Aula 9
Mais ondas de matéria I

Física Geral F-428

Resumo da aula passada:

- Dualidade onda-partícula e o princípio da complementaridade;
- Comprimento de onda de de Broglie: $\lambda = h/p$
- Função de onda $\Psi(x,y,z,t)$
- A função de onda que descreverá a partícula é uma solução de uma equação diferencial: a equação de Schrödinger:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) + U(\vec{\mathbf{r}})\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}$$

- De função de onda obteremos a densidade de probabilidade de encontrar a partícula $\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$

Radiação Eletromagnética

ondas

$$\vec{E}(x,y,z,t) = \vec{E}_0 \sin\left(\vec{k}.\vec{r} - \omega t\right)$$

$$\vec{E}(x,y,z,t) = \vec{E}_0 \sin(kx - \omega t)$$

$$vetor\ de\ Poyting\ \vec{S}, intensidade\ I$$

fótons

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Partículas

???????

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Introduzimos a função de onda

$$\Psi\left(x, y, z, t\right) \quad ,$$

a qual é uma solução de uma equação diferencial,

a equação de Schrödinger.

A função de onda $\Psi(x,y,z,t)$:

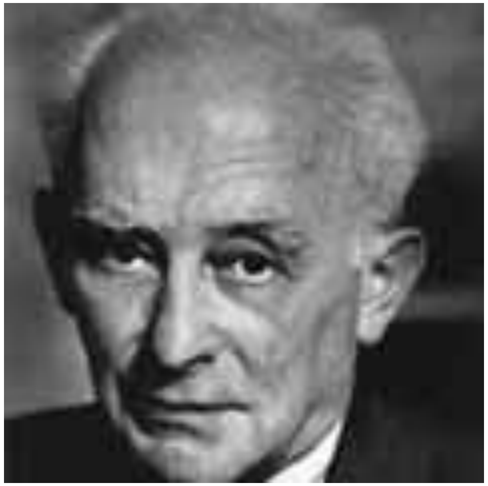
- Uma partícula microscópica será descrita pela chamada ***função de onda*** $\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)$, também chamada ***amplitude de probabilidade*** **,** à qual podemos aplicar:

  - ***Princípio da superposição:***

$$\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)=\Psi_1(\vec{\mathbf{r}},t)+\Psi_2(\vec{\mathbf{r}},t)$$

  - ***Interpretação probabilística*: (*Max Born*)**

Max Born



Densidade de probabilidade:

$$\rho(\vec{\mathbf{r}},t)=|\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)|^2$$

Condição de normalização:

$$\int_V \rho(\vec{r},t)\,d^3r=1$$

A função de onda carrega a informação máxima que podemos ter sobre o sistema em questão.

A equação de Schrödinger

Erwin Schrödinger
prêmio Nobel: 1933

• Embora tenha obtido alguns sucessos notáveis, a teoria quântica desenvolvida entre 1900 ~ 1920 tinha sérios defeitos. Era uma mistura arbitrária de física clássica com novos postulados, alheios e contraditórios à própria física clássica.

• Em 1926, Schrödinger foi convidado a dar um seminário na Universidade de Zurique sobre a teoria de ***de Broglie*.**

Durante o seminário, um dos ouvintes perguntou como ele podia falar abertamente sobre uma onda associada ao elétron, se não havia nenhuma equação de onda !

Alguns meses depois, Schrödinger apresentou a equação de onda, dando início à ***Mecânica Quântica moderna***.

A equação de Schrödinger

• Os fenômenos ondulatórios, independentemente da sua origem, têm a sua **evolução temporal** descrita por equações de onda do tipo:

$$\boxed{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{F}(\vec{r},t)}{\partial t^2} - \nabla^2 \vec{F}(\vec{r},t) = 0}$$

onde $\vec{F}(\vec{r},t)$ é a variável dinâmica de interesse; por exemplo, o campo elétrico ou o campo magnético de uma onda eletromagnética.

• Se quisermos investigar a evolução temporal da densidade de probabilidade $\rho(\vec{\boldsymbol{r}},t) = |\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)|^2$, devemos estudar como $\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)$ varia no tempo. No que segue, vamos fazer essa análise apenas para ***partículas com massa***!

A equação de Schrödinger

Em geral, podemos dizer que para uma **onda plana** temos:

$$\boxed{\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = \Psi_0 \, exp\, i(\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{r}} - \omega t)}$$

Derivando $\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)$ com relação a t :

$$\frac{\partial \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}{\partial t} = -i\omega \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)$$

Tomando o gradiente de $\Psi\left(\vec{\mathbf{r}},t\right)$, e depois a sua divergência:

$$\vec{\nabla}\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = i\vec{\mathbf{k}}\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) \;\; \Rightarrow$$

$$\vec{\nabla}\cdot[\vec{\nabla}\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)] = \nabla^2\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = -\mathbf{k}^2\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)$$

A equação de Schrödinger

Então:

$$\begin{cases} \boxed{\dfrac{\partial \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}{\partial t} = -i\omega \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)} \rightarrow \\ i\hbar \dfrac{\partial \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}{\partial t} = \hbar\omega \Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = E\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \boxed{\nabla^2 \Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = -\boldsymbol{k}^2 \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)} \rightarrow \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = \dfrac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m} \Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = E\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) \end{cases}$$

Equação de Schrödinger da partícula livre ($E = E_{cin}$; $U = 0$) :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}$$

A equação de Schrödinger

Mas, no caso geral, não–relativístico: $E = E_{cin} + E_{pot} = E_{cin} + U$

$$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U(\vec{\mathbf{r}}) \quad \Rightarrow \quad \boxed{E\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) + U(\vec{\mathbf{r}})\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}$$

$$\Downarrow$$

Equação de Schrödinger :

(***Postulada!***)

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) + U(\vec{\mathbf{r}})\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}$$

Erwin Schrödinger
(1887-1961)

(Equação de Schrödinger dependente do tempo)

A equação de Schrödinger

Os casos que vamos tratar aqui ⇒ Onda de variáveis separáveis:

(casos de E constante)

$$\Psi(\vec{\mathbf{r}},t) = \psi(\vec{\mathbf{r}})exp(-i\omega t)$$

Substituindo essa expressão na Equação de Schrödinger:

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

e cancelando as exponenciais dependentes do tempo, obteremos:

$$\hbar\omega\psi(\vec{\mathbf{r}}) = E\psi(\vec{\mathbf{r}}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\mathbf{r}}) + U(\vec{\mathbf{r}})\psi(\vec{\mathbf{r}})$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\mathbf{r}}) + \left[E - U(\vec{\mathbf{r}})\right]\psi(\vec{\mathbf{r}}) = 0$$

(Equação de Schrödinger independente do tempo)

A partícula livre em 1-D

Para encontrar a solução geral de:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\mathbf{r}},t)+U(\vec{\mathbf{r}})\psi(\vec{\mathbf{r}},t)$$

$$\Psi\left(\vec{\mathbf{r}},t\right)=\psi\left(\vec{\mathbf{r}}\right)exp(-i\omega t)$$

devemos resolver inicialmente:

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\times\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\left[E-U(x)\right]\psi(x)\right)\quad;\quad U(x)=0$$

$$\boxed{\begin{array}{c}\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0\quad;com\quad k^2=\dfrac{2m(E-U)}{\hbar^2}=\dfrac{2mE}{\hbar^2}\\[2ex] como\quad U(x)=0\quad\rightarrow\quad E=E_{cin}\end{array}}$$

A partícula livre em 1-D

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0$$

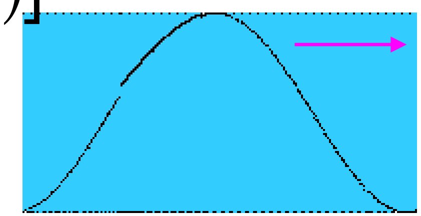
Solução geral: $\psi(x)=A\exp(ikx)+B\exp(-ikx)$

como: $\exp(\pm i\theta)=\cos\theta\pm i\sin\theta$ →

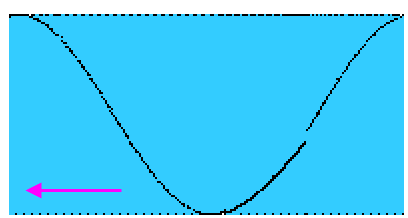
$$\psi(x)=A'\cos kx+B'\sin kx\ ;\ com\ \ A'=(A+B)\ ;\ \ B'=i(A-B)$$

$$\Psi(\vec{\mathbf{r}},t)=A\exp\left[i\left(kx-\omega t\right)\right]+B\exp\left[-i\left(kx+\omega t\right)\right]$$

$\Psi\left(x,t\right)\propto exp\left[i\left(kx-\omega t\right)\right]$ → Onda propagante para a direita:



$\Psi\left(x,t\right)\propto exp\left[-i\left(kx+\omega t\right)\right]$ → Onda propagante para a esquerda:



A partícula livre em 1-D

$$\psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$$

Façamos: $A = \psi_0$ e $B = 0$ $\Rightarrow$ $\psi(x) = \psi_0 \exp(ikx)$

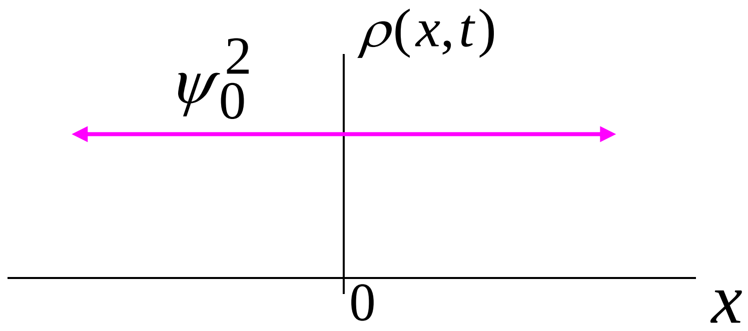
e $\quad \Psi(x,t) = \psi_0 \exp i(kx - \omega t) \quad onde \quad \omega = \omega(k) = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$

pois: $\quad \hbar\omega = \dfrac{p^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

A densidade de probabilidade para encontrar a partícula será:

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^*\psi = \psi_0^2 = constante! \quad para \ -\infty < x < +\infty$$

- Ou seja: uma partícula livre pode ser encontrada em qualquer ponto sobre o eixo *x*, com a mesma probabilidade.



O princípio da incerteza de Heisenberg

- É inerente à Mecânica Quântica e se aplica sempre aos pares das chamadas variáveis incompatíveis. Essas são variáveis que não podem ser medidas **simultaneamente com precisão ilimitada**!
  - Ex.: a posição e o momento linear de uma partícula quântica:

Em 3-D:

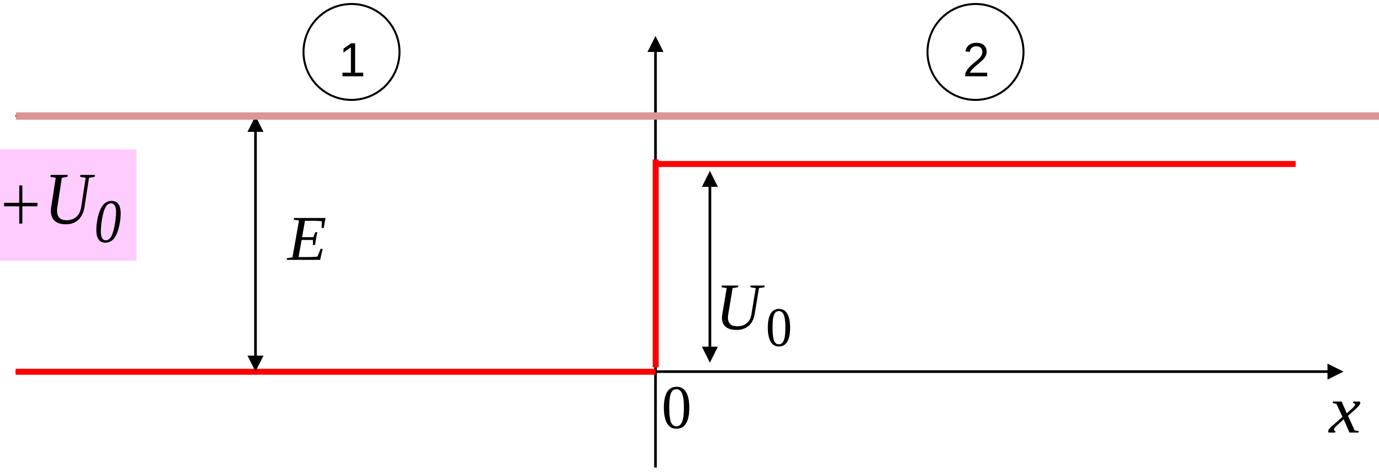
$$\begin{cases} \Delta x\, \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta y\, \Delta p_y \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta z\, \Delta p_z \geq \dfrac{\hbar}{2} \end{cases}$$

Werner Heisenberg (1901- 1976)

O potencial degrau

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad ; \, onde \quad k^2 = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}$$

$$E = E_{cin} + U_0$$



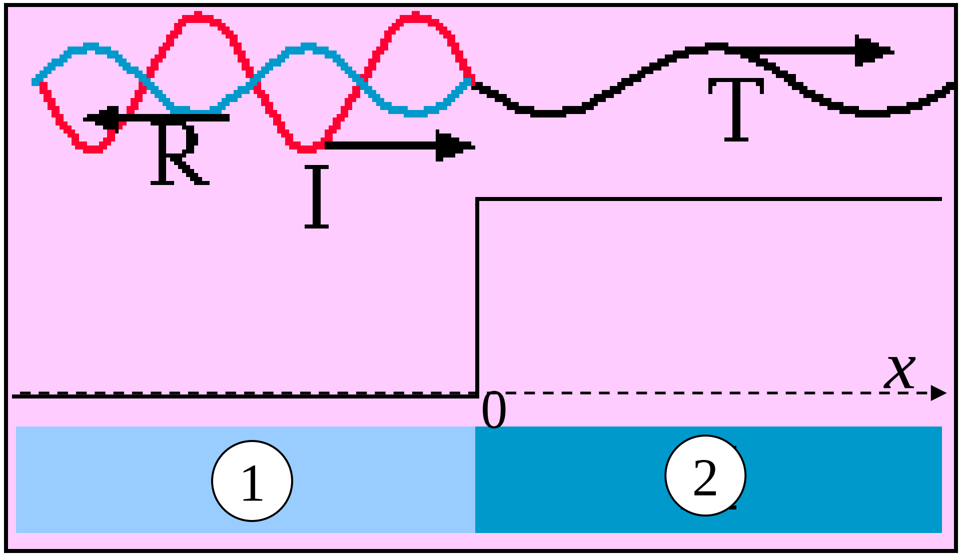
I) $E > U_0$:

$$se \;\; x < 0; \quad \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0 \quad ; \, onde \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$se \;\; x > 0; \quad \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_2(x) = 0 \, ; \, onde \quad k_2^2 = \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$$

O potencial degrau

$E > U_0:$



Soluções gerais:

$$x < 0: \quad \psi_1(x) = A\,exp(ik_1x) + B\,exp(-ik_1x) \quad ; onde \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

I R

$$x > 0: \quad \psi_2(x) = C\,exp(ik_2x) + D\,exp(-ik_2x) \quad ; onde \quad k_2^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}$$

T R

mas : $D = 0$, pois não há onda refletida para $x > 0$.

O potencial degrau

- Como ψ e $\dfrac{d\psi}{dx}$ são funções contínuas : $\begin{cases} \psi(x=0^-) = \psi(x=0^+) \\ \left[\dfrac{d\psi}{dx}\right]^{x=0^-} = \left[\dfrac{d\psi}{dx}\right]^{x=0^+} \end{cases}$

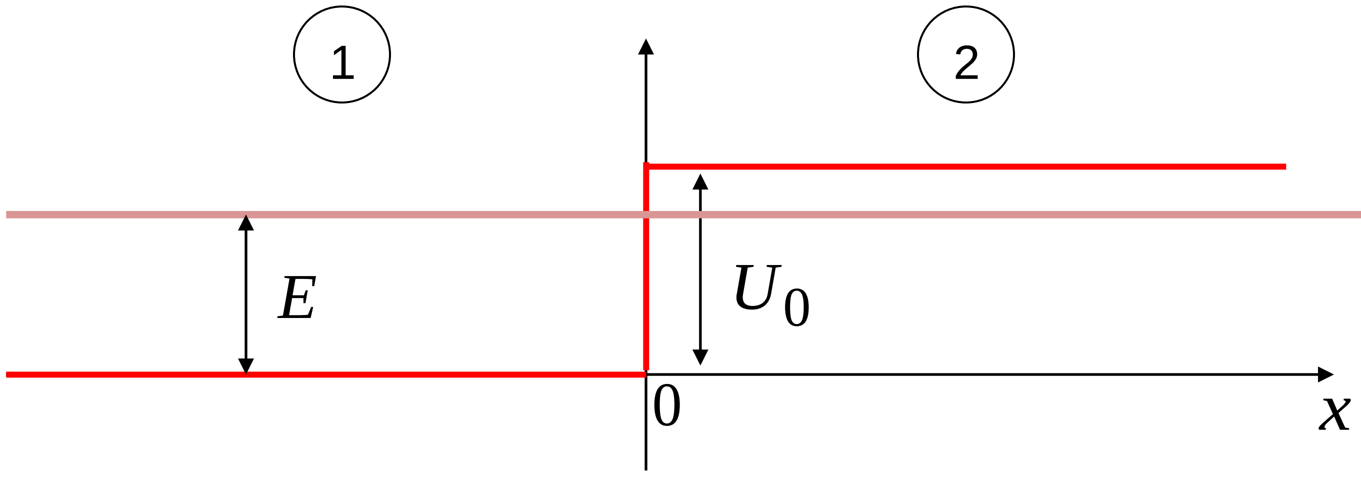
O que leva a: $\begin{cases} \dfrac{B}{A} = \dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} & \text{; amplitude de reflexão} \\ \dfrac{C}{A} = \dfrac{2k_1}{k_1 + k_2} & \text{; amplitude de transmissão} \end{cases}$

E poderemos definir:

$$\left.\begin{aligned} R &= -\frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{inc}}} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \\ T &= \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{R + T = 1}$$

O potencial degrau

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \quad ;\, onde \quad k^2=\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}$$



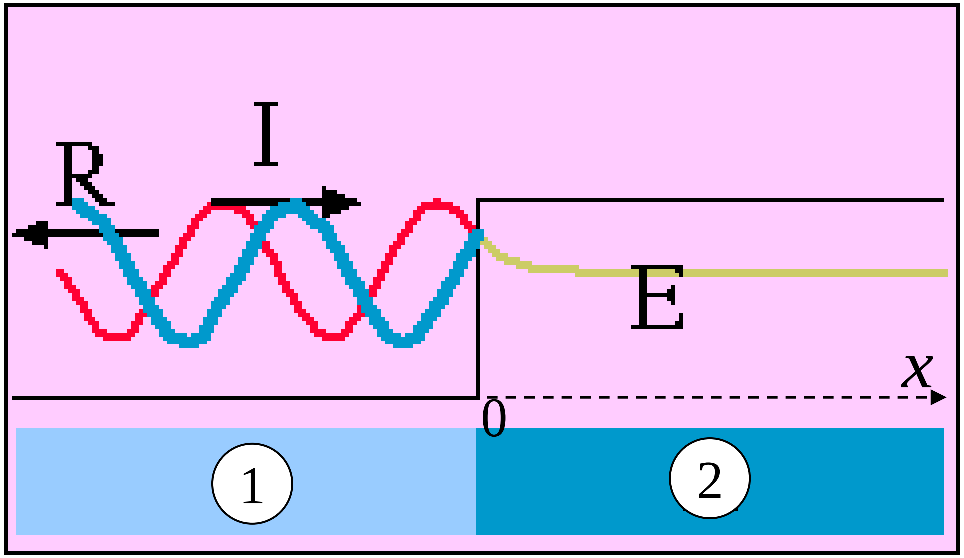
II) $E < U_0$:

$$se\ \ x<0; \quad \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+k_1^2\psi_1(x)=0 \quad ;onde \quad k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$se\ \ x>0; \quad \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-\kappa_2^2\psi_2(x)=0 \quad ;onde \quad \kappa_2^2=\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$$

O potencial degrau

$E < U_0$:



$$x < 0: \quad \psi_1(x) = A\,exp(ik_1x) + B\,exp(-ik_1x) \quad ;\ onde \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$x > 0: \quad \psi_2(x) = C\,exp(-\kappa_2 x) + \cancelto{0}{D}\,exp(\kappa_2 x) \ ;onde: \quad \kappa_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

O potencial degrau

- $Como\ \psi\ e\ \dfrac{d\psi}{dx}\ são\ funções\ contínuas\ \rightarrow$

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2}$$; amplitude de reflexão

$$R = -\frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{inc}}} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{BB^*}{AA^*} = 1 \quad ; \qquad T = 0$$

$$\psi_2(x) = C\,exp(-\kappa_2 x) \Rightarrow$$

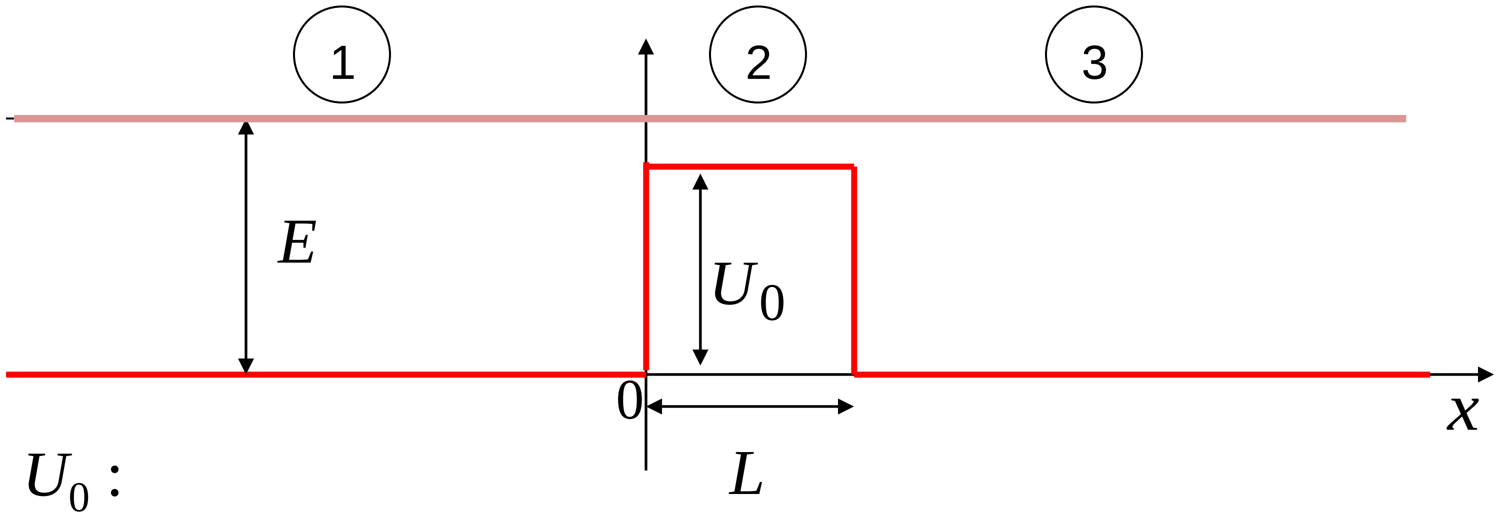
$$\boxed{L = \kappa_2^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}}$$

Comprimento de penetração

wavemechanics-step

A barreira de potencial

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \quad ; onde \quad k^2=\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}$$



I) $E > U_0$:

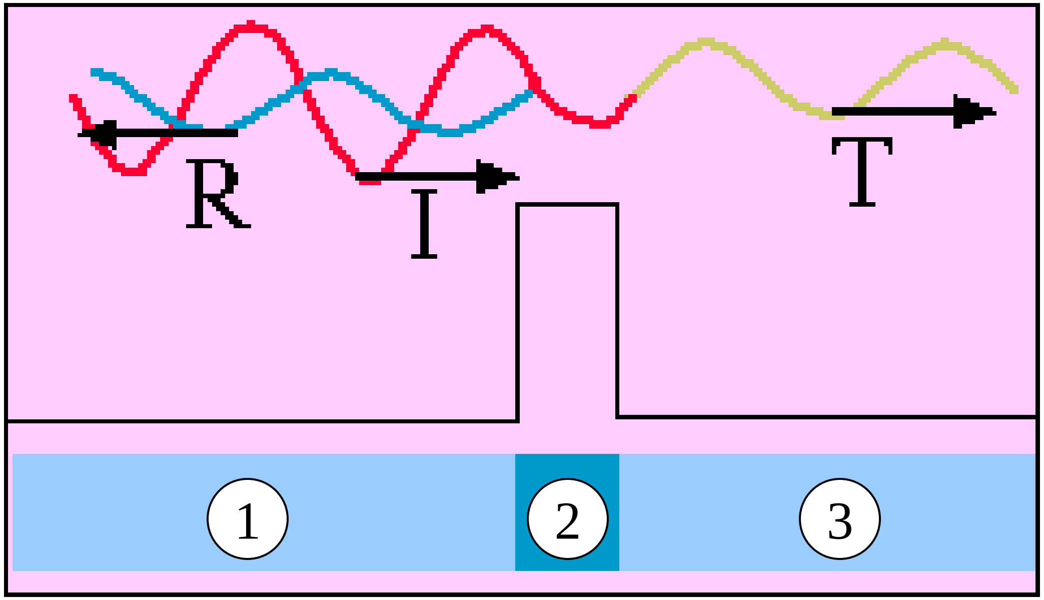
$$se\ x<0; \quad \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+k_1^2\psi_1(x)=0 \quad ; onde \quad k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$se\ L>x>0; \quad \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+k_2^2\psi_2(x)=0 \quad ; onde \quad k_2^2=\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$$

$$se\ x>L; \quad \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+k_3^2\psi_3(x)=0 \quad ; onde \quad k_3^2=k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

A barreira de potencial

$E > U_0$:



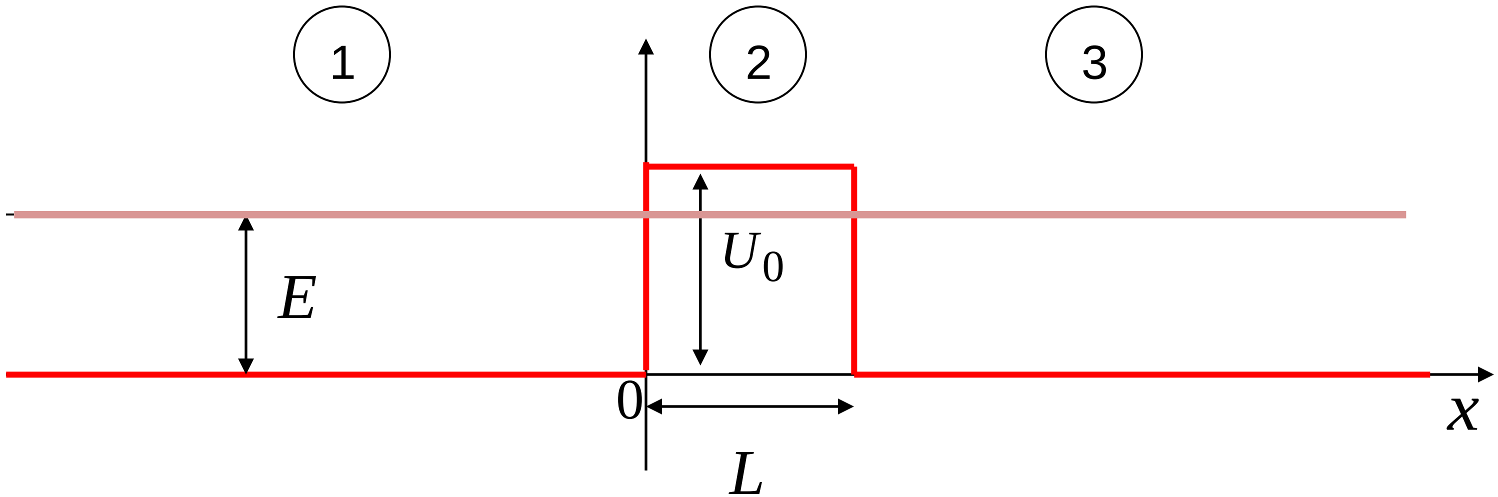
$$\psi_1(x) = A\,exp(ik_1x) + B\,exp(-ik_1x) \quad ; onde \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi_2(x) = C\,exp(ik_2x) + D\,exp(-ik_2x) \quad ; onde \quad k_2^2 = \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$$

$$\psi_3(x) = E\,exp(ik_3x) + \underbrace{F}_{0}\,exp(-ik_3x) \quad ; onde \quad k_3^2 = k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

A barreira de potencial

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \quad ; onde \quad k^2=\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}$$



II) $E < U_0$:

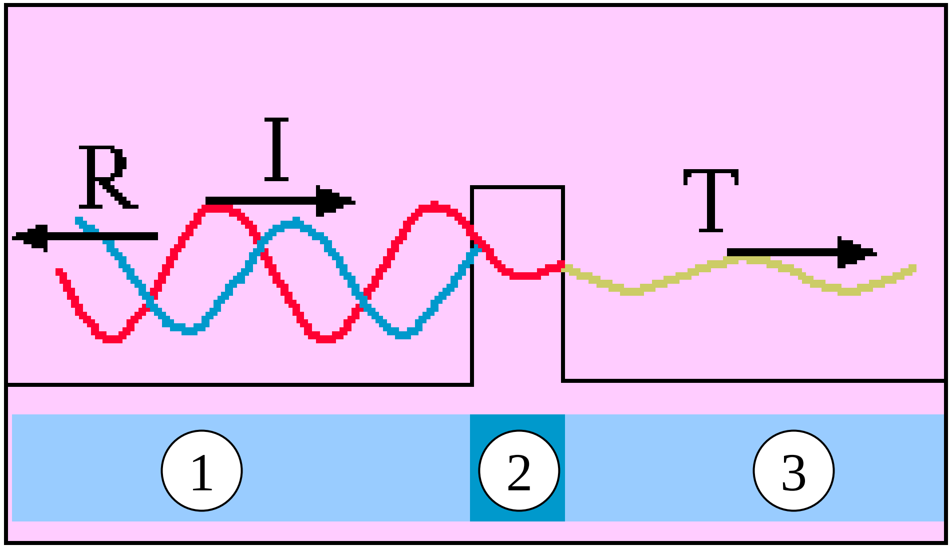
$$se\ \ x<0; \quad \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+k_1^2\psi_1(x)=0 \quad ;onde \quad k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$se\ \ L>x>0; \quad \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}-\kappa_2^2\psi_2(x)=0 \quad ; onde \quad \kappa_2^2=\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$$

$$se\ \ x>L; \quad \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+k_3^2\psi_3(x)=0 \quad ;onde \quad k_3^2=k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

A barreira de potencial

$E < U_0$:



$$\psi_1(x) = A\exp(ik_1x) + B\exp(-ik_1x) \quad ; onde \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\psi_2(x) = C\exp(-\kappa_2x) + D\exp(\kappa_2x) \quad ; onde \quad \kappa_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\psi_3(x) = E\exp(ik_3x) + \cancel{F}\exp(-ik_3x) \quad ; onde \quad k_3^2 = k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

0

A barreira de potencial

- $Como \;\; \psi \;\; e \; \dfrac{d\psi}{dx} \;\; são \;\; funções \;\; contínuas \; \rightarrow$

Coeficiente de transmissão ou taxa de tunelamento: $T = \dfrac{EE^*}{AA^*}$

$$\boxed{T \approx [\exp(-\kappa L)]^2 = \exp(-2\kappa L) \quad ; \quad \text{onde} \;\; \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}}$$

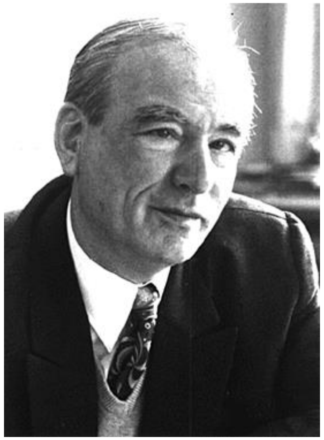
$$R = 1 - T \approx 1 - \exp(-2\kappa L)$$

Coeficiente de reflexão

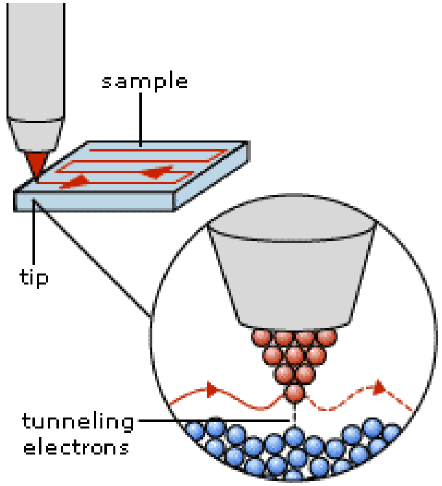
wavemechanics-barrier

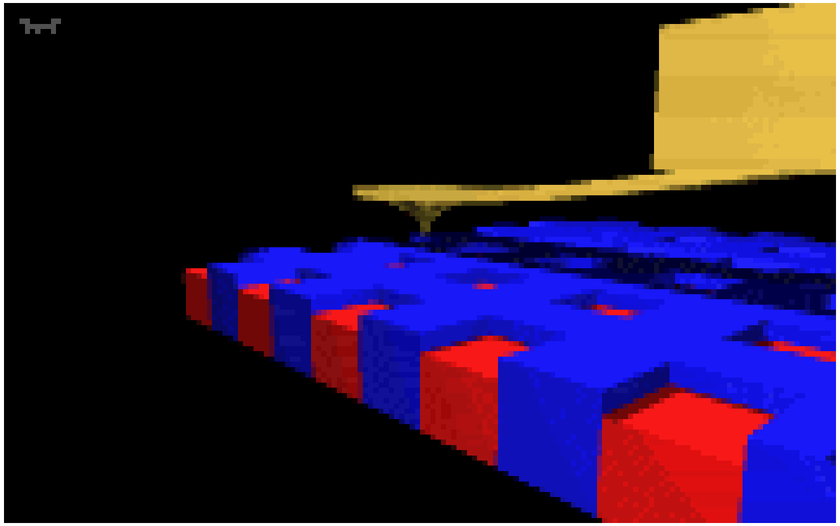
O microscópio de varredura

Prêmio Nobel 1986:
Heinrich Rohrer, Gerd
Binnig e Ernst Ruska



E. Ruska





[wavemechanics-stm]

Até agora...

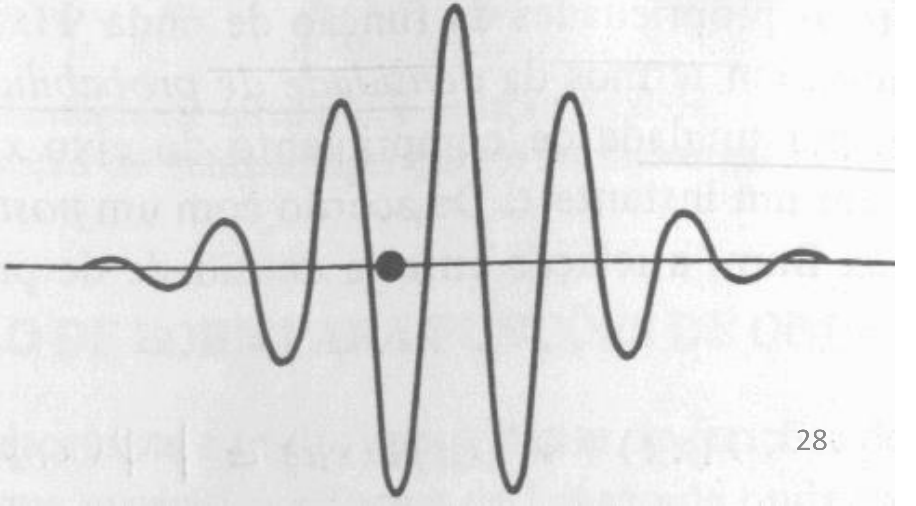
Vimos, até agora, três postulados da Mecânica Quântica:

a) Toda partícula possui uma função de onda $\Psi(x,y,z,t)$ associada a ela.

b) A forma e a evolução temporal desta $\Psi(x,y,z,t)$ é determinada pela equação de Schrödinger.

c) Em uma dimensão, dada a função $\Psi(x,t)$, a densidade de probabilidade da partícula ser encontrada em torno de um ponto x *(entre x e $x+dx$)*, **num dado instante t**, é dada por:

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$



A Equação de Schrödinger e a Quantização de Energia

- Para uma *partícula clássica confinada* a uma região limitada do espaço, a teoria de Schrödinger prevê que a *energia total da partícula é quantizada*.

- Quando a partícula *não estiver confinada* em uma região limitada, a teoria prevê que a sua *energia total pode apresentar qualquer valor*.

Elétron confinado

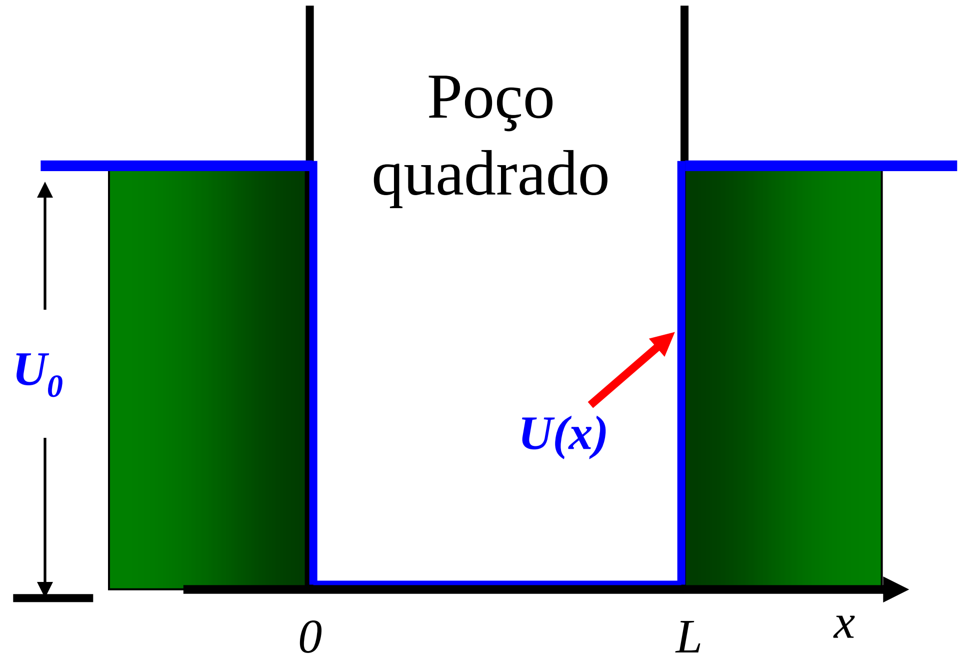
• O confinamento de uma onda leva à quantização, ou seja, à existência de estados ligados discretos, com energias discretas.

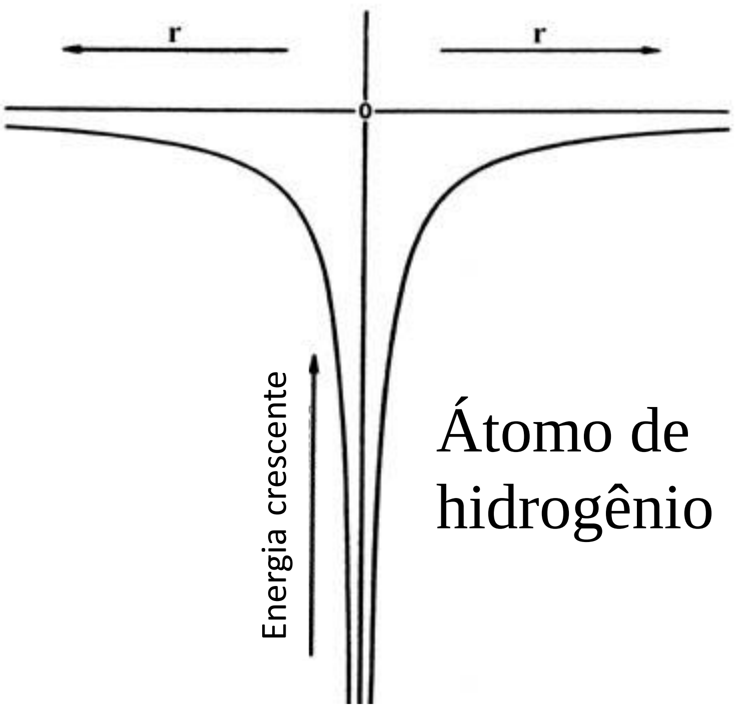
Analogia:

Ondas estacionárias em uma corda ⟷ estados estacionários

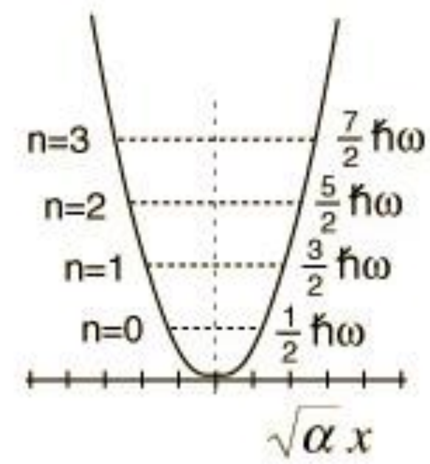
Exemplos de Potenciais:

- Armadilhas em 1, 2 e 3 dimensões.
- Átomos.





Átomo de hidrogênio



Potencial do oscilador harmônico

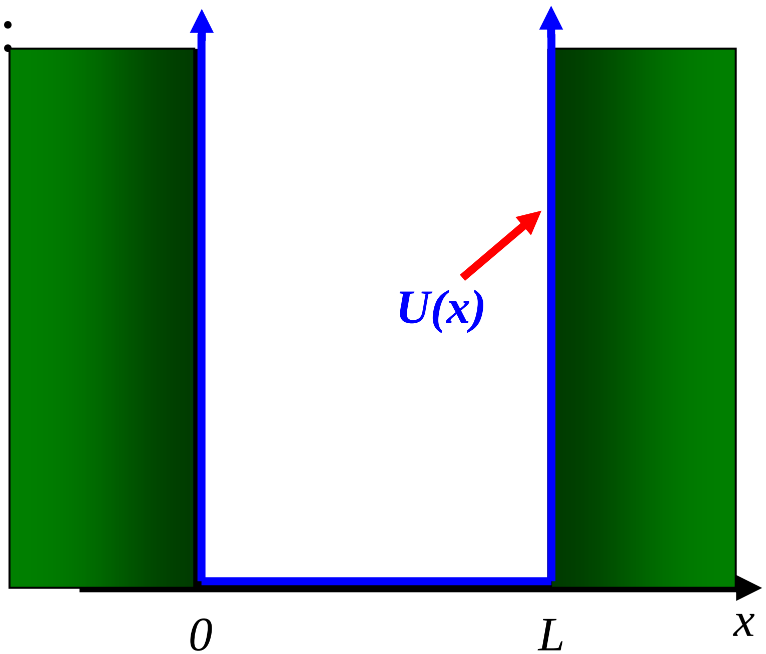
No caso de partícula confinada: Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\mathbf{r}}) + \left[E - U\left(\vec{\mathbf{r}}\right)\right]\psi(\vec{\mathbf{r}}) = 0}$$

Sempre que $E - U(\vec{\mathbf{r}}) < 0$ ➡ teremos estados ligados que são quantizados: apenas estados com certas energias são possíveis.

Partícula em uma "Caixa"(="poço")

Vamos resolver a equação de Schrödinger para uma partícula confinada a uma caixa de paredes "impenetráveis". Isto é, uma partícula sujeita a um potencial de forma:



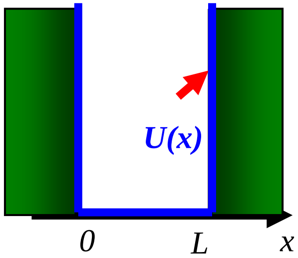
$U(x) = 0$, para $0 < x < L$

$U(x) = \infty$, para $x < 0$ ou $x > L$

• Como o **potencial é infinito**, a partícula deve se encontrar rigorosamente no interior da caixa, portanto, devemos ter:

$\psi(x) = 0$, para $x = 0$ e $x = L$ (***condição de contorno***).

$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\mathbf{r}})+[E-U(\vec{\mathbf{r}})]\psi(\vec{\mathbf{r}})=0}$$



No interior da caixa: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=E\psi(x)$$

ou: $$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=-k^2\psi(x) \quad ; \quad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

A solução geral desta equação pode ser escrita como:

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

A condição de contorno: $\psi(0)=0$ $\longrightarrow$ $\psi(x)=A\,\mathrm{sen}\,kx$

A condição de contorno: $\psi(\mathrm{L})=0$:

$$\psi(L)=A\,\mathrm{sen}\,kL=0 \longrightarrow kL=n\pi \longrightarrow \boxed{k_n=\frac{n\pi}{L}}$$

Escrita em termos dos comprimentos de onda:

Veja que $L = n\lambda/2$

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = n\frac{\pi}{L} \quad \Rightarrow \quad \lambda_n = \frac{2L}{n}; \quad n = 1, 2, \ldots$$

que corresponde à condição de formação de ondas estacionárias.

As funções de onda serão dadas por:

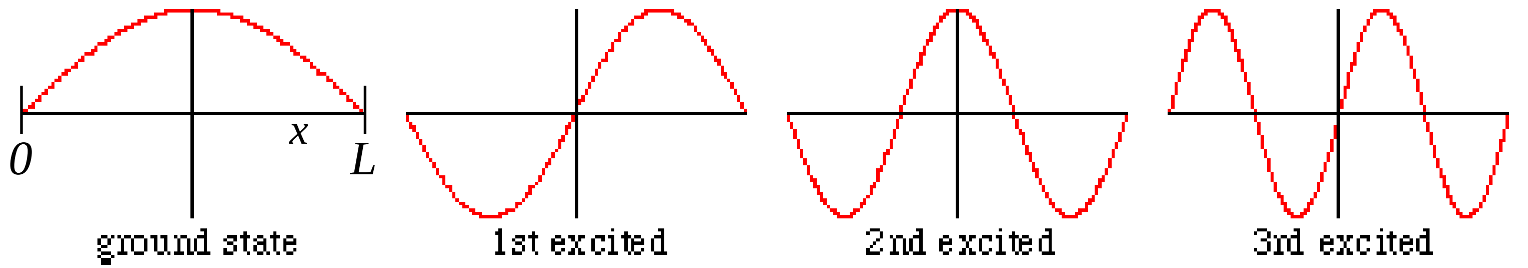
$$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen}(k_n x) = A_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

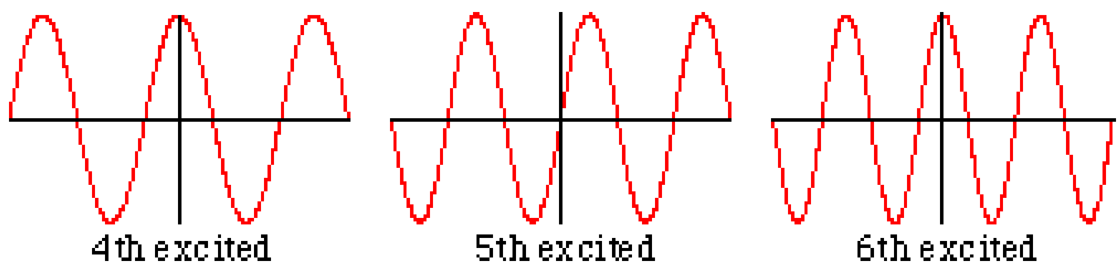
- Para cada n temos uma $\psi_n(x)$; onde n é um ***número quântico***.
- Como temos um *sistema unidimensional*, $\psi_n(x)$ é completamente determinada por *apenas um número quântico*.

Funções de onda

$$\psi_n(x) = A_n \mathrm{sen}(k_n x) = A_n \mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

$n=1$ $\quad$ $n=2$ $\quad$ $n=3$ $\quad$ $n=4$





$n=5$ $\quad$ $n=6$ $\quad$ $n=7$

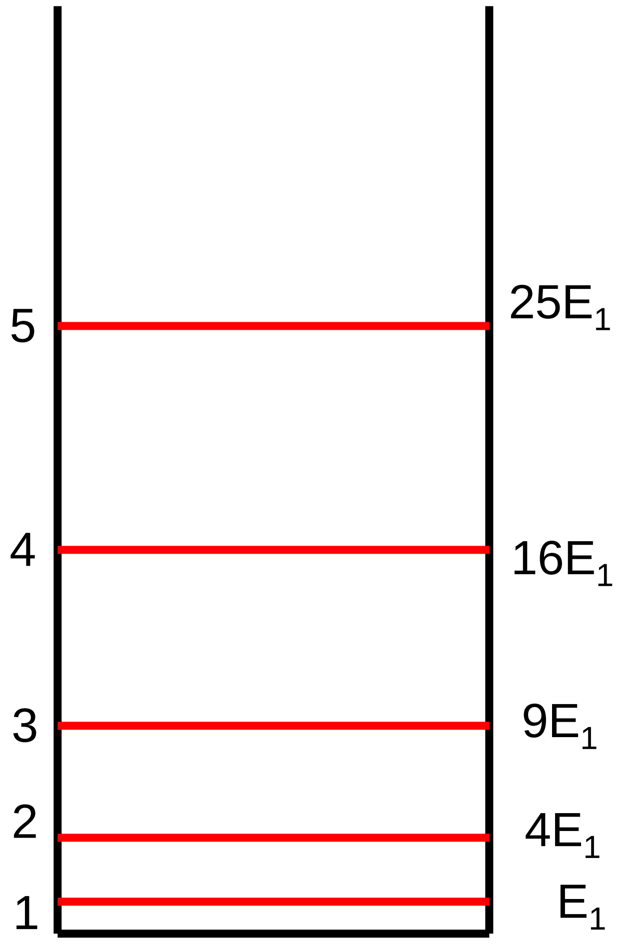
$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$

As energias (cinéticas) associadas a estas funções são dadas por:

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

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

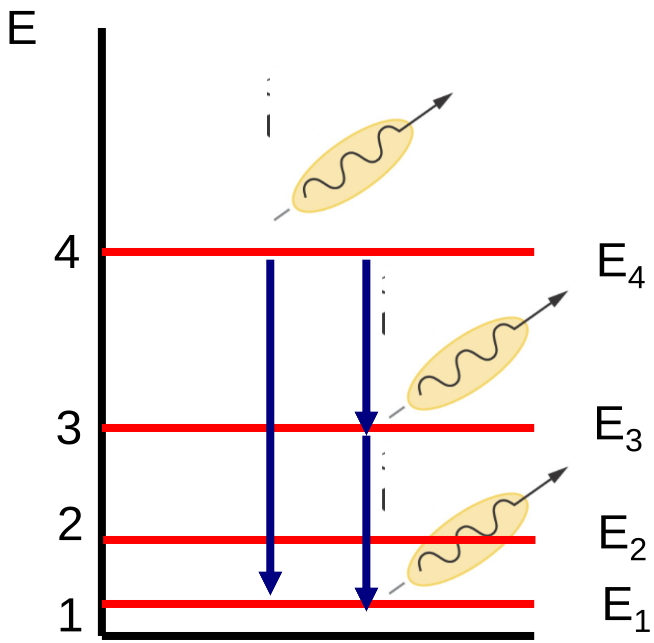
$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) n^2}$$



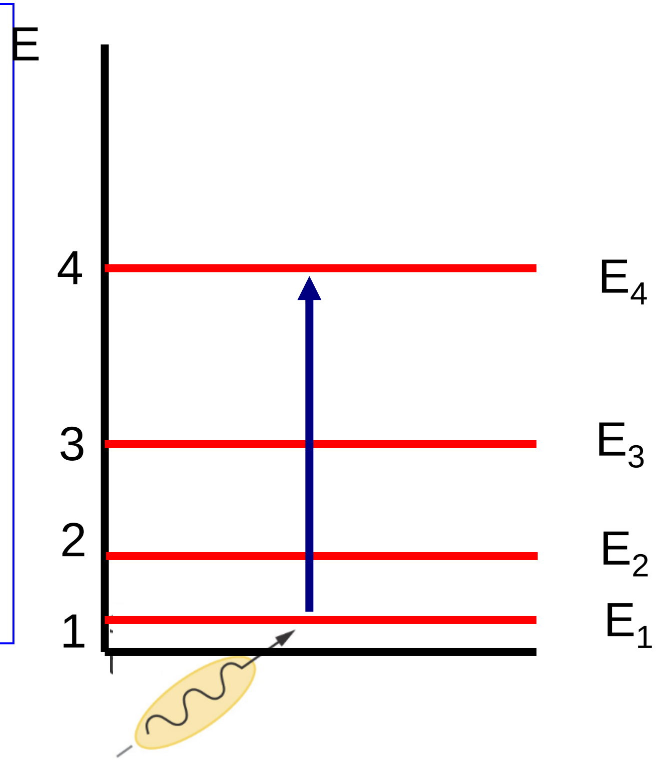
• O sistema pode passar de um estado *n* para um *n'*, de energia menor, emitindo um fóton de frequência ν:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{h^2}{8mL^2}\right) n^2$$

$$h\nu = \Delta E = E_n - E_{n'}$$



O sistema pode também sofrer uma transição para um estado de energia maior, absorvendo um fóton.



O estado de energia mais baixa é chamado de *estado fundamental.*

Resumo da aula:

- Equação de Schrödinger;
- Resolvemos a equação de Schrödinger para situações simples (potencial degrau, barreira de potencial);
- Resolvemos a equação de Schrödinger confinada em um poço de potencial infinito em uma dimensão (1D) $\Rightarrow$ energias discretas.