisfazer

- $\psi(x)$ tem que satisfazer a Equação de Schrödinger

- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser contínuas
  (exceção: pode ter quinas em posições de transição
  para regiões com potenciais infinitos)

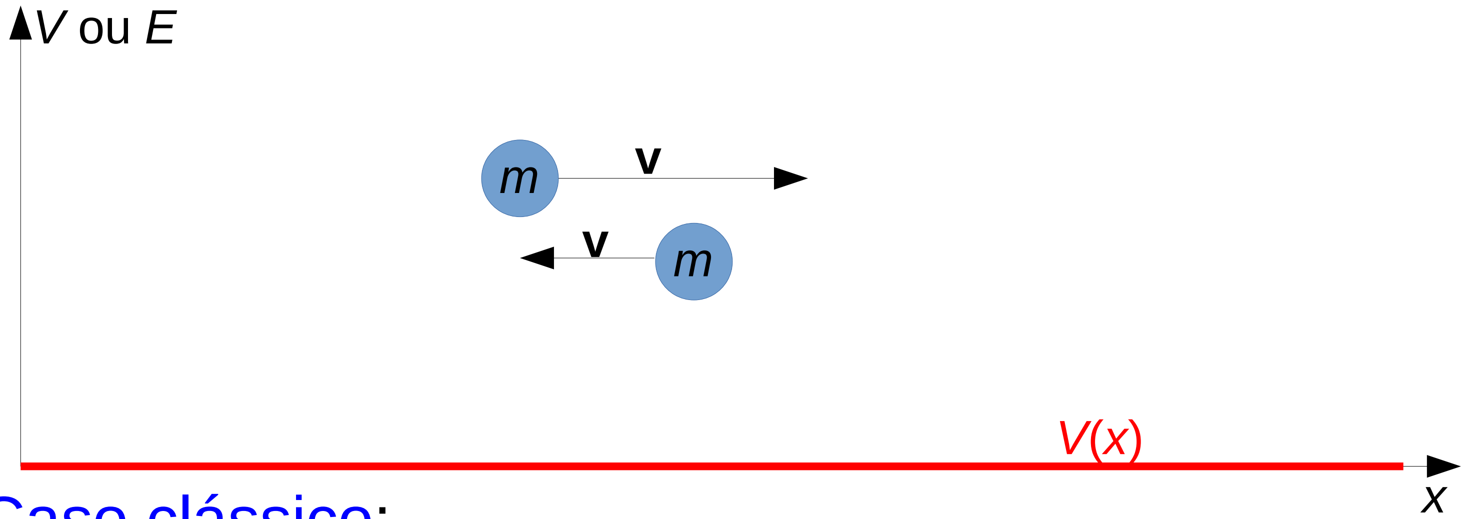
- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser finitas

- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser unívocas

- condição de normalização: $\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^*\psi(x)dx = 1$

A Partícula Livre

$V(x) = 0$



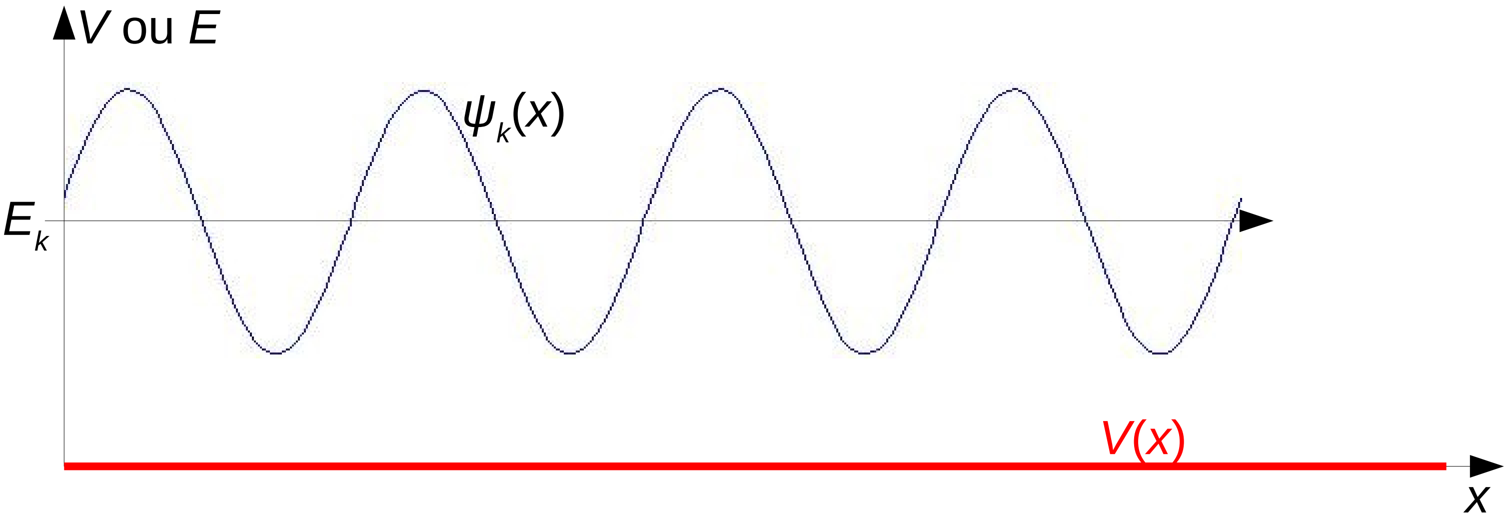
Caso clássico:

$E > 0$: Uma partícula se movimentando com velocidade constante pra direita ou esquerda ($v = \pm\sqrt{2E/m}$)

$E < 0$: Não existe

A Partícula Livre

Caso quântico



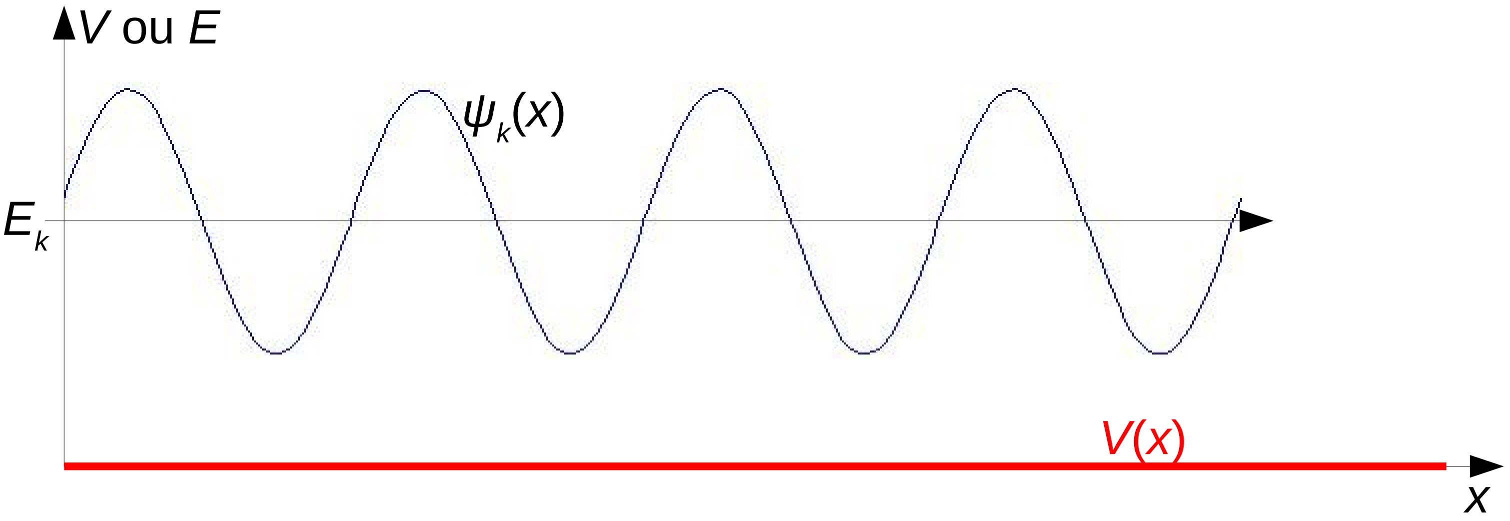
Equação de Schrödinger dependente do tempo p. $E > 0$:

$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 = i\hbar \cdot \partial\Psi(x, t)/\partial t$

solução: $\Psi(x, t) = C \cdot e^{i(\pm kx - \omega t)}$, já que
$\partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 = C \cdot i^2 k^2 \cdot e^{i(\pm kx - \omega t)} = -k^2 \cdot \Psi(x, t)$, e
$\partial\Psi(x, t)/\partial t = C \cdot (-i\omega) \cdot e^{i(\pm kx - \omega t)} = -i\omega \cdot \Psi(x, t)$
=> E.d.S.: $-\hbar^2 k^2/2m \cdot \Psi(x, t) = \hbar\omega \cdot \Psi(x, t)$

A Partícula Livre

Caso quântico



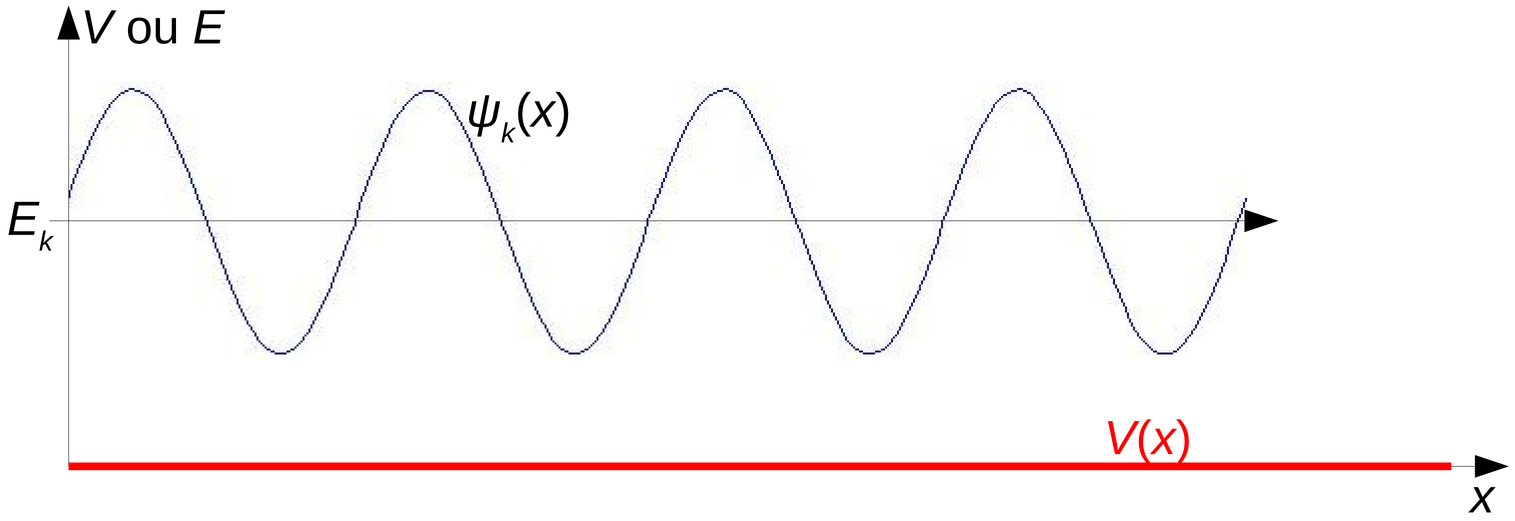
Equação de Schrödinger dependente do tempo p. $E > 0$:

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 = i\hbar \cdot \partial\Psi(x, t)/\partial t$$

solução: $\Psi(x) = C\cdot e^{\,i(\pm kx\,-\,\omega t)} = e^{\,-i\omega t}\cdot C\cdot e^{\,\pm ikx} = \varphi(t)\cdot\psi(x)$, onde
$\varphi(t) = e^{\,-i\omega t} = e^{\,-iEt/\hbar} \Rightarrow E = \hbar\omega$,
$\psi(x) = C\cdot e^{\,\pm ikx}$, $\quad E = E_k = \hbar^2k^2/2m \Leftrightarrow k = \sqrt{2mE}/\hbar$

A Partícula Livre

Caso quântico

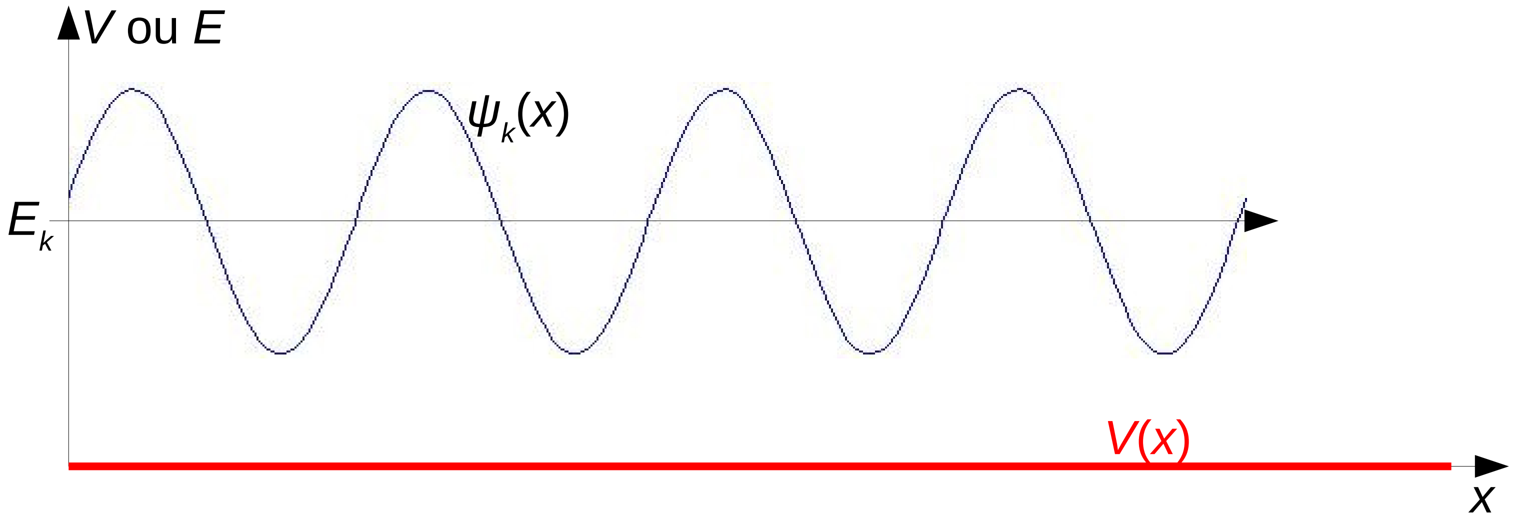


$$\Psi(x) = C\cdot e^{\,i(\pm kx\,-\,\omega t)}$$

A solução com $+k$ corresponde a uma onda propagando-se pra direita, já que $\Psi(x) = C\cdot e^{\,i(kx\,-\,\omega t)} = C\cdot e^{\,ik(x\,-\,vt)}$, com $v = \omega/k$, é da forma $g(x - vt)$ e analógicamente, a com $-k$, a uma onda propagando-se pra esquerda.

A Partícula Livre

Caso quântico



Já que $V(x) = 0$ não depende do tempo, também deve ser possível resolver o problem da partícula livre usando a Equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\psi(x)/\partial x^2 = E \cdot \psi(x)$$

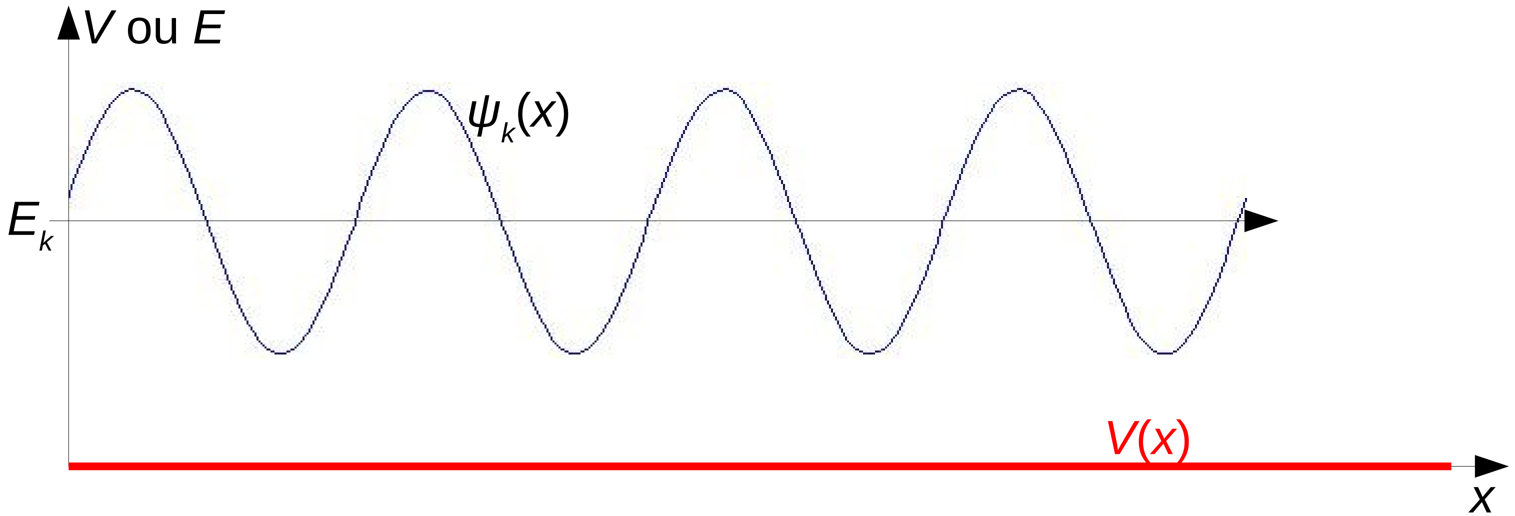
$\psi(x) = A\cdot\text{sen } kx + B\cdot\cos kx$

$\Rightarrow \partial^2\psi(x)/\partial x^2 = A\cdot(-k^2)\cdot\text{sen } kx + B\cdot(-k^2)\cdot\cos kx = -k^2\cdot \psi(x)$

$\Rightarrow$ E.d.S.: $\hbar^2 k^2/2m \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$

A Partícula Livre

Caso quântico



Já que $V(x) = 0$ não depende do tempo, também deve ser possível resolver o problem da partícula livre usando a Equação de Schrödinger independente do tempo:

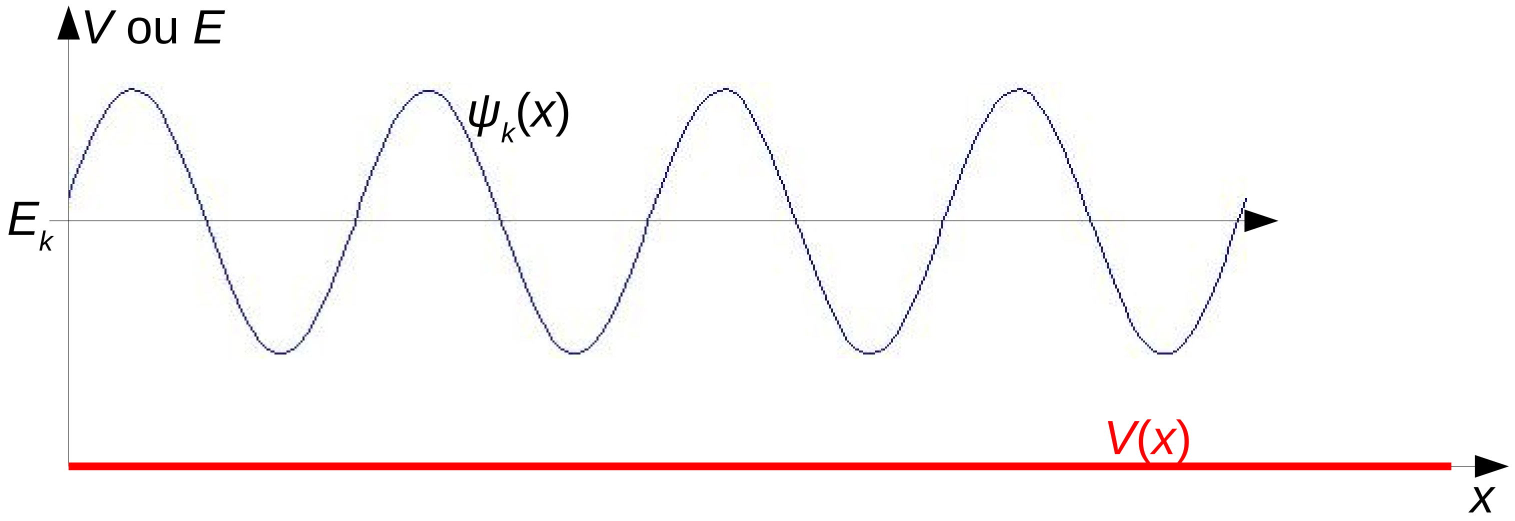
$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\psi(x)/\partial x^2 = E \cdot \psi(x)$$

$$\psi(x) = A \cdot \text{sen } kx + B \cdot \cos kx, \text{ onde } E = E_k = \hbar^2 k^2/2m \Leftrightarrow k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$$

$E < 0$: sem solução

A Partícula Livre

Caso quântico

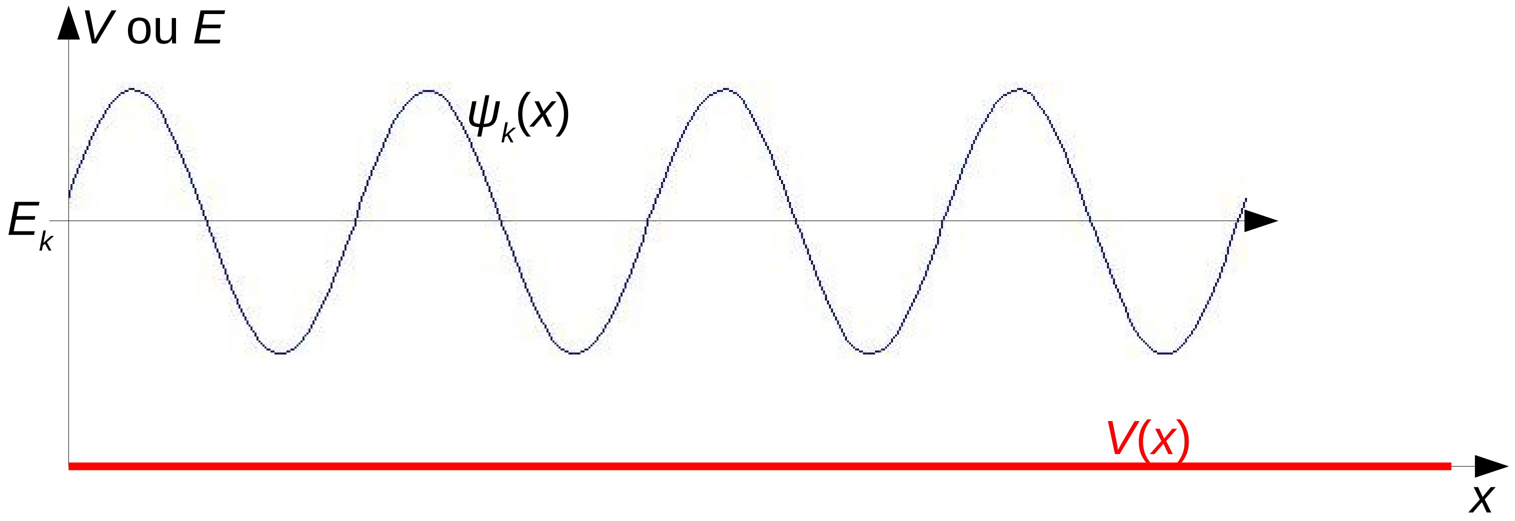


É frequente na física quântica colocar tudo no mesmo desenho:
- o potencial $V(x)$,
- as energias das funções de onda, como linhas horizontais,
- e as (partes reais das) funções de onda, usando as linhas que representam as suas energias como eixos x.

As escalas verticais das funções de onda são normalmente arbitrárias (afinal a unidade da função de onda não é a mesma que a do potencial/energia).

A Partícula Livre

Caso quântico



Mas o que as soluções encontradas usando a Equação de Schrödinger dependente do tempo, $C \cdot e^{\pm ikx}$, e estas últimas têm a ver uma com a outra?

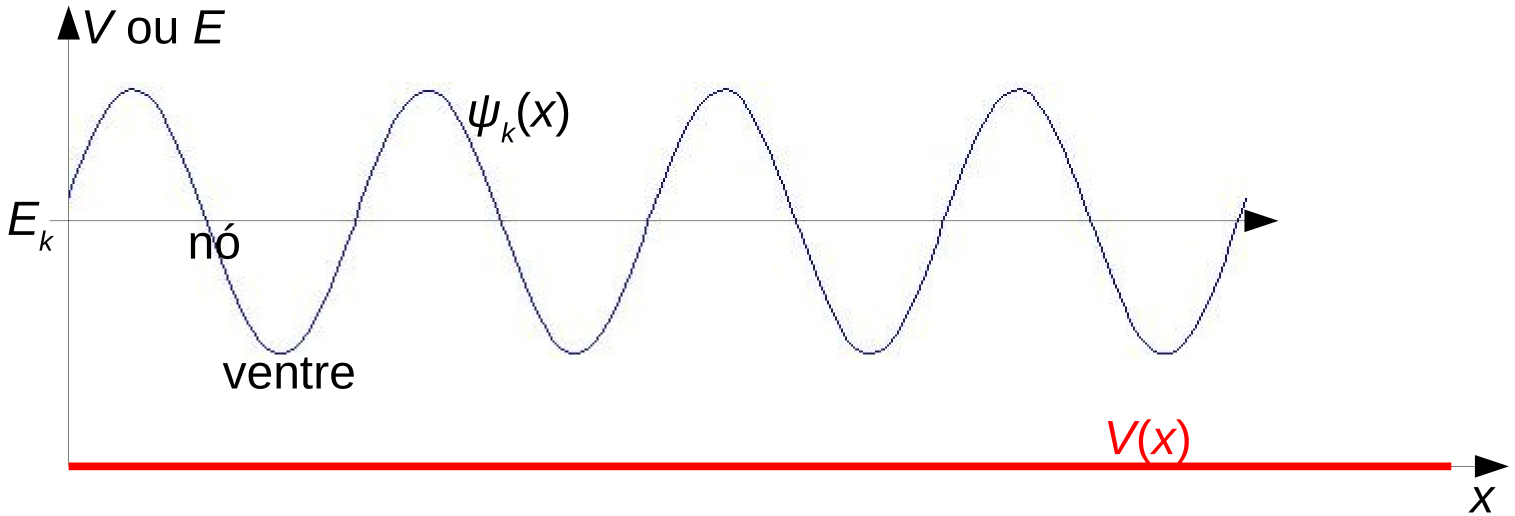
As últimas são combinações lineares das soluções $C \cdot e^{\pm ikx}$, já que:

$\cos kx = ½ \cdot (e^{+ikx} + e^{-ikx})$ e $\text{sen}\, kx = -i/2 \cdot (e^{+ikx} - e^{-ikx})$

(e vice-versa: $e^{+ikx} = \cos kx + i \cdot \text{sen}\, kx$ e $e^{-ikx} = \cos kx + -i \cdot \text{sen}\, kx$)

A Partícula Livre

Caso quântico

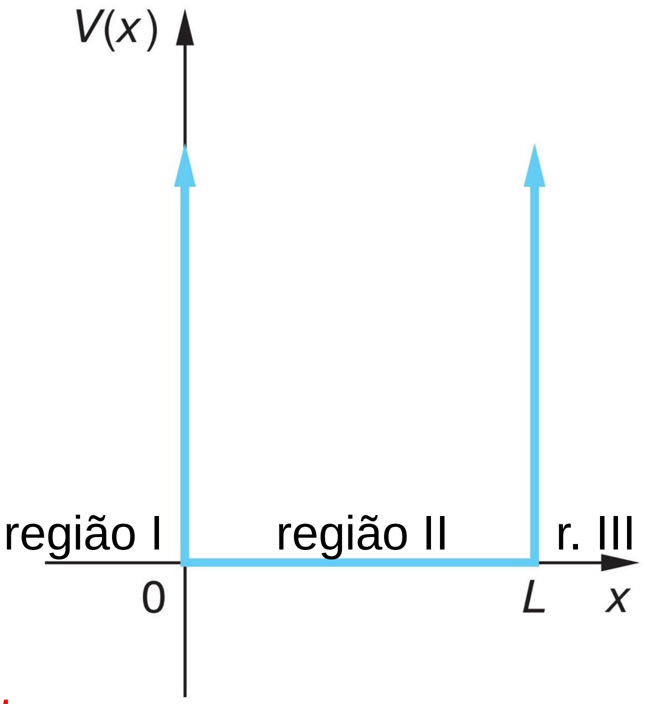


=> A·sen kx e B·cos kx correspondem a combinações de ondas propagando-se pra direita, e ondas propagando-se pra esquerda, ou seja, a ondas estacionárias.

Não esqueçam, que a função de onda completa ainda contém a parte dependente do tempo, $\varphi(t) = e^{-i\omega t} = e^{-iEt/\hbar}$.

O Poço Quadrado Infinito

$V(x) = 0$ para $0 < x < L$ (região II),
∞ para $x < 0$ ou $x > L$ (regiões I e III).



É razoavelmente bem realizado no caso de um elétron preso entre grades carregadas negativamente, elétrons presos num metal, e outros casos.

Caso clássico

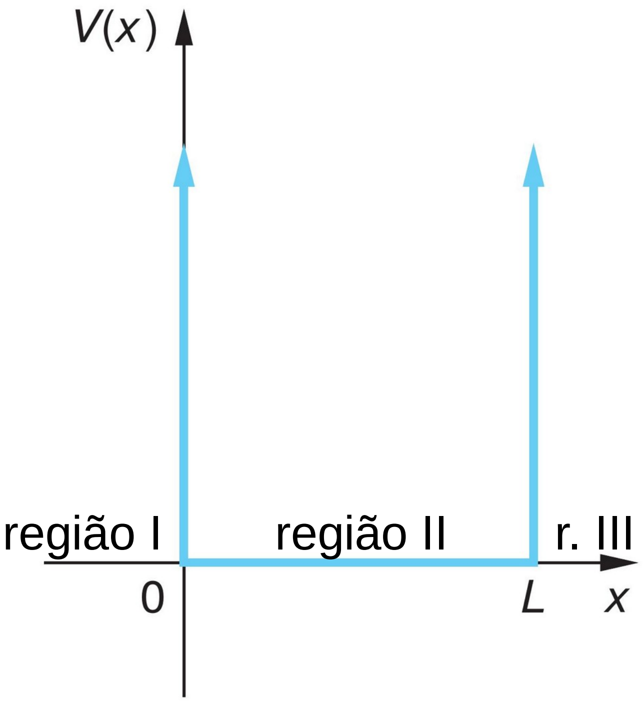
- $E > 0$: Partícula movimentando-se ida e volta entre $x = 0$ e $x = L$ com velocidade constante, $v = \pm\sqrt{2E/m}$, sendo refletida nas paredes do poço.
A probabilidade de encontrar a partícula numa dada posição é igual em todas as posições dentro do poço, já que, durante uma ida e volta, ela passa por todos os lugares duas vezes e com a mesma velocidade.

- $E < 0$: Impossível

O Poço Quadrado Infinito

$V(x) = 0$ para $0 < x < L$ (região II),

∞ para $x < 0$ ou $x > L$ (regiões I e III).



Caso quântico

- $E < 0$: Sem solução

- $E > 0$:
  - $x < 0$ e $x > L$: $\psi_I(x) = 0$, $\psi_{III}(x) = 0$
  - $0 < x < L$: "partícula livre",

    $\psi_{II}(x) = A \cdot \text{sen}\, kx + B \cdot \cos kx$,

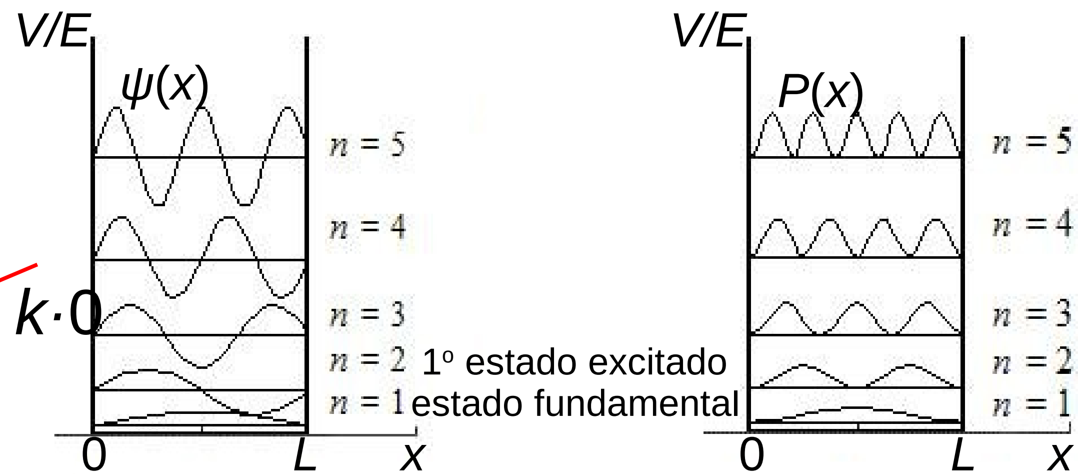
    onde $k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$

As soluções devem ser ondas estacionárias no interior do poço. Faz sentido, encarando elas como ondas sendo espelhadas ida e volta pelas paredes e assim se sobrepondo consigo mesmas.

O Poço Quadrado Infinito

Mas ψ tem que ser contínua:

$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ e $\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L)$



$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0$

$=> \psi_{II}(0) = A \cdot \text{sen}\, k \cdot 0 + \cancel{B \cdot \cos k \cdot 0}$

$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) = 0$

$=> \psi_{II}(L) = A \cdot \text{sen}\, kL = 0 \;\; => kL = n \cdot \pi$

$=> k = k_n = n\pi/L,$

$E = E_n = \hbar^2 k_n^2/2m = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2 = n^2E_1$, onde $E_1 = \pi^2\hbar^2/2mL^2$

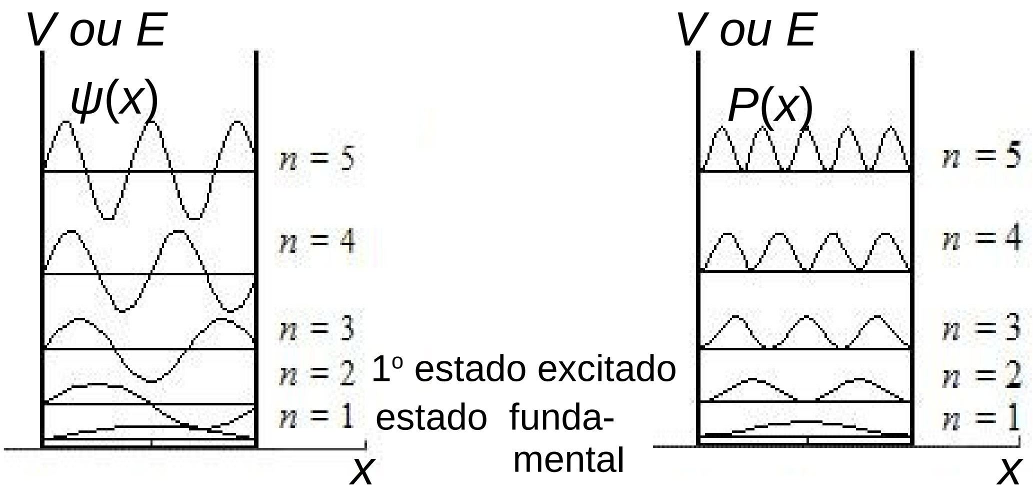
As condições de contorno (a onda tem que se "encaixar" no poço) causam a quantização da energia, resp., do número de onda!

O Poço Quadrado Infinito

Lembrando que a solução completa $\Psi(x, t)$ ainda contém a parte

$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$,

que corresponde a uma oscilação com frequência



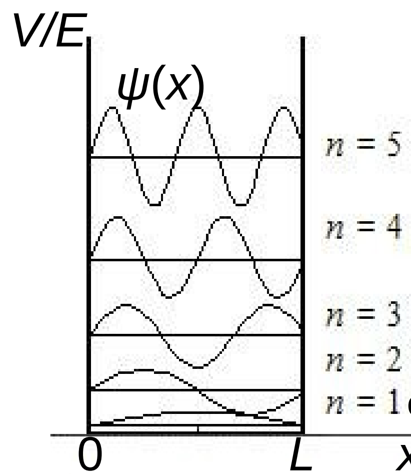
$\omega = E/\hbar = \hbar k_n^2/2m = n^2\pi^2\hbar/2mL^2 = \omega_n$

=> Solução completa:

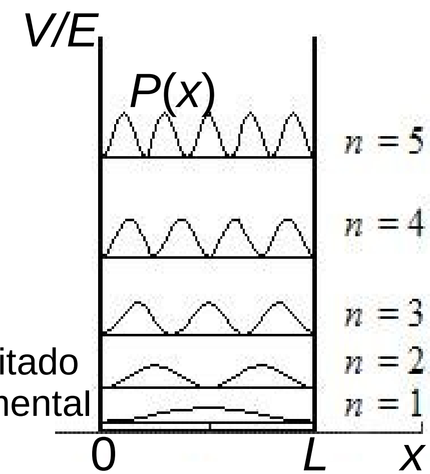
$\Psi_n(x) = \psi_n(x)\varphi_n(t) = A_n \cdot \text{sen}\, k_n x \cdot e^{-i\omega n t}$ para $0 < x < L$,

0 para $x < 0$ ou $x > L$

O Poço Quadrado Infinito



1º estado excitado
estado fundamental



Resumo:

=> Solução:

$\psi_n(x) = A_n \cdot \text{sen}\, k_n x$, onde $k_n = n\pi/L$ para $0 < x < L$

0 para $x < 0$ ou $x > L$

$E_n = n^2 E_1$, onde $E_1 = \pi^2\hbar^2/2mL^2$

Falta achar A_n:

Condição de normalização:

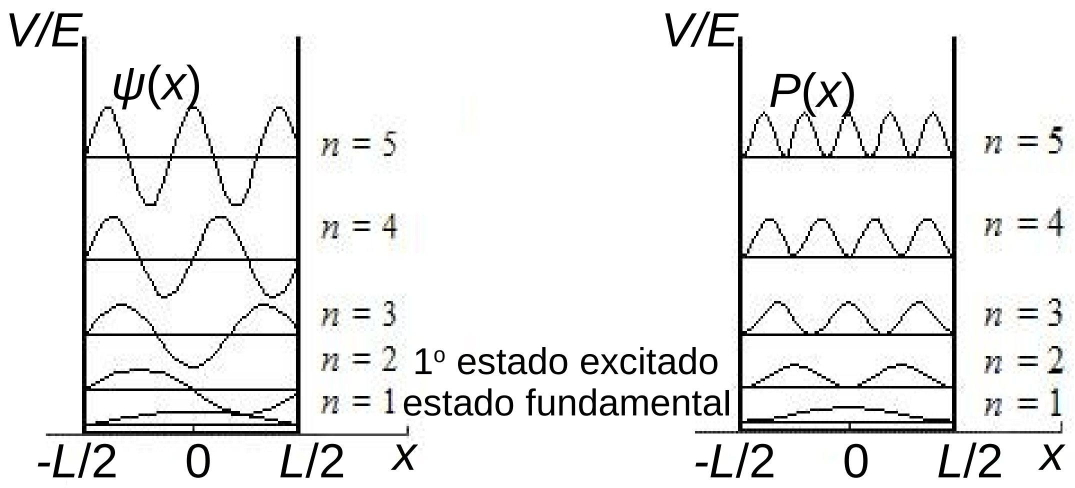
$$\int_{-\infty}^{\infty} P_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2\, dx = \cancel{\int_{-\infty}^{0} 0\cdot 0\, dx} + \int_0^L A_n^{\,2}\cdot \text{sen}^2\, k_n x\, dx + \cancel{\int_L^{\infty} 0\cdot 0\, dx}$$

$$= A_n^{\,2}\cdot \int_0^L \text{sen}^2\, n\pi x/L\, dx = A_n^{\,2}\cdot L/2 = 1$$

=> $A_n = \sqrt{2/L}$

O Poço Quadrado Infinito

Às vezes é mais prático colocar o ponto 0 do eixo x no centro do poço.



Assim, as soluções viram:

$$\left.\begin{array}{ll} \psi_n(x) = \pm\sqrt{2/L}\cdot\text{sen}\, k_n x, & \text{para } -L/2 < x < L/2 \\ 0 & \text{para } x < -L/2 \text{ ou } x > L/2 \end{array}\right\} n \text{ par}$$

$$\left.\begin{array}{ll} \psi_n(x) = \pm\sqrt{2/L}\cdot\cos k_n x, & \text{para } -L/2 < x < L/2 \\ 0 & \text{para } x < -L/2 \text{ ou } x > L/2 \end{array}\right\} n \text{ impar}$$

Os valores de k_n e E_n obviamente não mudam numa transformação de coordenadas: $k_n = n\pi/L$, $E_n = n^2E_1$, $E_1 = \pi^2\hbar^2/2mL^2$

O Poço Quadrado Infinito

Comparação com os Resultados Clássicos

Para energias "macroscópicas": $E >> E_1$,

=> $n = \sqrt{(E/E_1)} >> 1$,

a diferença de energia entre níveis vizinhos é

$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (n + 1)^2 E_1 - n^2 E_1 = (2n + 1)\cdot E_1 \approx 2nE_1 = 2E_1\sqrt{(E/E_1)}$

$= 2\sqrt{(E_1/E)}\cdot E << E$

=> quantização da energia imperceptível

E o comprimento de onda

(que equivale a duas vezes a distância entre dois picos de $P(x)$):

$\lambda = hc/E = 2L/n << L$: também imperceptível

A probabilidade de encontrar a partícula numa dada posição é igual em todas as posições dentro do poço, já que a amplitude da função de onda é igual em todas as posições.

=> O Princípio de Correspondência é satisfeito.

Regras de Seleção

Transições entre níveis de Energia

(sem dedução)
Uma transição entre um estado n (ψ_n, E_n) e um estado m (ψ_m, E_m) só é possível, se a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)^* \, x \, \psi_m(x) dx$$

chamada elemento de matriz é diferente de zero:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)^* \, x \, \psi_m(x) dx \neq 0$$

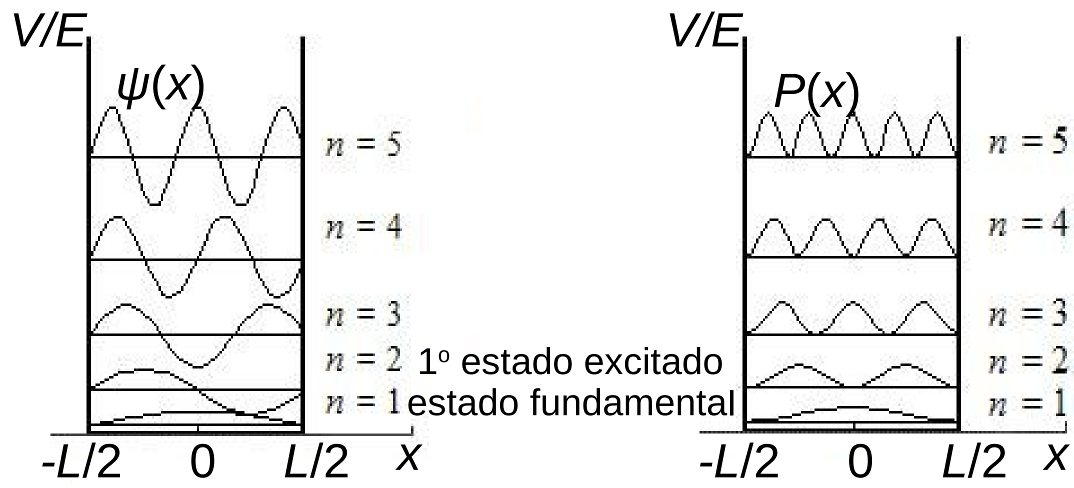
Uma limitação de transições possíveis deste tipo se chama regra de seleção.

Regras de Seleção

No exemplo do poço inifinito temos:

$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)^* \, x \, \psi_m(x) dx = 0$ para

- *n* e *m* ambos sendo números pares, ou
- ambos sendo números impares

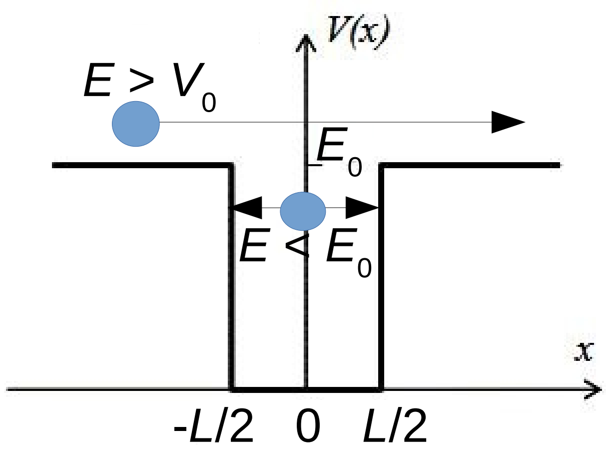


(Isto é mais facilmente mostrado colocando o ponto zero no centro do poço)

=> Só transições com Δn impar podem acontecer.

O Poço Quadrado Finito

É como o poço quadrado infinito, mas com paredes de altura finita:



$V(x) = 0$ para $-L/2 < x < L/2$,
E_0 para $x < -L/2$ ou $x > L/2$

! Agora o sistema de coordenadas é escolhido tal, que $x = 0$ fica no meio do poço.

Caso Clássico

- $E < E_0$: Partícula movimentando-se ida e volta entre $x = -L/2$ e $x = L/2$ com velocidade constante, $v = \pm\sqrt{2E/m}$, sendo refletida nas paredes do poço (mesmo comportamento que no poço infinito).

- $E > E_0$: Partícula movimentando-se até chegar no poço com $v = \pm\sqrt{2(E-E_0)/m}$, atravessando o poço com $v = \pm\sqrt{2E/m}$, e continuando na mesma direção com a velocidade inicial.

O Poço Quadrado Finito

Caso Quântico

Solução ($E < E_0$):

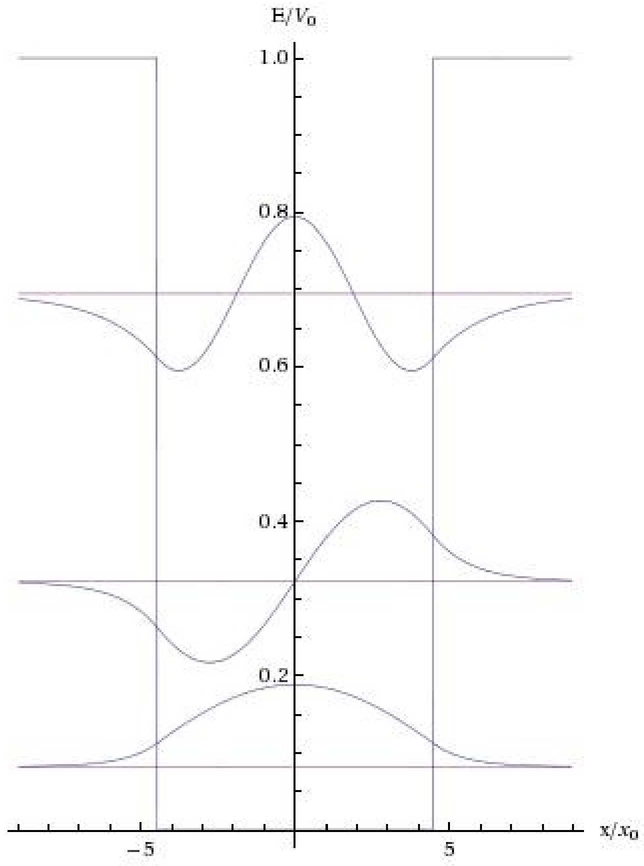
$\psi_n(x) = A\cdot\text{sen/cos}\, k_n x$, onde $k_n = \pm\sqrt{2mE_n}/\hbar$

para $-L/2 < x < L/2$

$B\cdot e^{\alpha x}$, onde $\alpha = \sqrt{2m(E_0 - E_n)}\,/\,\hbar$

para $x < -L/2$

$\pm B\cdot e^{-\alpha x}$ para $x > L/2$



As condições, que ψ e ψ' devem ser contínuas em $x = -L/2$ e $x = L/2$,
e que a função tem que ser normalizável (tender a zero para x -> ±∞) fazem,
que apenas certos valores de E são possíveis.

=> De novo, quantização.

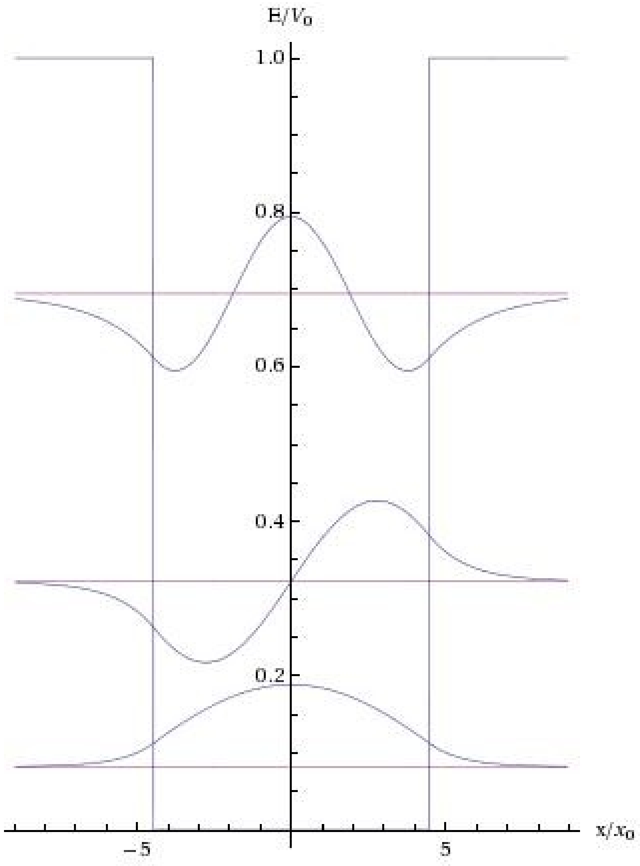
O Poço Quadrado Finito

Caso Quântico

A função de onda "penetra" um pouco nas regiões classicamente "proibidas" ($E < E_0$), isto é, a partícula se encontra lá com uma probabilidade não-nula!

O princípio de indeterminação torna isto possível.

Por isto, no poço finito cabe uma onda com comprimento de onda um pouco maior, do que num poço infinito do mesmo tamanho.

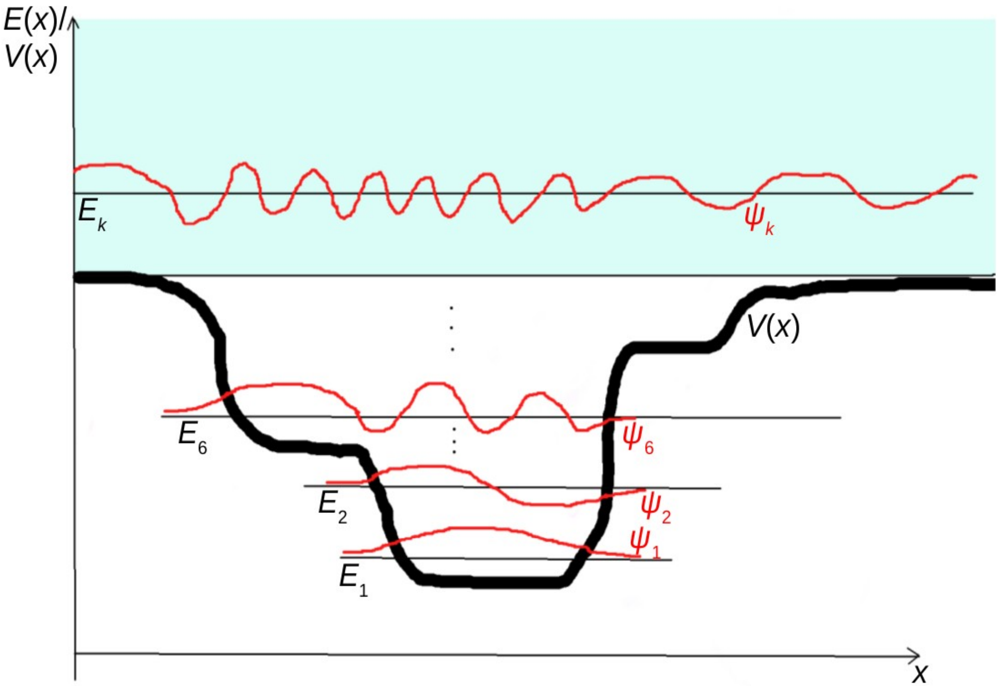


=> As energias E_n são um pouco menores que no poço infinito.

(Não tratamos o caso $E > E_0$ aqui)

“Receita de Bolo”

Dado $V(x)$ => Procurar combinações $\psi(x)$, E (resolver a E. d. S.)



Para $E > V(-\infty)$ e/ou $E > V(+\infty)$:
estado “livre”,
espectro contínuo de energias

Para $E < V(-\infty)$ e $E < V(+\infty)$,
“poço de potencial”:
estado ligado,
níveis de energia quantizados

Para $E < V_{min}$ não há solução

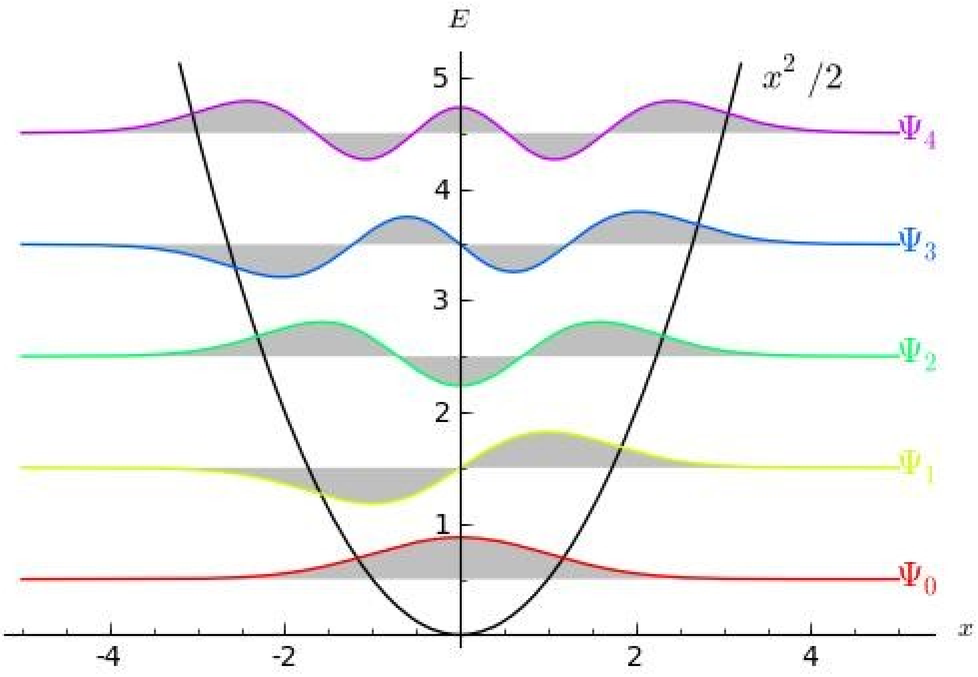
Em regiões, onde:

- $E > V(x)$ (classicamente “permitido”)
  => sinal de $\psi''/\psi = 2m(V-E)/\hbar^2$ negativo:
  $\psi(x)$ oscilatório, cos/sen kx, ou $e^{\pm ikx}$, onde $k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$ ($\lambda = 2\pi/k$)
- $E < V(x)$ (classicamente “proibido”) => sinal de ψ''/ψ positivo:
  $\psi(x)$ exponencial, $e^{\pm\alpha x}$, onde $\alpha = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$
- $V(x) = \infty$: $\psi(x) = 0$

Física Quântica

FIM PARA HOJE

Universidade Federal do ABC



http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html