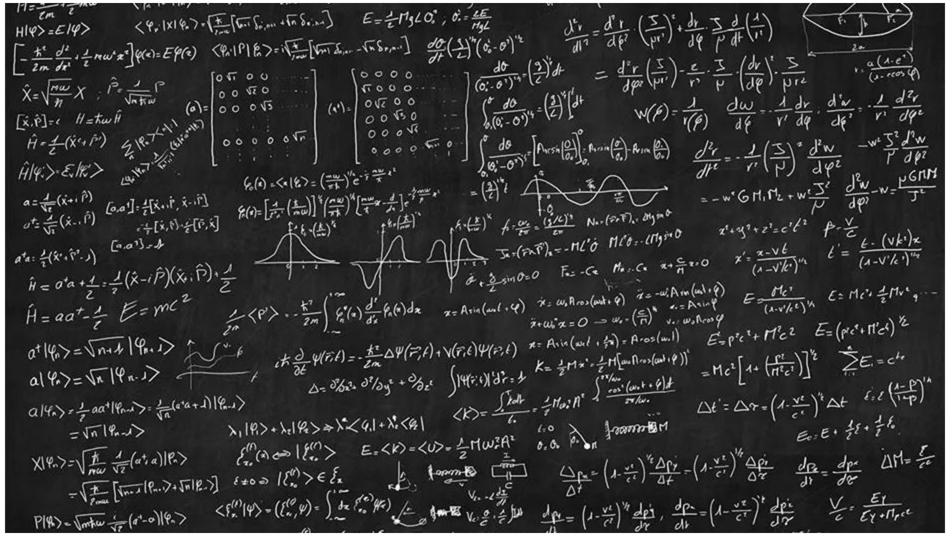
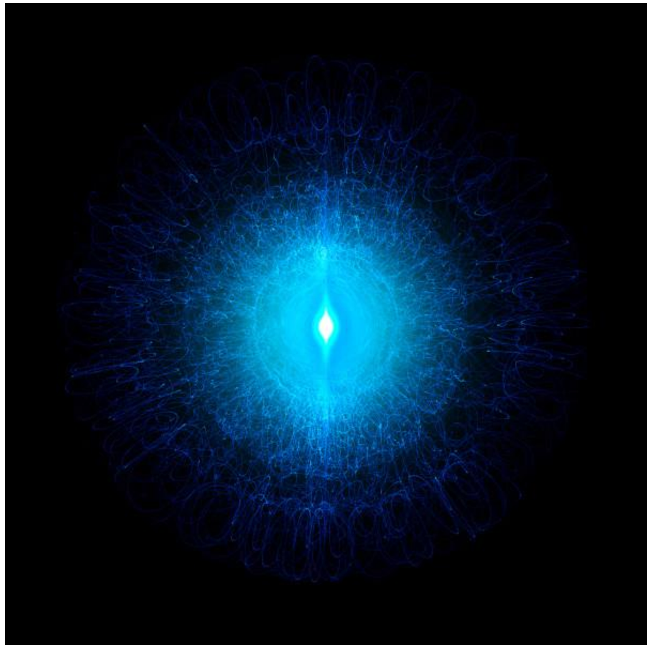
PARTÍCULA NUMA CAIXA

Equação de Schrödinger

Índice

- Significado físico da equação
- Definição do problema
- Resolução da equação analiticamente
- Porque é que queremos usar o computador?
- Método
- Conclusão





Significado físico da equação

Constante de Planck reduzida — Segunda derivada da função de onda

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

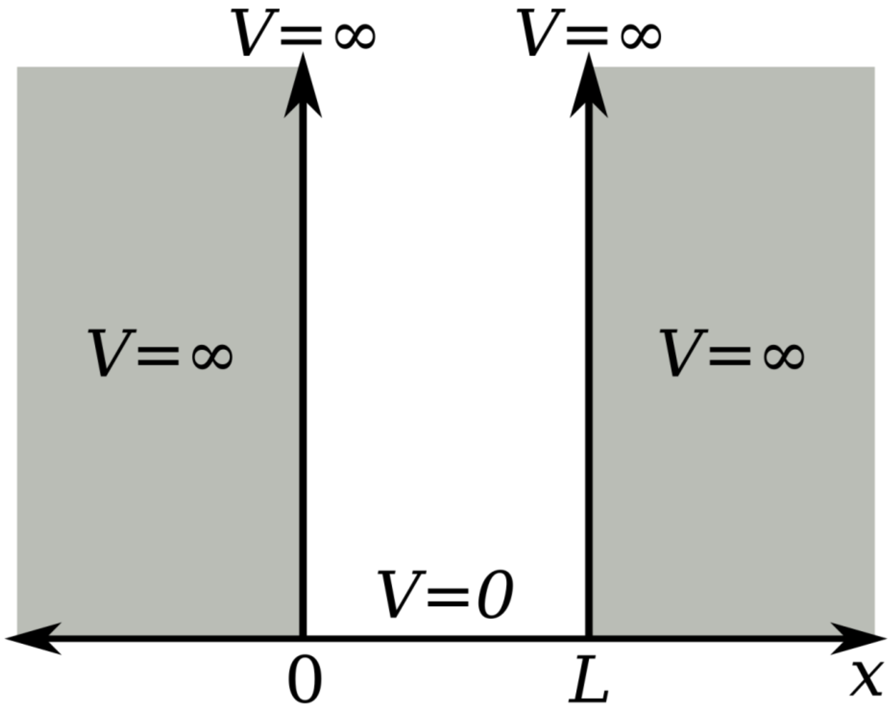
Energia Cinética — Energia Potencial — Energia Total

Definição do problema

Função de onda

- $\Psi(x)$ é contínua
- $\frac{d}{dx}\Psi(x)$ é contínua
- $\int_0^L |\Psi(x)|^2 \, dx = 1$

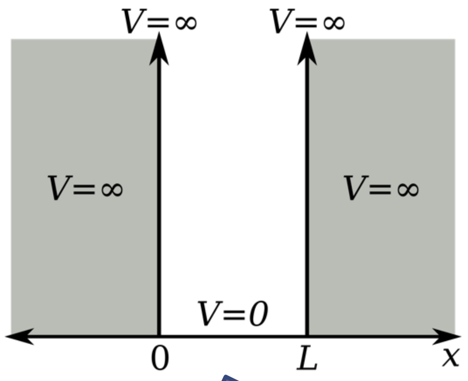
Como definir a caixa matematicamente



Resolução da Equação Analiticamente

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

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -E'\psi(x)$$



$$\psi(x) = \text{a}\cos(kx) + b\,sin(kx)$$

Condições de fronteira

$$\begin{cases}\psi(0^+) = \psi(0^-) \Rightarrow a = 0 \\ \psi(L^+) = \psi(L^-) \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi n}{L})^2, n \in \mathbb{N}\end{cases}$$

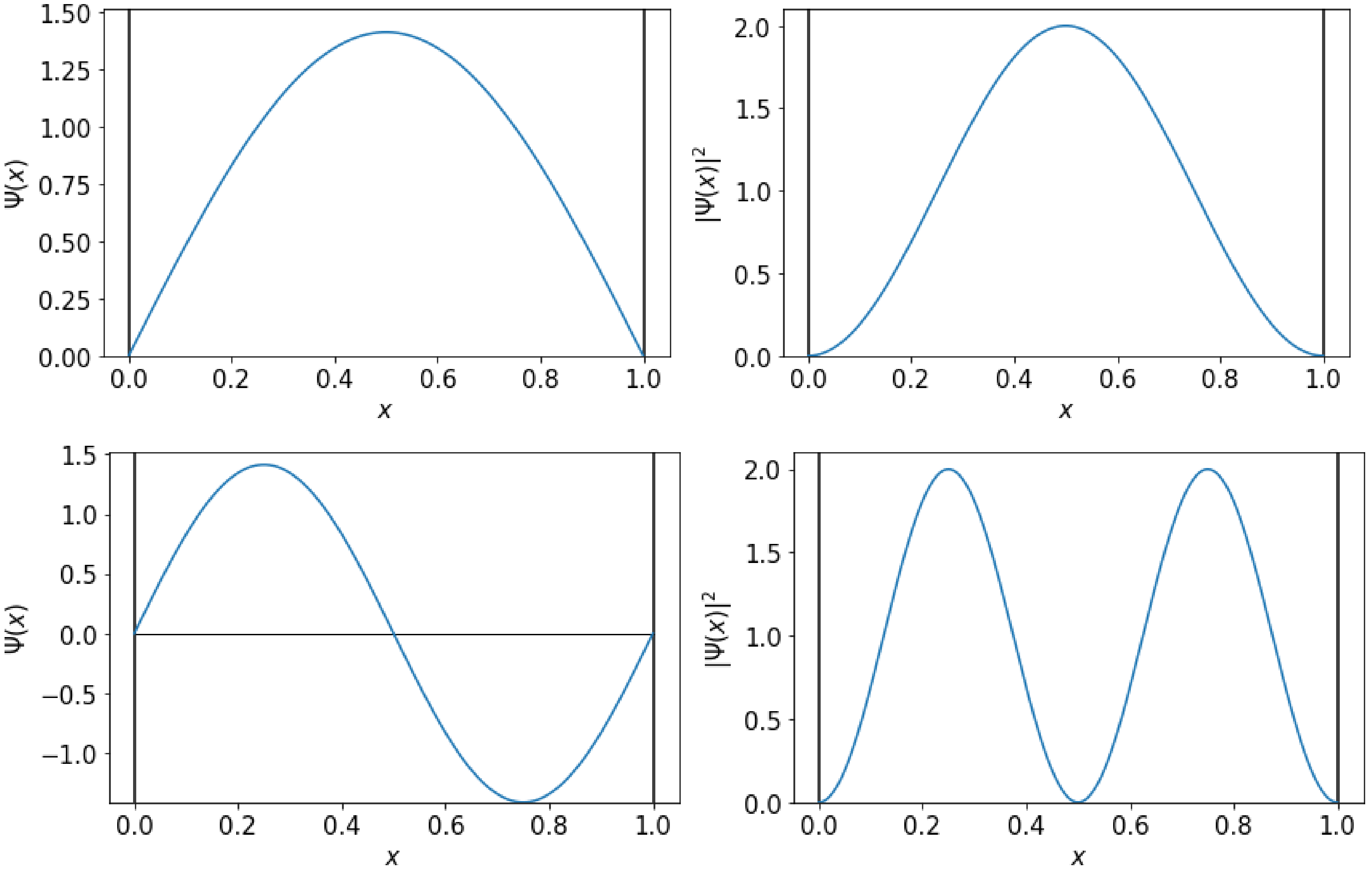
Quantização da Energia

Normalização da função de onda

$$\int_0^L |\Psi(x)|^2\,dx = 1$$

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, fora\ da\ caixa \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin(\frac{\pi n}{L}x)\end{cases}$$

Gráficos



Estado fundamental
n=1

1º estado excitado
n=2

nodo

Porque é que queremos usar o computador?

Método

Discretizar as derivadas:

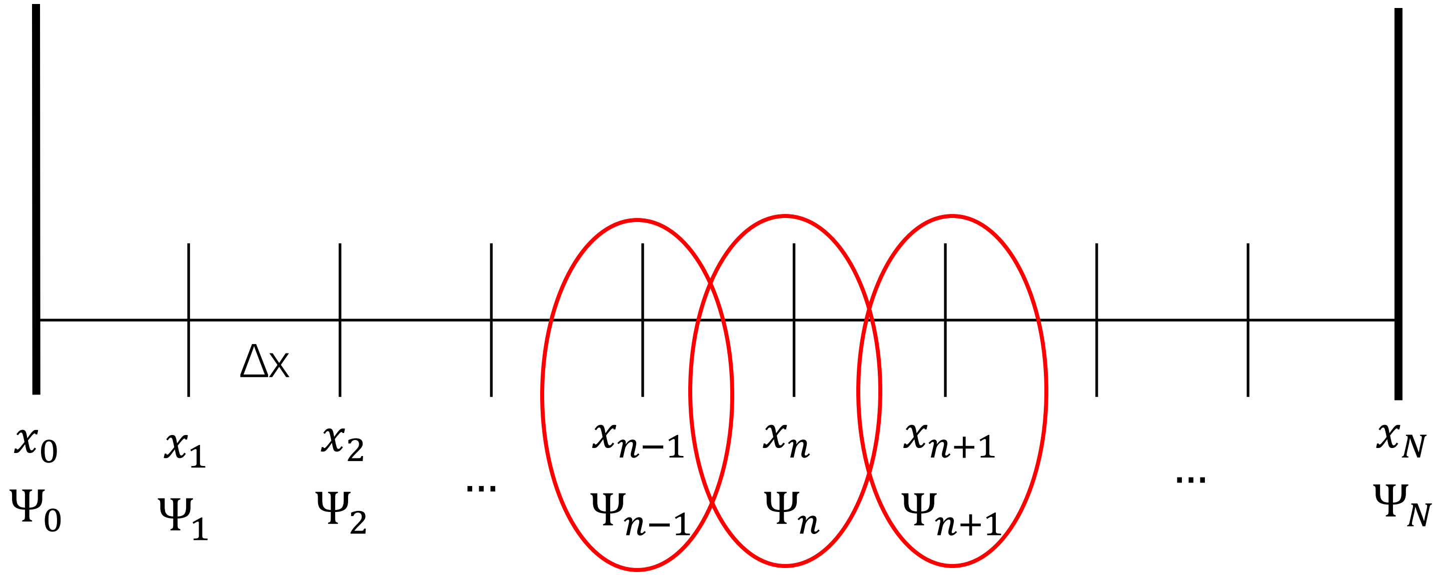
$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{1}{2\Delta x}[\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1}]$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{1}{2\Delta x^2}[\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} - 2\Psi_n]$$

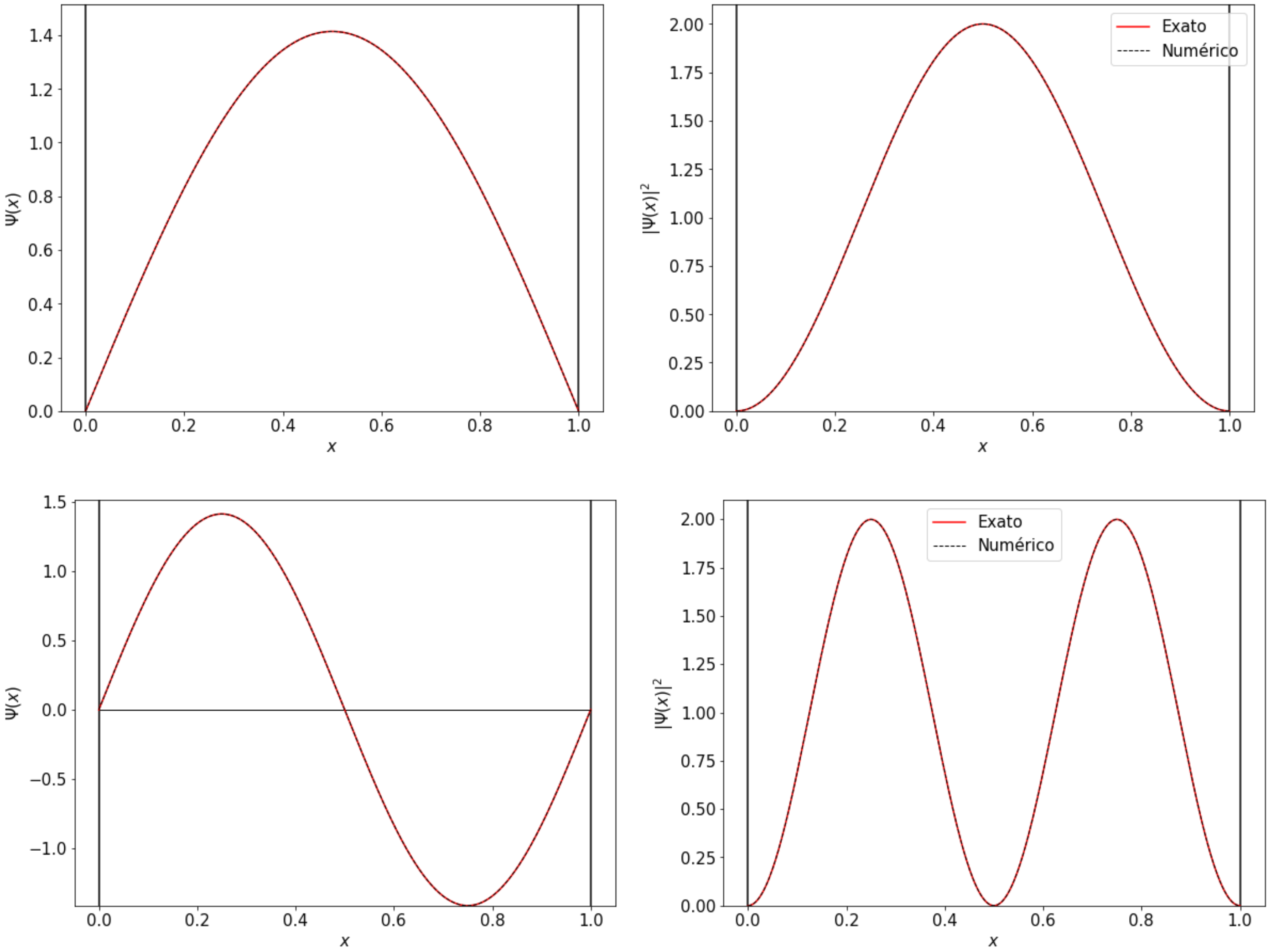
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -E'\psi(x)$$

$$\Psi_{n+1} = 2[1 - \frac{2mE_m}{\hbar^2}]\,\Psi_n - \Psi_{n-1}$$

$$\Psi_0 = 0$$
$$\Psi_1 = 1$$



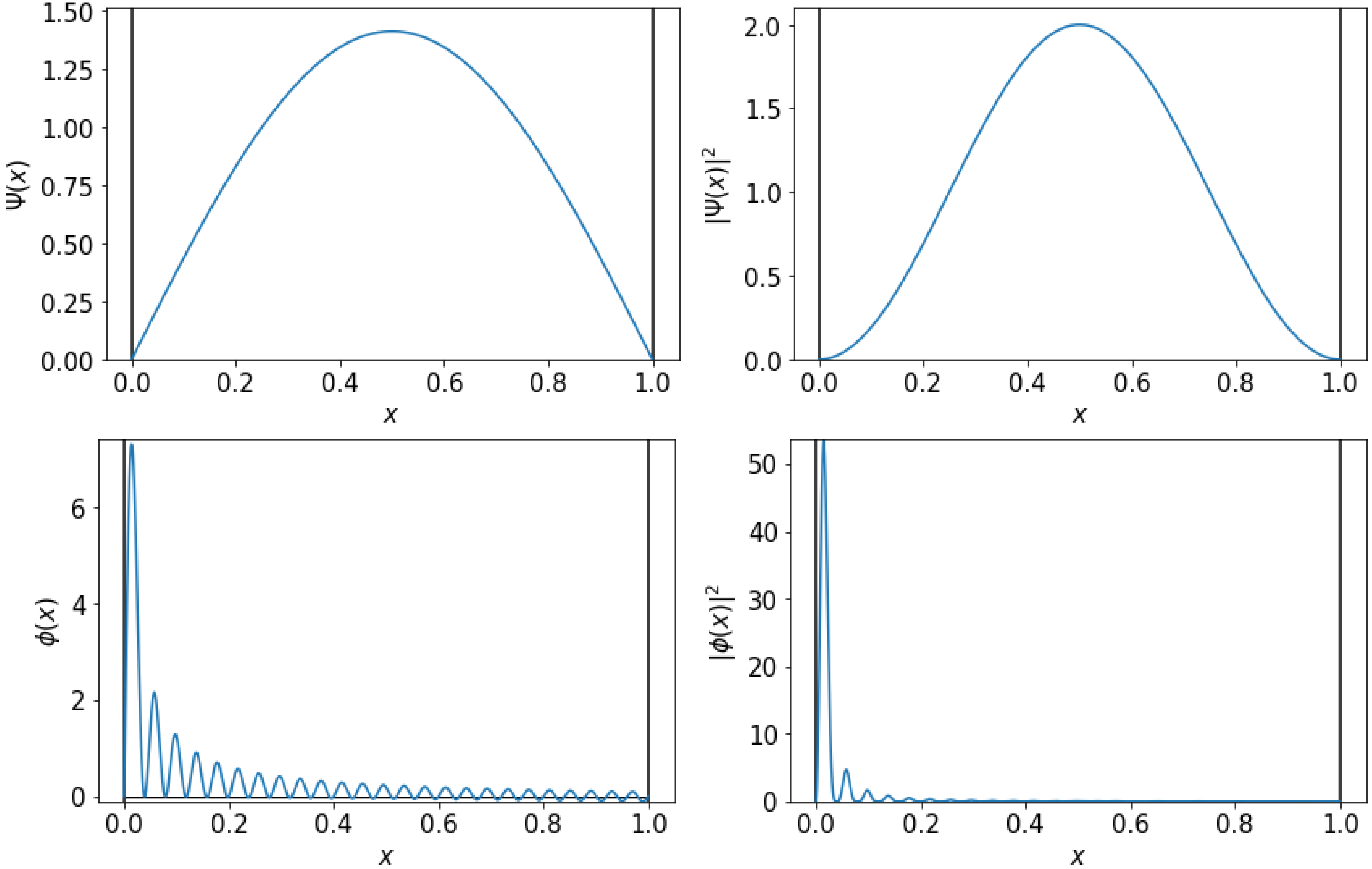
Aplicação do método



Comparação dos resultados

Curvas sobrepostas

Princípio de incerteza de Heisenberg



Não sabemos a posição

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}$$

Sabemos a posição

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\Psi_n(x)$$

CONCLUSÃO