Física Moderna I
Aula 13

Marcelo G Munhoz
Edifício HEPIC, sala 212, ramal 916940
munhoz@if.usp.br

Equação de Schroedinger Independente do tempo

- Vamos encontrar a solução para a equação de Schroedinger independente do tempo

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

para diversas formas do potencial *V(x)*

- A forma mais simples para esse potencial é quando *V(x)* = *constante* (cujo valor pode ser zero), que corresponde a uma partícula livre

Partícula livre

- Já vimos que a solução da equação de Schroedinger para uma partícula livre é dada por

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} = Ae^{ikx} \cdot e^{-i\omega t} = Ae^{ikx} \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

que não permite uma normalização da densidade de probabilidade pois isso exigiria que fosse possível fazer:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = 1$$

- Essa solução descreve uma partícula de energia e momento bem definidos (valores de *E* e k), porém de posição totalmente desconhecida, que é coerente com o princípio da incerteza

Partícula livre

- Esse problema pode ser resolvido criando-se um pacote de ondas, dado por:

  $$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \cdot e^{i(kx-wt)} dk$$

  que limita a extensão espacial da função de onda as custas de uma indefinição no momento, preservando a compatibilidade com o princípio de incerteza

Partícula presa em uma “caixa”

- Uma outra maneira de se obter a normalização da função de onda é impondo uma região do espaço que limita a presença da partícula
- Isso pode ser feito “colocando” a partícula dentro de uma “caixa” da qual ela não pode sair
- Isso equivale a criar um “poço” de potencial cujos “lados” são infinitos, isto é, para qualquer valor de energia da partícula, ela será sempre menor que o limite do poço.

Partícula presa em uma “caixa”

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

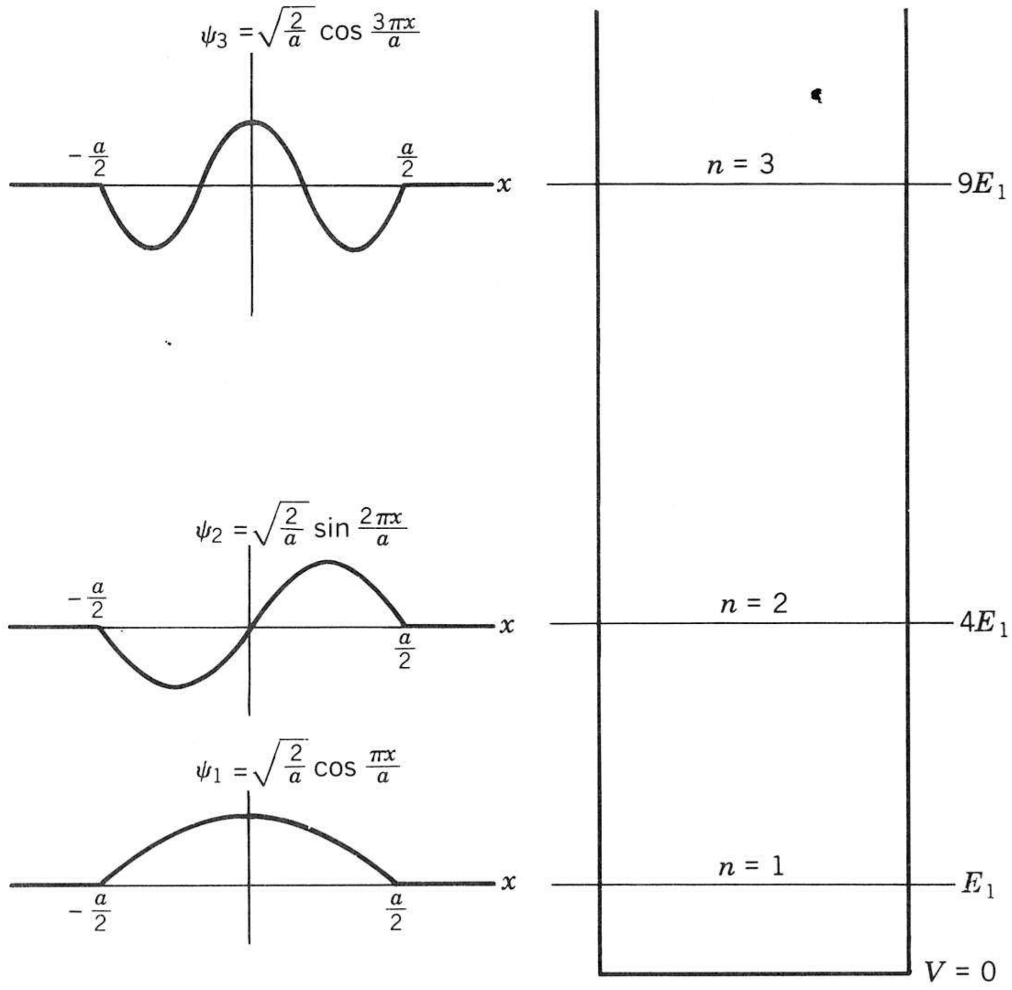
para n=1,3,5,...

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot sen\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

para n=2,4,6,...

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$$

para n=1,2,3,4,...



Partícula presa em uma “caixa”

- É interessante notar que a energia de menor valor possível não é zero, mas

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

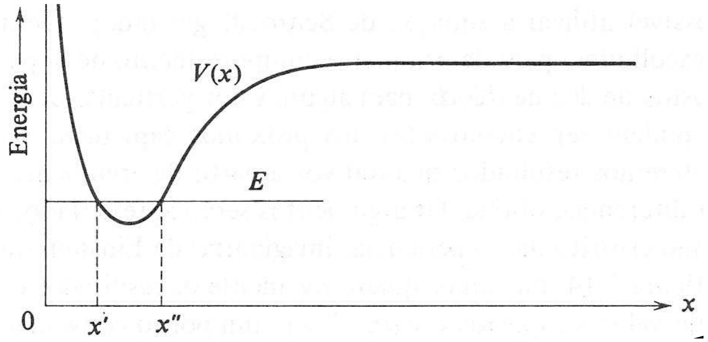
- Isso é consequência do princípio da incerteza, pois estando a partícula confinada em uma espaço bem determinado (não é infinito), seu momento (e consequentemente energia) precisa ter uma incerteza, garantida pela energia não-nula. Portanto, como:

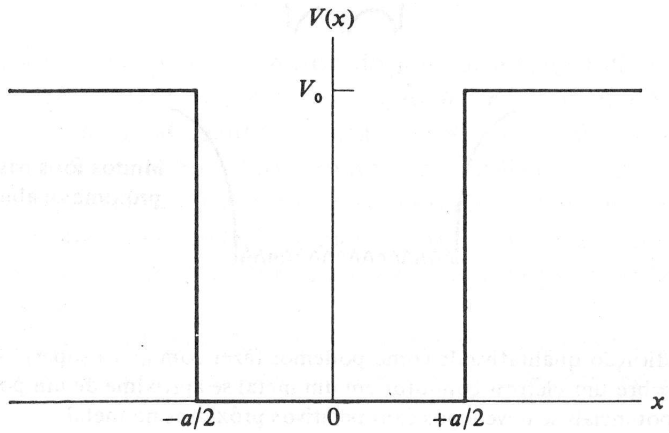
$\Delta x = a$ e $\Delta p \sim 2 \cdot p = 2 \cdot \sqrt{2mE} = 2 \cdot \pi\hbar/a$

tem-se: $\Delta x \Delta p \sim 2\pi\hbar$

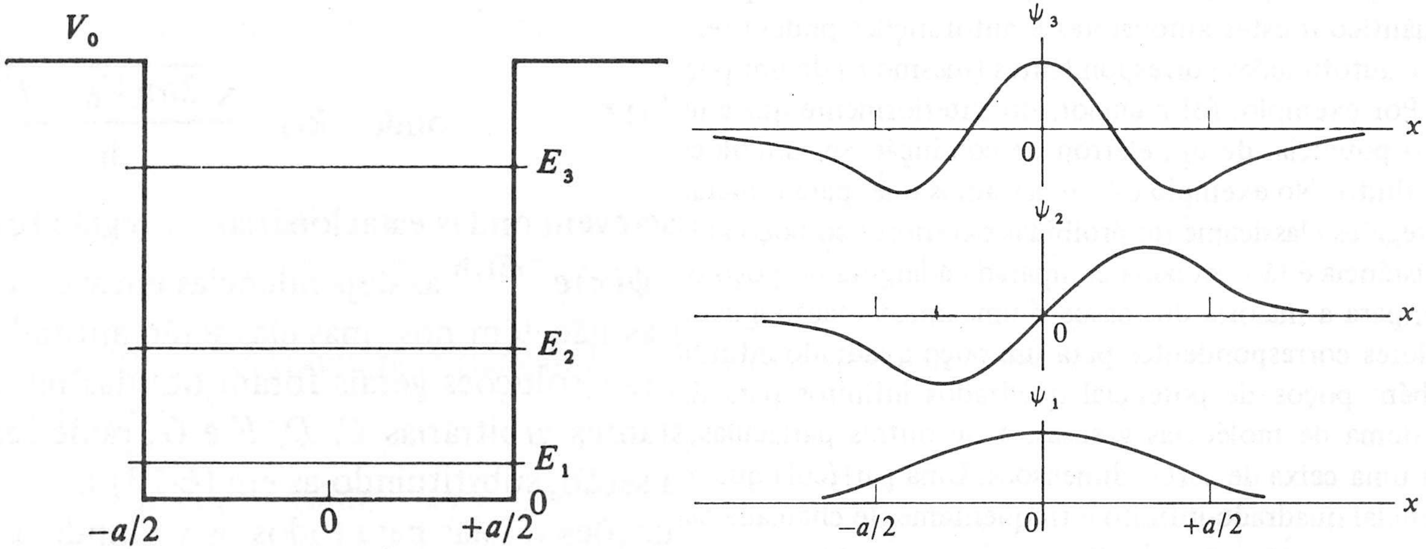
Partícula em um poço finito quadrado

- Uma situação mais realista do que o poço infinito corresponde ao poço finito
- Este potencial pode reproduzir uma partícula "presa" (chamado de sistema ligado), como um elétron em um átomo, e que também pode se desprender (o átomo pode ser ionizado)
- Para facilitar a resolução do problema, podemos supor o poço quadrado



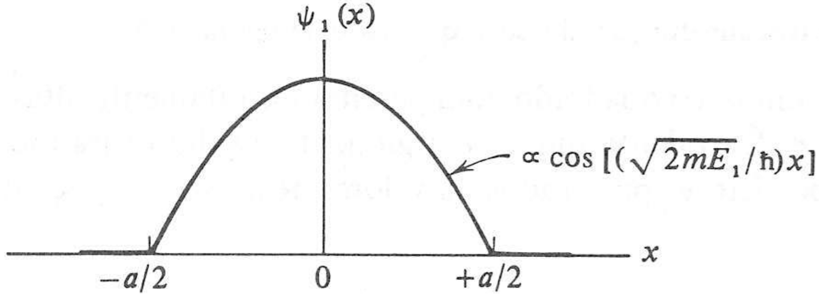


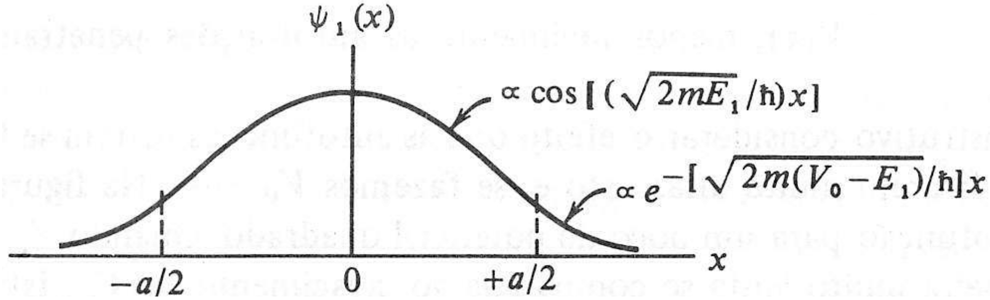
Partícula em um poço finito quadrado



- A solução deste problema envolve a resolução de um sistema de 4 equações (condições de continuidade) mais a normalização e 5 incógnitas, incluindo a energia do sistema

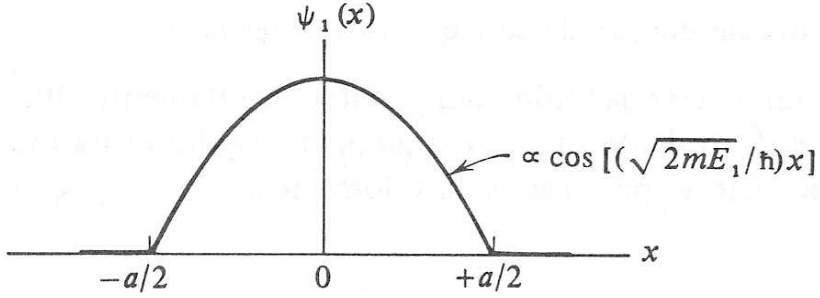
Partícula em um poço finito quadrado

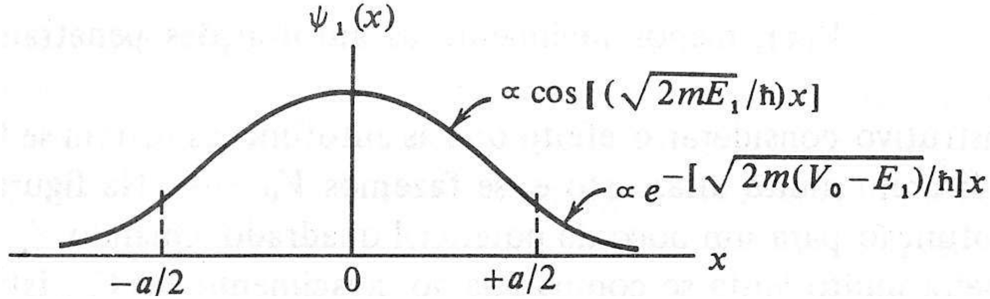




- Comparando-se o primeiro estado do sistema para o poço infinito e o poço finito, nota-se que quanticamente existe uma probabilidade da partícula "sair" do poço finito
- Como podemos compreender esse efeito?

Partícula em um poço finito quadrado





- Esse é um efeito puramente quântico, isto é, não há correspondente na física clássica, pois ele leva à situação:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x) \Rightarrow \frac{p^2}{2m} < 0$$

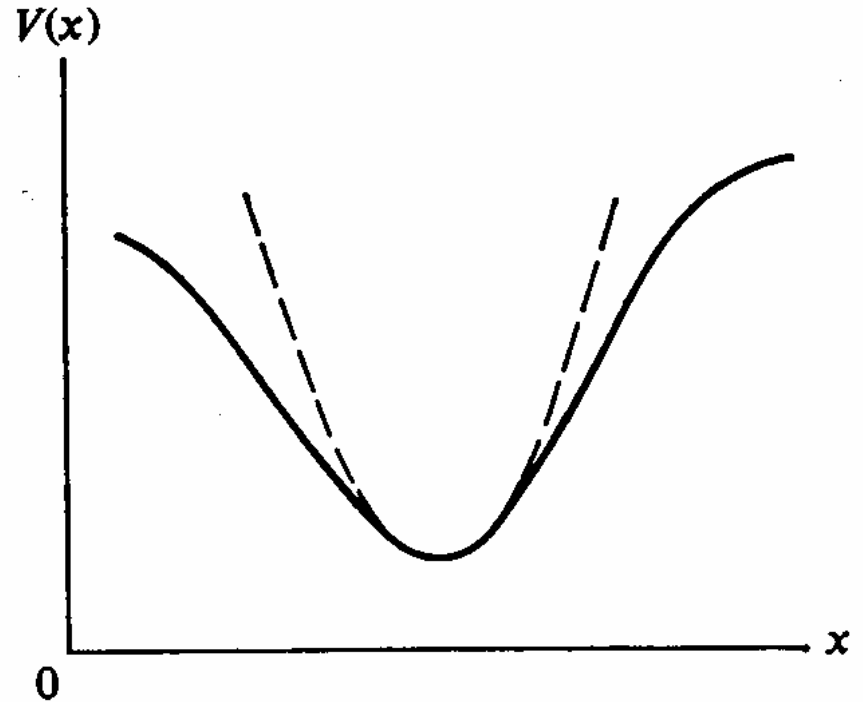
- Porém, ele pode ser compreendido pelo princípio da incerteza

Oscilador Harmônico

- O oscilador harmônico é de extrema importância na física pois é um protótipo de qualquer sistema que envolva oscilações

- Para pequenas oscilações, normalmente, pode-se aproximar o potencial para:

$$V(x) = \frac{C}{2}x^2$$



Oscilador Harmônico

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

$$E_n = (n + 1/2)h\nu$$

$$\psi_n(x) = H_n[u(x)]e^{-u(x)^2/2}$$

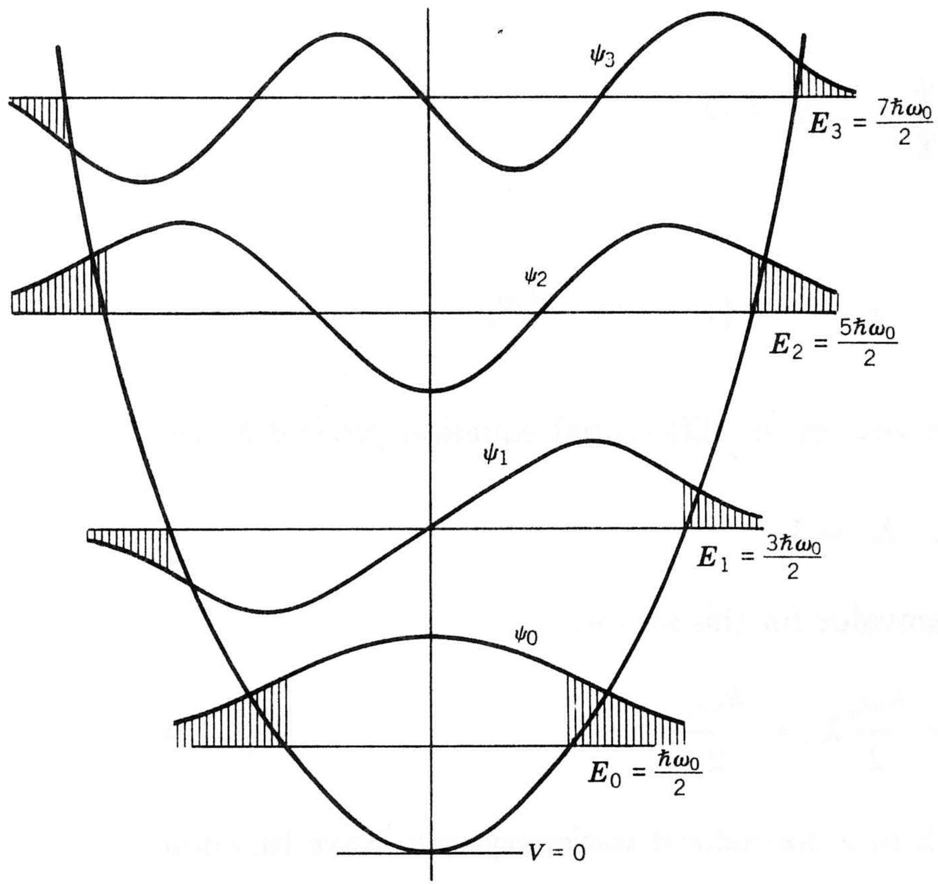
onde: $u(x) = \left[\frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}\right]x$

$$H_0[u(x)] = 1$$

$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$

$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$

$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$



Soluções da Equação de Schroedinger Independente do tempo

- Sistemas físicos como aqueles discutidos nesta aula, são chamados de sistemas ligados, pois a partícula em questão está limitada a uma certa região do espaço.
- O que acontece com a função de onda e a energia de sistemas não ligados, ou seja, para aqueles em que não há uma limitação da posição onde a partícula pode ser encontrada?