UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Instituto de Física
Departamento de Física
Disciplina: Física do Século XX A
Prof. César Augusto Zen Vasconcellos
LISTA TEMÁTICA E DE PROBLEMAS No. 12 – Equação de SCHRÖDINGER. Separação das funções de espaço e tempo de Ψ(x,t); Equação de SCHRÖDINGER independente do tempo; condições que uma função de onda deve satisfazer; o poço quadrado infinito unidimensional; a função de onda completa. O poço quadrado unidimensional finito; valores esperados.

Separação das funções de tempo e espaço de Ψ(x,t): Consideramos um problema em que o potencial não varia com o tempo: uma partícula submetida a um potencial do tipo V(x). Neste caso, as funções do tempo e do espaço da equação de Schrödinger podem ser separadas na forma $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$. Substituindo esta expressão na equação de Schrödinger resulta então:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\phi(t)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d\phi(t)}{dt}$$

onde derivadas parciais foram substituídas por derivadas ordinárias. Dividindo esta equação por $\psi(x)\phi(t)$ (considerando que a inversa desta expressão exista), resulta então

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}.$$

O lado direito desta equação depende apenas da variável x enquanto o lado direito depende apenas da variável t. Em conseqüência, variações em x não podem alterar a expressão do lado direito da equação enquanto variações em t não podem alterar a expressão contida no lado esquerdo da equação. Isto significa dizer que ambas as expressões (do lado esquerdo e do lado direito) são iguais a uma constante, representada pela letra C e denominada em geral de *constante de separação*. Desta forma substituímos uma equação diferencial com duas variáveis independentes por duas equações diferenciais ordinárias que contém, cada uma delas, apenas uma variável independente:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = C \text{ e } i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = C.$$

A solução geral da equação diferencial dependente do tempo é

$$\phi(t) = e^{-iCt/\hbar} = \cos(Ct/\hbar) - i\,\mathrm{sen}(Ct/\hbar) = \cos(wt) - i\,\mathrm{sen}(wt).$$

Portanto, $\phi(t)$ é uma função oscilatória com freqüência angular $w=C/\hbar$. Uma vez que $C=\hbar w=E$, então C=E, ou seja, a constante de separação é igual à energia total da partícula cujo comportamento oscilatório é descrito pela equação de Schrödinger. Daí resulta a solução

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \text{ e a equação } \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

equação esta conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo, uma equação diferencial ordinária com uma variável independente e portanto mais fácil de ser solucionada do que a equação de Schrödinger original. Neste caso a condição de normalização se reduz a

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx = 1.$$

Condições que uma função de onda deve satisfazer: A forma da solução unidimensional, ψ(x), da equação de Schrödinger de uma partícula sob a ação de um potencial depende da forma específica da energia potencial, V(x). Soluções de problemas unidimensionais serão apresentados a seguir. Mas um aspecto importante relacionado com estas soluções se refere às condições que uma função de onda deve satisfazer, para ser considerada uma solução aceitável da equação de Schrödinger. A obediência a estas condições é essencial para que as soluções apresentem consistência formal. Enumeramos a seguir estas condições:

a) Supomos, usando o *critério de verdade científica,* que **$\psi(x)$ deve existir e satisfazer a equação de Schrödinger**.
b) A probabilidade de encontrar a partícula não pode variar descontinuamente de um ponto a outro no espaço. Levando em conta este aspecto e ainda que a equação de Schrödinger é uma equação diferencial em segunda ordem em x, portanto, **$\psi(x)$ e sua derivada primeira, $d\psi(x)/dx$, devem existir e se constituem em funções contínuas**. Somente nas regiões de fronteira, onde um potencial infinito eventualmente atue, a derivada primeira de $\psi(x)$ pode ser descontínua pois, nesta região particular, como nenhuma partícula pode ter energia potencial infinita, $\psi(x)$ deve se anular.
c) Uma vez que grandezas físicas observáveis nunca são infinitas ou plurívocas, o mesmo deve acontecer com $\psi(x)$. Assim, de modo a garantir finitude e univocidade das grandezas físicas observadas, **$\psi(x)$ e sua derivada primeira, $d\psi(x)/dx$, devem ser finitas e unívocas.**
d) Para garantir que a integral de normalização seja finita, **$\psi(x)$ deve tender a zero quando $x\Rightarrow\pm\infty$.**

O poço quadrado infinito unidimensional: Consideremos o problema a seguir onde aplicamos a concepção de potenciais do tipo poço quadrado de paredes infinitas (caso unidimensional) na equação de Schrödinger. Há muitos outros problemas em física que podem ser tratados matematicamente da maneira que mostraremos a seguir. Mas o exemplo que apresentaremos é ao mesmo tempo simples e adequado. O problema a que nos referimos é o de considerarmos uma "caixa" para elétrons usando eletrodos e grades aterradas no interior de um tubo de vidro onde fez-se vácuo, como exemplificado na figura 1. Nesta figura mostramos, em a) um elétron que se encontra na região entre duas grades G aterradas. Em conseqüência disso, o elétron não sofre, nesta região força alguma. Já nas regiões entre as grades e os eletrodos C existe um campo elétrico cuja intensidade depende da tensão V e, portanto, nestas regiões o elétron sofre os efeitos de forças eletrostáticas. Mostramos em b) e c) duas situações hipotéticas. Na primeira o potencial V tem um valor máximo, mas menor comparativamente ao valor correspondente à segunda situação. Da mesma forma, as inclinações dos dois gráficos são distintas: uma é mais suave do que a outra. A análise do gráfico revela que a energia potencial apresenta efeitos similares ao de uma "parede" que se tornam mais íngreme à medida em que V cresce tornando-se, no limite particular em que $V\Rightarrow\infty$, intransponíveis. Para representar estas situações exemplificadas, a energia potencial toma a forma $V(x) = 0$, para $0<x<L$, onde L representa a largura do potencial e $V(x) = \infty$ para $x\leq 0$ e $x\geq L$. A representação gráfica deste tipo de potencial é apresentada na figura 2. Este potencial é evidentemente, do ponto de vista físico, uma representação artificial do problema considerado. Entretanto, o tratamento apresenta diversas vantagens: ele é simples, do ponto de vista matemático e conceitual; ele é ademais consistente com as idéias de confinamento na mecânica quântica; e ele possibilita a obtenção de soluções exatas da equação de Schrödinger; por fim, o tratamento está relacionado a outros problemas, inclusive aqueles de natureza clássica como, por exemplo, o problema de uma corda vibrante e, finalmente, este tratamento representa uma aproximação 'aceitável', do ponto de vista fenomenológico, para diversos problemas reais. É importante salientar que sendo a energia potencial infinita na parte externa do poço, a função de onda é nula nestas regiões. Isto significa dizer que a partícula está confinada, de maneira absoluta, ao interior do poço, não podendo dele emergir.

LISTA TEMÁTICA E DE PROBLEMAS No. 12 – Equação de SCHRÖDINGER. Separação das funções de espaço e tempo de $\Psi(x,t)$; Equação de SCHRÖDINGER independente do tempo; condições que uma função de onda deve satisfazer; o poço quadrado infinito unidimensional; a função de onda completa. O poço quadrado unidimensional finito; valores esperados.

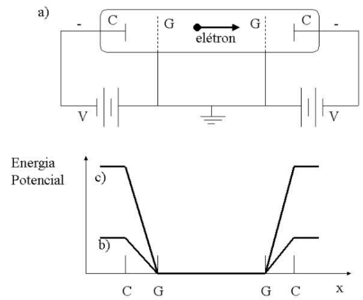

Figura 1.

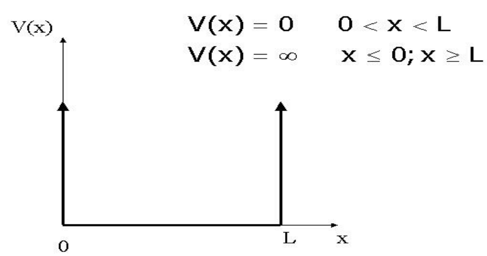

Figura 2

Uma vez que a função de onda da partícula é nula na parte externa do poço, necessitamos resolver o problema apenas para a parte interior do mesmo. As condições anteriormente citadas devem ser então impostas por meio de condições de contorno. A equação de Schrödinger independente do tempo é dada, para a região interior ao poço, por

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

Esta equação pode ser escrita ainda na forma

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

sendo $k^2 = \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Soluções possíveis da equação acima são $\psi(x) = A\,\mathrm{sen}\,kx$ e $\psi(x) = B\cos kx$ onde A e B são constantes. As condições de contorno apropriadas neste caso são $\psi(0) = 0$ e $\psi(L) = 0$. A primeira condição de contorno faz com que a solução $\psi(x) = B\cos kx$ seja excluída, pois como cos(0)=1 então B=0. A segunda condição de contorno implica em que $\psi(L) = A\,\mathrm{sen}\,kL = 0$; e para que esta condição seja satisfeita devemos obrigatoriamente ter kL = número inteiro multiplicado por π. Obtemos então $k_n = n\pi/L$ como os valores permitidos de k, sendo n um número inteiro positivo. Combinando esta expressão com $E_n = \frac{\hbar^2 {k_n}^2}{2m}$ obtemos então os valores dos ***níveis de***

energia quantizados ou ***auto-valores de energia de uma partícula confinada em um potencial de paredes infinitas***: $E_n = n^2 \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = n^2E_1$.

A função de onda completa: A solução completa do problema considerado é então

$$\Psi_n(x,t) = \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{L}}\left(e^{i(k_n x - w_n t)} - e^{-i(k_n x + w_n t)}\right).$$

Problemas

1. Mostre que a condição de normalização se reduz, no caso em que a equação de Schrödinger de uma partícula possa ser separada no tempo e no espaço, a $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$.
2. Que condições uma função de onda, solução da equação de Schrödinger, deve satisfazer? Por que?
3. Explique os resultados apresentados na figura 1. O que significa na figura a menor declividade associada à figura b) em comparação à figura c)?
4. Considere o problema de uma partícula submetida a um potencial unidimensional do tipo poço quadrado de paredes infinitas. Mostre que as energias quantizadas dos estados de energia permitidos obedece à relação $E_n = \frac{\hbar^2 k_n{}^2}{2m} = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ envolvendo a energia, número de onda e massa da partícula. Faça um gráfico destas soluções de energia.
5. Determine no problema anterior a constante A da solução da equação de Schrödinger independente do tempo., i.e., mostre que $A=\sqrt{\frac{2}{L}}$.
6. Mostre, no problema anterior, que a solução da equação de Schrödinger independente do tempo é dada por $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\text{sen}\frac{n\pi x}{L}$ onde n=1,2,3,...
7. Mostre que a solução completa do problema anterior pode ser expressa na forma :
$\Psi_n(x,t) = \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{L}}\left(e^{i(k_n x - w_n t)} - e^{-i(k_n x + w_n t)}\right)$
8. Considere um elétron viajando em um fio fino de metal como uma aproximação para uma partícula em um poço infinito unidimensional. O potencial no interior do fio é constante mas aumenta bruscamente nas suas extremidades. Suponha que o fio tenha 1,0cm de comprimento. a) Calcule a energia do estado fundamental do elétron. b) Se a energia do elétron é igual à energia cinética média das moléculas em um gás à temperatura T=300K, i. e. cerca de 0,03eV, qual é o número quântico n do elétron?
9. Suponha que a posição do elétron no exemplo anterior possa ser medida enquanto ele se encontra no estado fundamental. a) Qual é a probabilidade de encontrá-lo na região $0<x<L/4$? b) Qual é a probabilidade de encontrá-lo em uma região com $\Delta x=0{,}01L$ de largura e centro em $x=5L/8$?
10. (a) Determine a energia do estado fundamental de um elétron confinado em uma caixa unidimensional com L=0,1nm de comprimento, valor este que corresponde aproximadamente às dimensões espaciais de um átomo. (b) Faça um diagrama de níveis de energia e calcule os comprimentos de onda dos fótons emitidos em todas as transições que têm como estado inicial um estado com n=3 ou menos e como estado final um estado de menor energia.