S T Q Q S S D — __/__/__

N.2

Física Quântica - P2

Schrödinger

- Distribuição de probabilidade da função de onda.

$$P(x,t)\,dx = |\Psi(x,t)|^2 dx = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)\,dx$$

- Condição de Normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)\,dx = 1$$

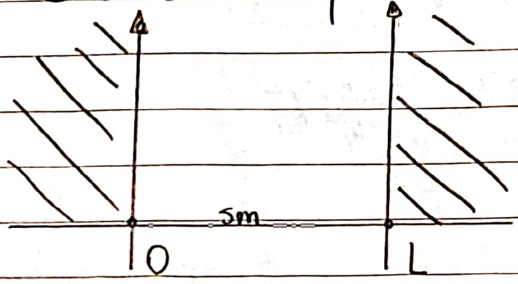
Dependente do tempo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\,\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

<u>Não</u> dependente do tempo.

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

- Poço Quadrado Infinito.



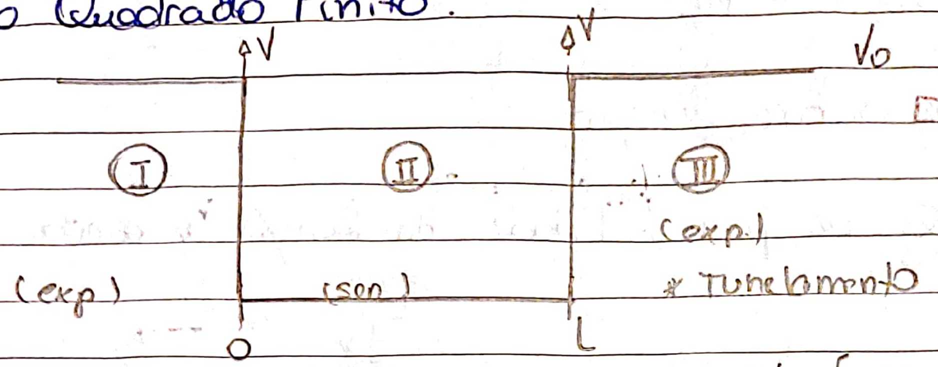
$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & x \leq 0 \text{ e } x \geq L \end{cases}$$

Para encontrar energia: aplicar condições de contorno e analisar as situações. $\boxed{E = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2}}$

spiral

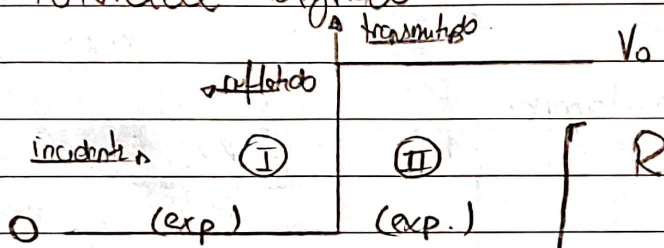
__/__/__ S T Q Q S S D

- Poço Quadrado Finito.



$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ V_0, & x \leq 0 \text{ e } x \geq L \end{cases}$$

Potencial Degrau



$$\begin{cases} R = \dfrac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\dfrac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}\right)^2 \\ \\ T = \dfrac{K_2 |C|^2}{K_1 |A|^2} = \dfrac{4 K_1 K_2}{(K_1 + K_2)^2} \end{cases}$$

* K_1 são encontrados ao resolver Schrödinger na região I e II.

Obs: Relação de Energia - nº de estados ligados ao poço

$$E_{\substack{\text{poço} \\ \text{finito}}} \leq E_{\substack{\text{poço} \\ \text{infinito}}}$$

Considerando E_m a energia no poço finito, temos

$$\frac{\hbar^2 \pi^2 m^2}{2mL^2} \leq 4 \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

m é o nº de estados ligados ao poço finito de altura $V_0 = 4 E_n$

S T Q Q S S D

__/__/__

Oscilador harmônico.

$$V(x) = \frac{1}{2} m w^2 x^2$$

solução do tipo: $\psi(x) = A e^{-\alpha x^2}$, $\alpha = \frac{m w}{2\hbar}$

A função de onda gaussiana é uma solução do oscilador harmônico quântico.

Átomo de Hidrogênio.

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

$$* \; -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{d R(r)}{dr}\right) - \left[V(r) - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right] R(r) = E R(r)$$

– Distribuição de Probabilidade e Normalização

$$P_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = |\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)|^2$$

$$\int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^2\, dr = 1$$

spiral

Informações Importantes adicionais!

- $$\langle E \rangle = \int \psi^*(x)\, H\, \psi(x)\, dx$$

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(x) \quad ; \quad p^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\boxed{E\,\psi(x) = H\,\psi(x)}$$

- $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\, f(x)\, \psi(x)\, dx$$

- $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$

$$\langle f(r) \rangle = \int_0^{\infty} R^*_{nl}(r)\, f(r)\, R_{nl}(r)\, r^2\, dr$$

- Para encontrar as posições nas quais temos a máxima probabilidade de encontrar a partícula.

$$\frac{d\,|\psi(x)|^2}{dx} = 0$$

Variância do raio :: $\sigma_r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$

Explicação integral oscilador harmônico.

O produto de uma função ímpar (o polinômio) por uma função par (a gaussiana) integrada em todo o espaço unidimensional é portanto, com integral (área sob a curva) nula

$$I_{impar}(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-qx^2} dx = 0$$

$$I_{par}(n) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-qx^2} dx = (-1)^n \sqrt{\pi} \frac{d^n}{dq^n}\left[q^{-1/2}\right]$$

O papel dos números quânticos atômicos.

n: está associado a energia do elétron e define a sua "proximidade" do núcleo

ℓ: está associado ao momento angular do elétron e define o "tipo" de forma do orbital.

m: está associado à projeção do momento angular (número quântico magnético) do elétron e define a "orientação" do orbital no espaço.