

Cap. 7 Mecânica Quântica (A equações de Schrödinger) em uma dimensão.

- Objetivos: aprender a
- desenvolver e usar uma estratégia para encontrar e interpretar funções de onda (amplitudes de probabilidade)
 - desenhar funções de onda
 - usar funções energia potencial para fazer modelos em MQ
 - compreender e usar ~~alguns~~ vários modelos importantes em MQ
 - calcular a probabilidade de tunelamento quântico.

A MQ não é mais território exclusivo dos físicos. Ela é agora uma ferramenta essencial no desenho e projeto de dispositivos semicondutores, como lasers a diodo. Uma classe inteira de dispositivos chamados de dispositivos a poços quânticos foram desenvolvidos e construídos para explorar as possibilidades abertas pelos níveis ~~para~~ de energia quantizados. Veremos alguns exemplos neste capítulo.

Na fronteira da engenharia também estão o projeto e construção de nanoestruturas, máquinas ou outros dispositivos com algumas centenas de na-

11
11
nanômetros de comprimento. Muitos cientistas e engenheiros já antevêm o dia num futuro próximo no qual nanoestruturas serão construídas literalmente átomo a átomo. Efeitos quânticos serão importantes em dispositivos tão pequenos.

Nosso objetivo neste capítulo é introduzir as ideias essenciais da MQ. Apesar do mundo real ser tridimensional, vamos limitar aqui nosso estudo a uma dimensão. Isto vai nos permitir manter o foco nos conceitos fundamentais da física quântica sem ficar assobrecobertos pelas complicações matemáticas.

Vamos discutir alguns dos aspectos de encontrar e usar funções de onda, e estudar várias aplicações da MQ.

Vamos concluir este capítulo com a discussão de um fenômeno chamado de tunelamento quântico, um dos aspectos mais surpreendentes da física quântica.

7.1 Introdução

Na mecânica clássica, o estado de uma partícula é especificado por suas posição e velocidade - o descritor desta teoria é a função horária $\vec{r} = \vec{r}(t)$.

Na MQ, este descritor é a função de

onda, ou amplitude de probabilidade. Nos 2 casos, a questão fundamental é prever como o estado vai evoluir com o tempo, e a resposta está na equação de movimento. A equação de movimento da mecânica clássica é a 2ª lei de Newton, $\vec{F} = m\vec{a}$: conhecidas posição e velocidade em $t=0$, ela determina ~~estes~~ o valor destas grandezas em qualquer outro instante. Na MQ, a equação de movimento é a equação de Schrödinger (dependente do tempo): se soubermos a função de onda em $t=0$, esta equação a determina em qualquer outro instante.

A equação de Schrödinger dependente do tempo é uma equação diferencial parcial, e sua completa compreensão exige mais preparo matemático do que exigido para esta disciplina.

Felizmente, a maioria dos problemas interessantes em MQ não exigem o uso desta equação na sua formulação mais geral. Em particular, os estados mais importantes de um sistema quântico são aqueles nos quais a energia do sistema é bem definida, e ~~esta é~~ a função de onda de um estado destes é uma onda

estacionária, análoga as ondas estacionárias da corda vibrante. Quando a equação de Schrödinger dependente do tempo é aplicada a estas ondas estacionárias, ela se reduz a uma equação mais simples, a equação de Schrödinger independente do tempo. Nós só precisaremos desta última e com seu auxílio vamos encontrar funções de onda de estados estacionários e as correspondentes energias destes estados.

Neste capítulo lidaremos apenas com sistemas quânticos unidimensionais, e podemos imaginar que estes modelam situações vividas por um elétron confinado a se mover em um fio muito estreito.

7.2. Ondas estacionárias clássicas

A discussão desta seção se aplica a qualquer tipo de onda, mas focalize o quadro da corda vibrante se precisar de um exemplo concreto.

Considere 2 ondas progressivas senoidais, uma andando ~~para~~ no sentido positivo do eixo x ($\Psi_1(x,t) = B \sin(kx - \omega t)$) e outra no sentido negativo ($\Psi_2(x,t) = B \sin(kx + \omega t)$). O princípio da superposição garante que a soma destas

duas é outra forma de onda possível,

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t) = \\ &= B [\sin(kx - \omega t) + \sin(kx + \omega t)]\end{aligned}$$

que pode ser transformada por uma identidade trigonométrica lembrada no capítulo anterior em

$$\Psi(x,t) = \underbrace{2B}_{A} \sin kx \cos \omega t.$$

Esta onda resultante não é mais progressiva. Em alguns pontos (onde $\sin kx = 0$), chamados nós, $\Psi(x,t)$ é sempre nula (a corda fica estacionária). Nos outros, $\Psi(x,t)$ oscila com $\cos \omega t$, com amplitude dada por $A \sin kx$: pela superposição de 2 ondas progressivas formamos uma onda estacionária.

Pensando na corda vibrante, poderíamos prender 2 dos nós formados e remover a corda fora deste segmento, e o que resta é uma onda estacionária num comprimento de corda finito, que é o tipo de onda produzida numa corda de violão ou piano quando ela emite um tom musical puro.
(nota)

Se imaginarmos agora uma onda limitada ao segmento de comprimento a de modo a que ela se anule nos extremos, e nos perguntarmos que ondas estacionárias podem ser criadas neste segmento, a resposta é qualquer

uma que tenha nós nos extremos do segmento. Como a distância entre 2 nós consecutivos é $\frac{\lambda}{2}$, a condição se escreve

$$a = n \frac{\lambda}{2} \Rightarrow \lambda = \frac{2a}{n}, n = 1, 2, \dots$$

Vemos que os comprimentos de onda possíveis para uma onda estacionária, num segmento em cujos extremos a onda se anula, são quantizados. É importante reconhecer que esta quantização se deve à imposição feita aos valores da função de onda nos extremos do intervalo. Chamamos de condições de contorno a imposições como esta, feita aos valores da função na fronteira, ou contorno, da região de interesse.

Assim como no caso clássico, são as condições de contorno que conduzem à quantização das ondas quânticas.

7.3 Ondas estacionárias em MQ: estados estacionários

Vamos usar a forma de onda estacionária obtida na secção anterior para introduzir uma notação. A onda

$\Psi(x, t) = A \sin kx \cos \omega t$ é o produto de uma função que só depende de x ($A \sin kx$) por outra que só depende de t ($\cos \omega t$).

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cos \omega t$$

tilibra

maiusculo

minúsculo

$\Psi(x)$ é a parte espacial da função de onda completa $\Psi(x,t)$. No exemplo da seção anterior, esta parte espacial era simplesmente uma função seno, mas ela pode resultar em outros problemas ser uma função mais complicada. A parte temporal pode também envolver uma contribuição da forma $\cos \omega t$, dependendo da escolha feita para a origem de medida do tempo, e a forma mais geral para a função de onda estacionária senoidal completa é

$$\Psi(x,t) = \Psi(x) (a \cos \omega t + b \sin \omega t)$$

A razão $\frac{a}{b}$ é determinada pela escolha da origem do tempo.

As funções de onda estacionárias de um sistema quântico têm forma similar, com uma diferença importante provocada por serem funções complexas (de variáveis reais). A parte temporal vai sempre ocorrer na combinação

$$\cos \omega t - i \sin \omega t = e^{-i\omega t}$$

onde $i^2 = -1$ e relembramos a fórmula de Euler-de Moivre ($\cos \theta + i \sin \theta = e^{i\theta}$).

Relembramos ainda que

$$|e^{i\theta}| = \sqrt{\cos^2 \theta + \sin^2 \theta} = 1$$

55
1/1
A função de onda estacionária de um sistema quântico tem portanto a forma geral

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$$

Como esta função tem frequência angular bem definida, descreve um estado quântico no qual a energia, dada pela relação de de Broglie $E = \hbar\omega$, é também bem definida. A recíproca desta afirmação - isto é, todo estado quântico com energia bem definida é descrito pela função de onda acima - ~~seja~~ é também verdadeira, o que será provado mais adiante neste capítulo.

Já sabemos que a densidade de probabilidade associada a uma função de onda (ou amplitude de probabilidade) é dada por $|\Psi(x,t)|^2$. Para a função estacionária quântica acima, isto conduz à importante propriedade:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2 \underbrace{|e^{-i\omega t}|^2}_{=1}$$

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

ou: se um sistema quântico é descrito por uma função de onda estacionária, sua densidade de probabilidade não depende do tempo (é estacionária). Por esta razão, chamamos a estes de estados estacionários. Neles, a distribuição espacial da (probabi-

Capacidade de encontrar a) matéria - elétrons num átomo, núcleons em um núcleo - é independente do tempo, ou estacionária.

Os estados estacionários são os análogos na MQ moderna das órbitas estacionárias de Bohr, e são precisamente os estados de energia bem definida. Como sua distribuição de cargas é estática, átomos em estados estacionários não emitem radiação.

Uma consequência prática importante é que em muitos problemas a única parte interessante da função de onda é sua parte espacial $\psi(x)$.

Veremos que grande parcela da MQ é dedicada à procura das funções espaciais possíveis e das energias a que correspondem. A principal ferramenta para isso será a equação de Schrödinger independente do tempo.

7.4 Partícula numa caixa rígida

Antes de escrever a equação de Schrödinger, vamos considerar um exemplo simples que podemos resolver usando apenas nossas experiências com ondas estacionárias clássicas. Considere uma partícula confinada a um intervalo finito sobre o eixo x .

mas que pode se mover livremente dentro deste intervalo, uma situação que descrevemos como uma caixa rígida unidimensional e, por razões explicadas mais tarde, é comumente chamada de poço quadrado infinito. Uma realização concreta é imaginar um elétron no interior de um pedaço de fio condutor muito fino.

Trata-se, portanto, de uma partícula quântica de massa m que se move não relativisticamente no interior de uma caixa rígida unidimensional de comprimento a sem a ação de forças quando está em $x \in (0, a)$. A ausência de forças implica em que a energia potencial seja constante no interior da caixa, e podemos escolher esta constante como o zero de energia. Portanto, a energia total (mecânica) é puramente cinética, e pensamos nela, como é usual em MQ, como $K = \frac{p^2}{2m}$ (o que é mais conveniente do que pensar em $\frac{1}{2}mv^2$, graças à relação de de Broglie $\lambda = \frac{h}{p}$). Portanto,

$$E = K = \frac{p^2}{2m}$$

Já sabemos que os estados de energia bem definida são os estados esta-

cionários $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$. Para encontrar as energias permitidas, devemos encontrar as ondas estacionárias possíveis. A parte espacial deve ser, por analogia com as ondas clássicas, da forma

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad x \in [0, a]$$

Como a partícula não pode sair da caixa, a função de onda deve ser zero fora. Se fizermos a hipótese de que a função de onda seja contínua, devemos ter

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

$$\Rightarrow B = 0 \text{ e}$$

$$A \sin ka = 0 \Rightarrow ka = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\Downarrow$$

$$k = n \frac{\pi}{a}, \quad n = 1, 2, \dots$$

e as únicas funções de onda permitidas são $\psi(x) = A \sin kx$, com k dado acima.

$$\Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2a}{n}, \quad \phi = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2a} = \frac{n\pi\hbar}{a}$$

$$\text{e } E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

O estado de mais baixa energia, ou estado fundamental, é obtido quando $n=1$, e sua energia é

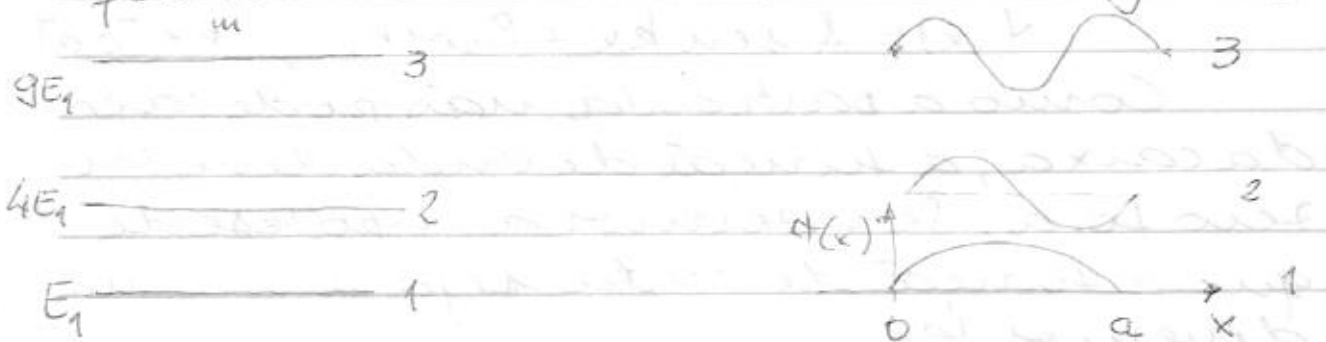
$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad \text{consistente com o que obtivemos no}$$

cap. 6 com o princípio da incerteza ($E \geq \frac{\hbar^2}{2ma^2}$)

Em termos da energia do estado fundamental E_1 ,

$$E_n = n^2 E_1$$

Os níveis se afastam cada vez mais, à medida que n cresce, ao contrário do que ocorre no átomo de hidrogênio



Note como o número de nós aumenta monotonamente com o número quântico n (com a energia); isto era de se esperar: quanto mais nós, menor o comprimento de onda λ (maior a curvatura de ψ - porque?), maior o momento p (porque?) e maior também a energia (cinética K e total E).

A função de onda completa de um qualquer dos estados estacionários é:

$$\Psi(x,t) = A \sin kx e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2}$$

(falta normalizar!)

Usando a identidade $\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$ (prove!) obtemos

$$\Psi(x,t) = \frac{A}{2i} \left[e^{i(kx - \omega t)} - e^{-i(kx + \omega t)} \right]$$

A função de onda estacionária

quântica pode ser expressa como a superposição de 2 ondas progressivas. A que se move para a ^(esquerda) direita representa partícula de momento $\hbar k$ para a direita (esquerda). Portanto, uma partícula num dos estados estacionários tem momento com módulo $\hbar k$ bem definido, mas é uma superposição dos 2 sentidos com igual probabilidade para ambos. Esta imagem tem correspondência com a situação clássica, na qual a partícula é encontrada movendo-se para a esquerda ou para a direita com igual probabilidade.

7.5 A equação de Schrödinger independente do tempo

Esta é a equação, proposta em 1925 pelo austríaco Erwin Schrödinger, que determina a função de onda (amplitude de probabilidade) de estados estacionários de sistemas quânticos não-relativísticos. Como todas as leis básicas da Física, esta não pode ser demonstrada. Ela é uma relação que, a exemplo da 2ª lei de Newton, a experiência mostrou ser verdadeira. Portanto, seria um procedimento legítimo simplesmente enunciar a equação e começar a usá-la, mostrando que suas previsões são confirmadas.

das pelos resultados experimentais. No entanto, pode ser útil para o iniciante oferecer alguns argumentos que sugiram a plausibilidade desta equação, o que faremos agora.

Quase todas as leis da Física podem ser expressas como equações diferenciais, que envolvem o descritor da teoria e suas derivadas, e esta não será exceção: a equação de movimento das ondas clássicas é uma equação diferencial, sendo, portanto, natural esperar que a equação que determina as ondas estacionárias quânticas também o seja.

Já sabemos também a forma da função de onda espacial para os estados da caixa rígida, e vamos usá-la como modelo: se $\psi(x) = A \sin kx$,

$$\frac{d\psi}{dx} = kA \cos kx \text{ e } \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A \sin kx = -k^2 \psi$$

Podemos relacionar o número de onda k com a energia cinética K :

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k^2 = \frac{2mK}{\hbar^2}$$

Logo, temos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mK}{\hbar^2} \psi$$

que é uma equação diferencial de 2ª ordem satisfeita pela função de onda.

Uma partícula numa caixa rígida é um sistema particularmente simples, no qual a energia potencial é nula na região acessível à partícula. Uma maneira de tentar generalizar a equação anterior para situações nas quais a energia potencial não seja constante é substituir $K = E - U(x)$ para obter

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

muitas vezes escrita na forma

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

que é chamada a equação de Schrödinger independente do tempo.

Esta equação se aplica ao movimento unidimensional de uma partícula. Vamos depois generalizá-la para abranger sistemas de várias partículas em 2 ou 3 dimensões. Em todos os casos, o procedimento para usar a equação é o mesmo ~~em todos os casos~~: dado um sistema cujos estados estacionários e energias queremos determinar, precisamos primeiro encontrar a função energia potencial $U(x)$. Por exemplo:

- uma partícula sujeita a uma força elástica e tendo a origem como posição de equilíbrio ($F = -kx$) se move sob a energia potencial $U(x) = \frac{1}{2} kx^2$.

- o elétron no átomo de hidrogênio tem $U(r) = -\frac{ke^2}{r}$

Uma vez identificada a função $U(x)$, a eq. 5. se torna uma equação bem definida que podemos tentar resolver. Na maioria dos casos resulta que para muitos valores da energia E a eq. 5. não tem solução aceitável (que satisfaça as condições particulares do problema), e é isto exatamente que leva à quantização da energia. Os valores de E para os quais a eq. 5. não tem solução aceitável não são energias permitidas para o sistema; ao contrário, as energias E para as quais há solução são energias permitidas e as soluções $\psi(x)$ correspondentes dão as funções de onda espaciais destes estados estacionários.

As condições que a função de onda $\psi(x)$ deve satisfazer para ser uma solução aceitável podem ser:

- condições de contorno - por exemplo, a condição de que $\psi(x)$ se anule nas paredes de uma caixa perfeitamente rígida;

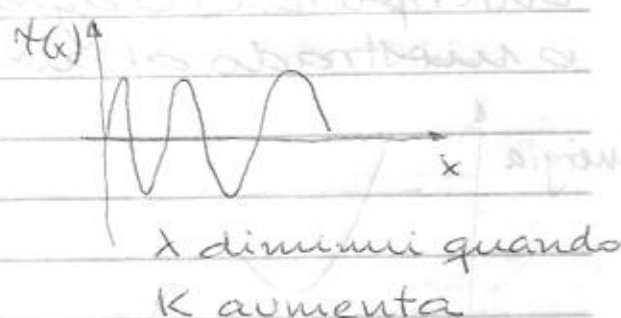
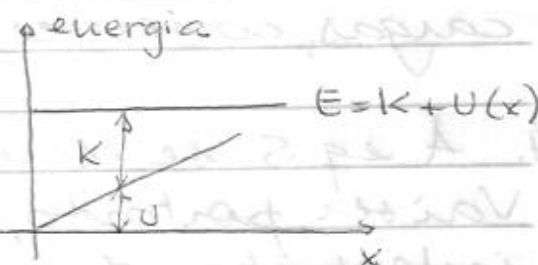
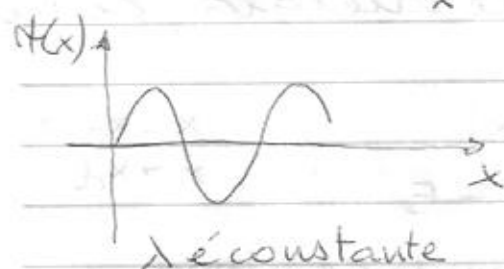
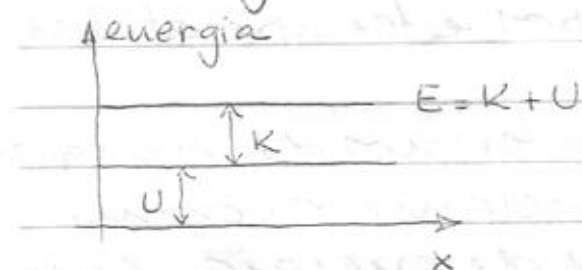
- $\psi(x)$ deve ser contínua;

- $\frac{d\psi}{dx}$ deve, na maior parte dos casos, ser contínua.

Vale notar que na MQ é a energia potencial que aparece na equação básica, enquanto na mecânica clássica aparece a força.

Comentários

1. O comprimento de onda λ da função de onda quântica está relacionado com o momento ($\lambda = \frac{h}{p}$), e portanto com a energia cinética K .



2.

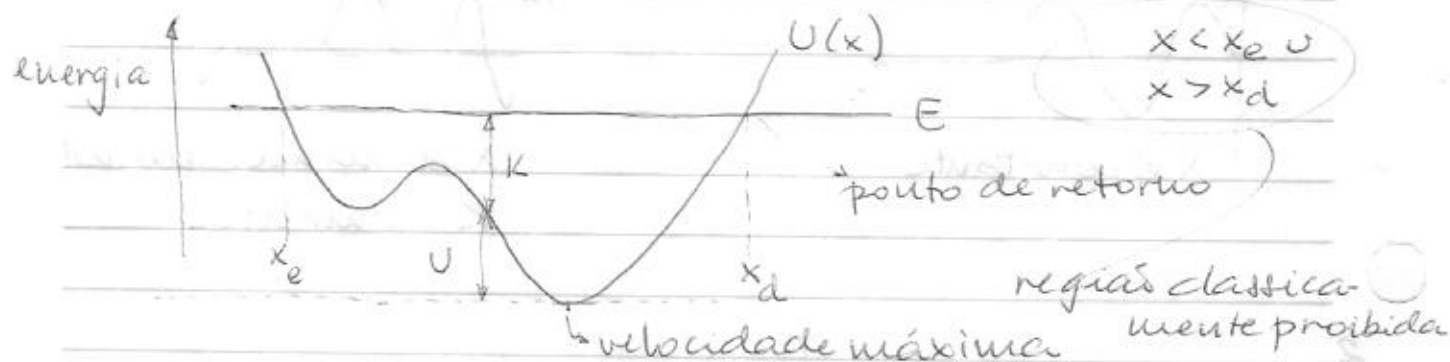


Ordene as velocidades das 3 partículas quânticas (massas iguais).

3. A descrição exata de um átomo ou de um sólido é extremamente complicada. A forma na qual devemos usar a MQ é cada vez mais

te é fazer algumas hipóteses simplificadas - isto é, construir um modelo quântico da situação. O teste de sucesso ou não de um modelo é sua concordância com resultados experimentais. Estas experiências não podem medir $\Psi(x)$ e raramente fazem medidas diretas de probabilidades. Será, portanto, importante conectar nossos modelos com quantidades mensuráveis, como comprimentos de onda, cargas, correntes, tempos e temperaturas.

4. A eq. 5. se escreve em termos de energias. Vai ser, portanto, útil relembrar como interpretar diagramas de energia, como o mostrado abaixo.



5. A solução de uma equação algébrica é um número ($x=3$ é solução de $2x=6$); a solução de uma equação diferencial é uma função. Podemos sempre representar a solução como um gráfico de $\Psi(x)$.
6. Podem haver soluções da eq. 5. que não sejam fisicamente aceitáveis. Apesar da

energia total E aparece na equação, e ela é tratada como uma constante não especificada; para a maioria dos valores de E não encontraremos soluções aceitáveis da eq. 5., isto é, funções $\psi(x)$ que satisfaçam simultaneamente a eq. 5. e as condições de contorno e continuidade.

7. A etapa crítica na resolução de um problema em MQ é a determinação / identificação da função energia potencial $U(x)$ - isto é, identificar a física do problema. O resto é pura matemática. Eis aqui uma proposta de estratégia para a resolução de problemas em MQ:

modelo: determine uma função energia potencial que descreva as interações da partícula em foco; faça hipóteses simplificadoras quando pertinente

visualização: a curva de energia potencial é a representação pictórica

- desenhe a curva da energia potencial
- identifique as informações conhecidas
- estabeleça as condições de contorno que devem ser satisfeitas pela função de onda

solução: a eq. 5. é a representação matemática

- utilize as condições de contorno

- normalize a função de onda

- faça gráficos de $\psi(x)$ e $|\psi(x)|^2$

- determine os níveis de energia

permitidos

- calcule probabilidades, comprimentos de onda, ou outras quantidades avaliadas. veja se as unidades estão corretas, se os resultados ~~se~~ fazem sentido físico e se as perguntas foram respondidas.

7.6 A caixa rígida retilínea

Trata-se de uma partícula de massa m confinada a uma caixa rígida unidimensional, de paredes perfeitamente rígidas, com as quais a partícula sofre colisões perfeitamente elásticas.

As questões básicas que queremos responder neste, e em qualquer problema de MQ, são:

- quais são as energias permitidas da partícula?
- qual a função de onda associada a cada energia?
- em que parte da caixa é mais provável encontrarmos a partícula?

Vamos responder a estas perguntas seguindo os passos da estratégia de resolução de problemas.

Modelo: identificar a função energia potencial

Nenhum reservatório real tem os atributos da caixa que estudaremos, logo a caixa rígida é um modelo de uma situação na qual uma partícula é extremamente bem confinada. Nossa 1ª tarefa é caracterizar a caixa