

Poço de potencial infinito tridimensional

Carolina P. B. Vignoto

Instituto de Física *Gleb Wataghin* - Departamento de Física Aplicada

28 de Setembro de 2020



Poço infinito tridimensional

O poço de potencial infinito é definido por:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 < x < a; 0 < y < a; 0 < z < a \\ \infty, & \text{se estiver fora} \end{cases} \quad (1)$$

Sabemos que resolvendo a equação de Schrödinger obtemos a solução:

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{a}\right) \quad (2)$$

Com a energia:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (3)$$

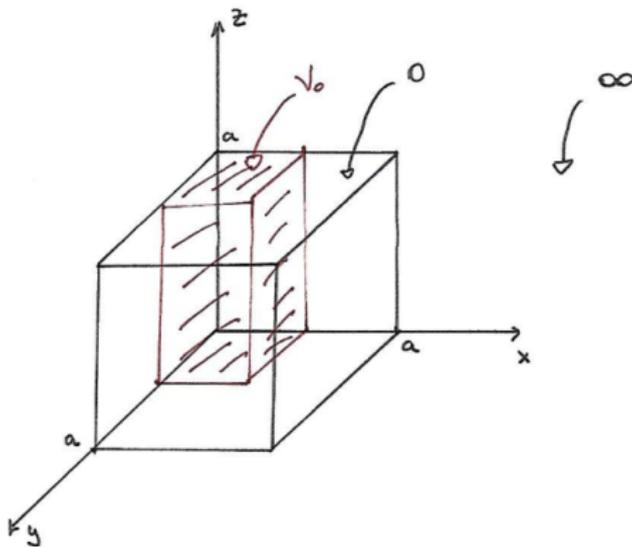
Poço infinito tridimensional

- Para o estado fundamental $\Psi_{1,1,1}$ temos a energia $E_{1,1,1} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = E_0^0$ (não é degenerado);
- Para o primeiro estado excitado: $\Psi_{2,1,1}$, $\Psi_{1,2,1}$, $\Psi_{1,1,2}$, com a energia $E_{2,1,1} = E_{1,2,1} = E_{1,1,2} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}$ (É degenerado!)

Poço infinito tridimensional

Tratando esse caso pela Teoria de Perturbação degenerada, podemos adicionar uma perturbação da seguinte forma:

$$V'(x, y, z) = \begin{cases} V_0, & \text{se } 0 < x < a/2; 0 < y < a/2; 0 < z < a \\ 0, & \text{se estiver fora mas dentro da caixa.} \end{cases} \quad (4)$$



Poço infinito tridimensional

Seguindo os passos apresentados no slide 3 da última aula, temos que primeiramente determinar a matriz $V_{m',m} = \langle \Psi_{m'}^0 | V' | \Psi_m^0 \rangle$.

- Para o 1º estado excitado temos os estados:

$$\Psi_{2,1,1} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right);$$

$$\Psi_{1,2,1} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right);$$

$$\Psi_{1,1,2} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right)$$

Onde cada elemento será dado pela integral:

$$V_{m',m} = \int_0^{a/2} dx \int_0^{a/2} dy \int_0^a dz V_0 \Psi_{m'}'^* \Psi_m \quad (5)$$

Poço infinito tridimensional

Construindo a matriz temos que os elementos:

- $V_{11} = V_{22} = V_{33} = \frac{V_0}{4}$; $V_{12} = V_{13} = 0$; $V_{23} = \frac{16}{9\pi^2} V_0$

Então:

$$V_{m',m} = \begin{pmatrix} \frac{V_0}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{V_0}{4} & \frac{16V_0}{9\pi^2} \\ 0 & \frac{16V_0}{9\pi^2} & \frac{V_0}{4} \end{pmatrix} = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & b \\ 0 & b & 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Poço infinito tridimensional

- Vamos calcular o determinante: $\det[V_{m',m} - \alpha \mathbb{I}] = 0$

$$\det \begin{vmatrix} 1 - \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \alpha & b \\ 0 & b & 1 - \alpha \end{vmatrix} = (1 - \alpha)^3 - b^2(1 - \alpha) = 0 \quad (7)$$

- Chegamos que os autovalores são: $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 1 + b$, $\alpha_3 = 1 - b$.

Poço infinito tridimensional

Esses autovalores são a correção de energia de primeira ordem. Então podemos escrever, pela expansão em λ , que as energias dos estados perturbados: $\Delta_I = E_D - E_1^0 = \lambda \Delta_I^{(1)}$

$$E_D = \begin{cases} E_1^0 + \lambda \frac{V_0}{4} \\ E_1^0 + \lambda \frac{V_0}{4}(1 + b) \\ E_1^0 + \lambda \frac{V_0}{4}(1 - b) \end{cases} \quad (8)$$

onde $E_1^0 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$.

Poço infinito tridimensional

Para obter os auto-vetores associado a cada auto-valor, voltamos para a equação $\sum_m V_{m',m} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle = \Delta_l^{(1)} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle$.

Chegando em:

$$\Psi_{Di} = \begin{cases} \Psi_{1,1,2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{1,2,1} + \Psi_{2,1,1}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{1,2,1} - \Psi_{2,1,1}) \end{cases} \quad (9)$$

Potencial de polarização (aproximação adiabática)

Considere um sistema com uma interação de longo alcance entre um elétron e um átomo de hidrogênio no estado fundamental.



- **Objetivo:** Mostrar, através da teoria de perturbação, que a interação é atrativa e vai com $1/r^4$, onde r é distância entre o próton de H e o elétron distante (considerado em "repouso").

Potencial de polarização (aproximação adiabática)

Podemos escrever a Hamiltoniana na forma $H = H_0 + V$ onde,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 - \frac{e^2}{r'} \quad (10)$$

$$V = -\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (11)$$

Vamos utilizar o mesmo raciocínio que foi apresentado na última aula para a interação H-H. Começamos reescrevendo o potencial V .

Potencial de polarização (aproximação adiabática)

Considerando que r é grande podemos expandir V em potências de r_i/r .
Vimos na última aula que:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \left[1 + \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r} - \frac{1}{2} \left(\frac{r'}{r} \right)^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r} \right)^2 + O(3) \right] \quad (12)$$

Utilizando só os dois primeiros termos da expansão temos que:

$$\begin{aligned} V &= -\frac{e^2}{r} + e^2 \frac{1}{r} \left[1 + \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r} + \dots \right] \\ &\approx -\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r} + e^2 \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \\ &= e^2 \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \end{aligned}$$

Potencial de polarização (aproximação adiabática)

Considerando $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{z}}$ e $\mathbf{r}' = x'\hat{\mathbf{x}} + y'\hat{\mathbf{y}} + z'\hat{\mathbf{z}}$. Então

$$V(r) = e^2 \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} = \frac{e^2}{r^2} z' \quad (13)$$

Pelo mesmo argumento do exemplo H-H a correção de primeira ordem em energia:

$$E^{(1)} = \langle U_{100}^{(0)}(\mathbf{r}') | V | U_{100}^{(0)}(\mathbf{r}') \rangle = 0 \quad (14)$$

E a segunda ordem da correção de energia será:

$$E^{(2)} = \frac{e^4}{r^4} \sum_{k \neq 0} \frac{|\langle k^{(0)} | z' | 0^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (15)$$