

Instituto de Física USP

Física V - Aula 27

Professora: Mazé Bechara

Aula 27 - Mecânica quântica de Schroedinger aplicada a estados ligados em movimentos unidimensionais.

1. **Completando a Aplicação: funções de onda e seus resultados na interpretação de Max Born.**
2. **Estados estacionários na mecânica de Schroedinger – um conjunto de soluções possíveis para os potenciais conservativos na física clássica. Ou a equações de Schroedinger independente do tempo; ou os auto-estados de energia ; ou os estados de energia constante.**
3. **Estados estacionários e ligados de uma partícula presa em uma caixa em movimento unidimensional com potencial finito nos extremos da caixa – as auto-funções de de energia em termos de constantes não nulas.**
4. **A solução das funções de auto-funções da energia e seus auto-valores no caso de potencial infinito nos extremos da caixa.**

Aplicação - interpretações na mecânica quântica

continuação da Aula 26

Uma partícula de massa m tem funções de onda abaixo: mais questões à Questão Q7 do Guia ao tópico IV

$$\Psi(0 \leq x \leq a, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2} n^2 t\right)$$
$$\Psi(x \leq 0, t) \sim 0$$
$$\Psi(x \geq a, t) \sim 0$$

- (g) Não são contraditórias as respostas aos dois itens anteriores (p não é constante de movimento e p^2 o é)? Justifique e comente.
- (h) O que é possível prever, usando a função de onda espaço temporal, sobre o resultado de uma única medida das seguintes grandezas físicas da partícula: f1 posição; f2 energia; f3 momento linear? Justifique suas respostas.
- (i) Responda o mesmo que no item anterior no caso de cem (100) medidas. Justifique.
- (j) O que é mostrar formalmente que as funções de onda dadas são compatíveis com o princípio de incerteza? Faça detalhadamente em casa!
- (k) Determine o potencial de interação desta partícula em todo o espaço x .
- (l) Comente sobre as propriedades da função de onda dada, e as condições gerais que qualquer função de onda deve obedecer dada a interpretação probabilística da função de onda.

A equação de Schroedinger para todas as partículas em movimento não relativístico



$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r}, t)\right\}\Psi(\vec{r}, t) = \left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right\}\Psi(\vec{r}, t)$$

Propriedades das funções de onda decorrentes da interpretação probabilística

1. As **funções de onda** devem ser: **unívocas**, porque a probabilidade (módulo ao quadrado das funções) em cada ponto tem que ter valor único; **contínuas**, porque as probabilidades não podem ter valores indefinidos em algum ponto do espaço; **finitas em todos os pontos** do espaço, porque probabilidades são finitas.
2. As **funções de onda de estados ligados** (que descrevem partículas que ocupam região finita do espaço) devem ser **normalizadas**, ou seja, a probabilidade de estar em ponto de todo o espaço deve ser 1:

$$\iiint |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \Rightarrow \Psi(\pm\infty, t) = 0$$

Para que seja possível a normalização acima, é obrigatório que a função de onda tenda a zero quando as coordenadas tendem a infinito.

Propriedades decorrentes Da Interpretação Probabilística

3. As **derivadas espaciais das funções de onda** também devem ser: **unívocas, contínuas e finitas em todo o espaço**. As derivadas estão associadas aos valores das componentes do momento linear p no espaço das funções de onda espaço-temporal, e devem ser unívocos e finitos.

☠ ***Cuidado com o caso particular de energia potencial "infinita" em alguns pontos ou regiões do espaço, aproximação no caso de energias potenciais muito maiores do que a energia total, e usada como boa aproximação da realidade. Nestes casos não há continuidade das derivadas das funções de onda. Mas há continuidade das funções de onda!***

A equação de Schroedinger independente do tempo e os estados estacionários

(demonstração em aula)

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r})\right\}\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

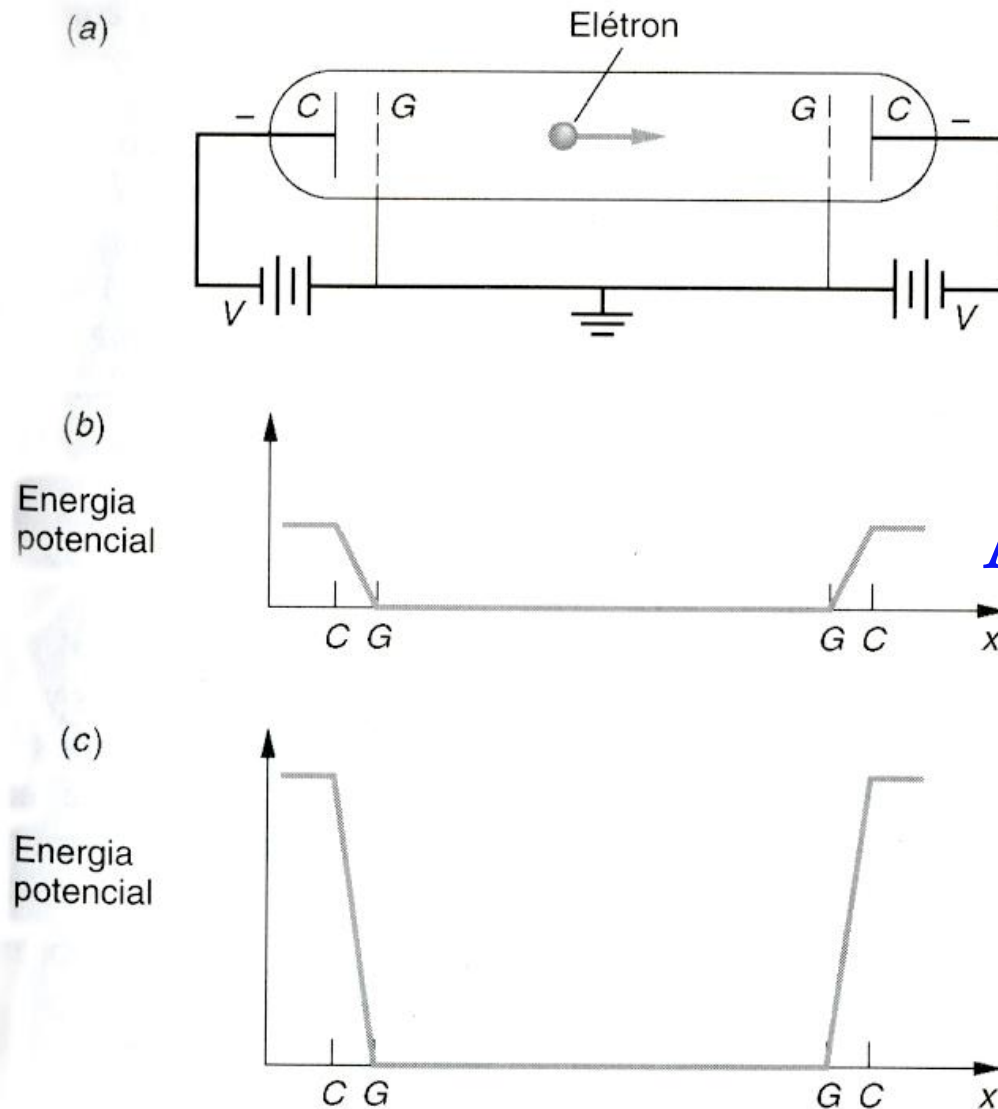
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right\}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$$\left\{i\hbar\frac{d}{dt}\right\}T(t) = ET(t)$$

→



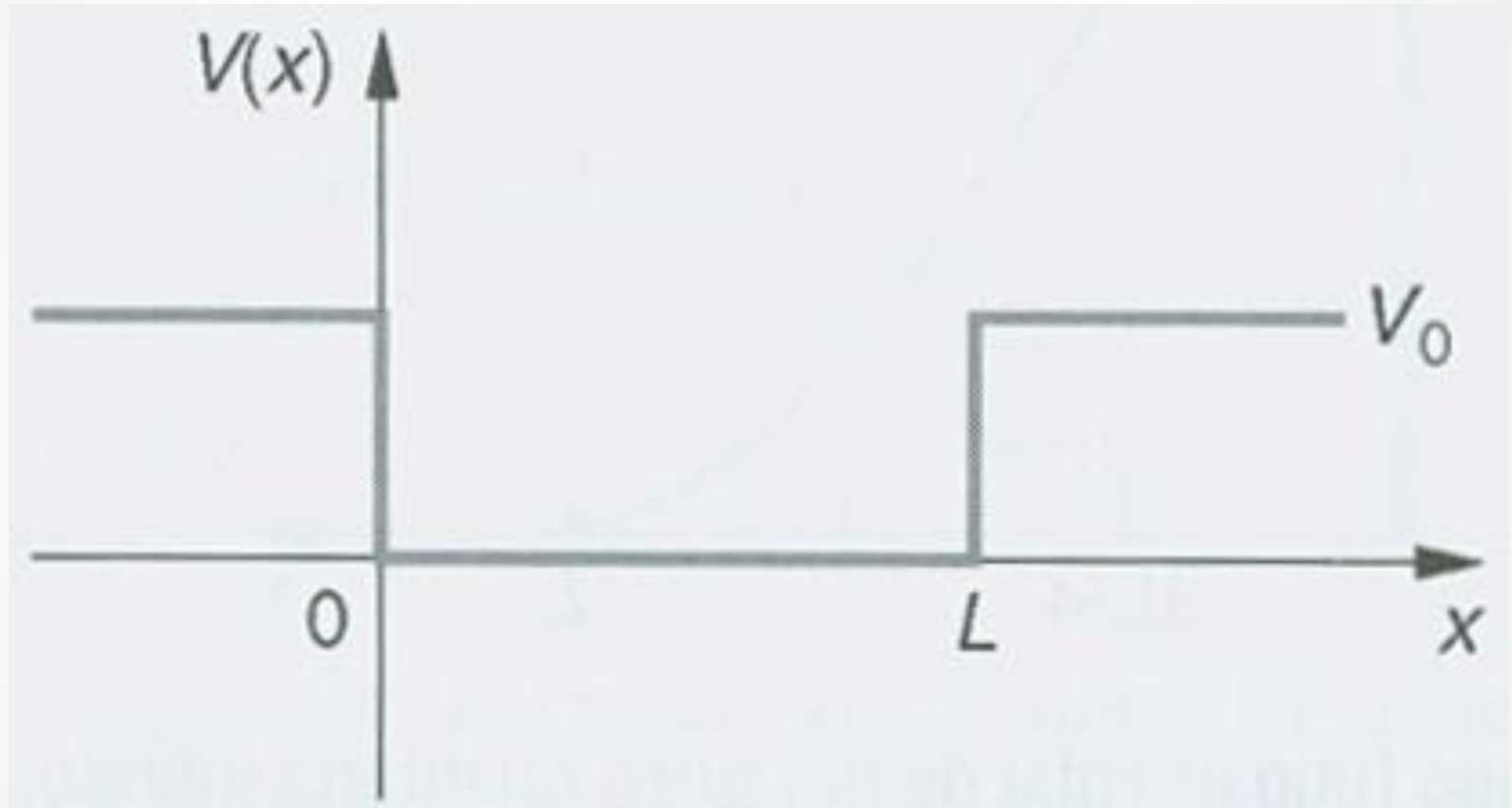
$$\frac{dT}{T} = -i\frac{E}{\hbar}dt \quad \int_{T_0}^T \frac{dT}{T} = \int_0^t -i\frac{E}{\hbar}dt \quad T(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$



**APLICAÇÃO
realista**

Fig. 6-1 (a) Um elétron que se encontra na região entre as duas grades G não experimenta nenhuma força, já que as grades estão aterradas. Nas regiões entre as grades G e os eletrodos C , porém, existe um campo elétrico cuja intensidade depende do valor da tensão V . (b) Quando V é pequena, o gráfico da energia potencial do elétron em função de x apresenta “paredes” pequenas e com uma inclinação suave. (c) Quando V é grande, as paredes são altas e íngremes, tornando-se intransponíveis quando $V \rightarrow \infty$.

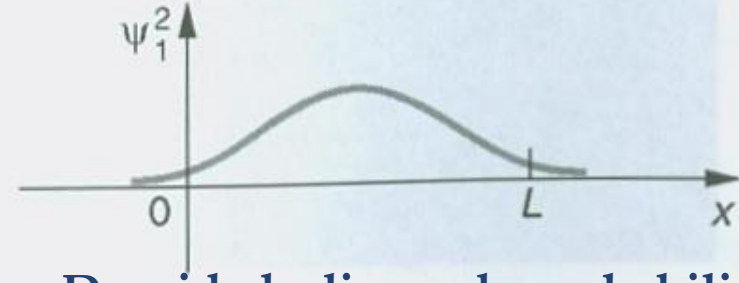
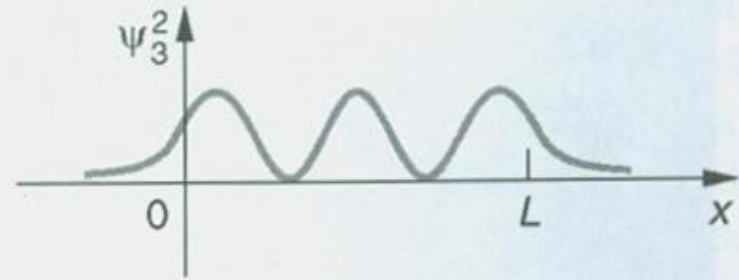
“Poço” de potencial esquemático potencial finito



Física Clássica → Quântica

- Para $T=E-V(x)>0 \rightarrow E>V(x)$ para todo x
- $0<E<V_0$
- Física Clássica: $0<x<L \rightarrow$ trajetórias finitas.
 - Quântica: estados ligados $\rightarrow$ posições possíveis: $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$.
 - $E>V_0$
- Física Clássica: $-\infty<x<+\infty \rightarrow$ trajetórias infinitas
 - Quântica: estados não ligados (ou de espalhamento no caso geral que é de transmissão e reflexão no caso unidimensional) $\rightarrow$ posições possíveis: $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$.

Estados de E constante do “poço” de potencial finito unidimensional



Funções de onda

Densidade linear de probabilidade

Equações, soluções e interpretações em aula



☠ *“Anyone at present in this room has a finite chance of leaving it without opening the door - or, of course, without being thrown out the window” - George Gamow*

Características das soluções

Funções de onda e densidades de probabilidades:

1. Oscilações na região do centro do potencial e tendendo a zero quando $x \rightarrow \infty$
2. Normalizáveis
3. Probabilidades não nulas em regiões classicamente proibidas, que no caso da “caixa” de potencial, significa que passou pela “parede”.
4. As condições de continuidade mais a normalização vão restringir (QUANTIZAR) os valores de energia: AGUARDEM!

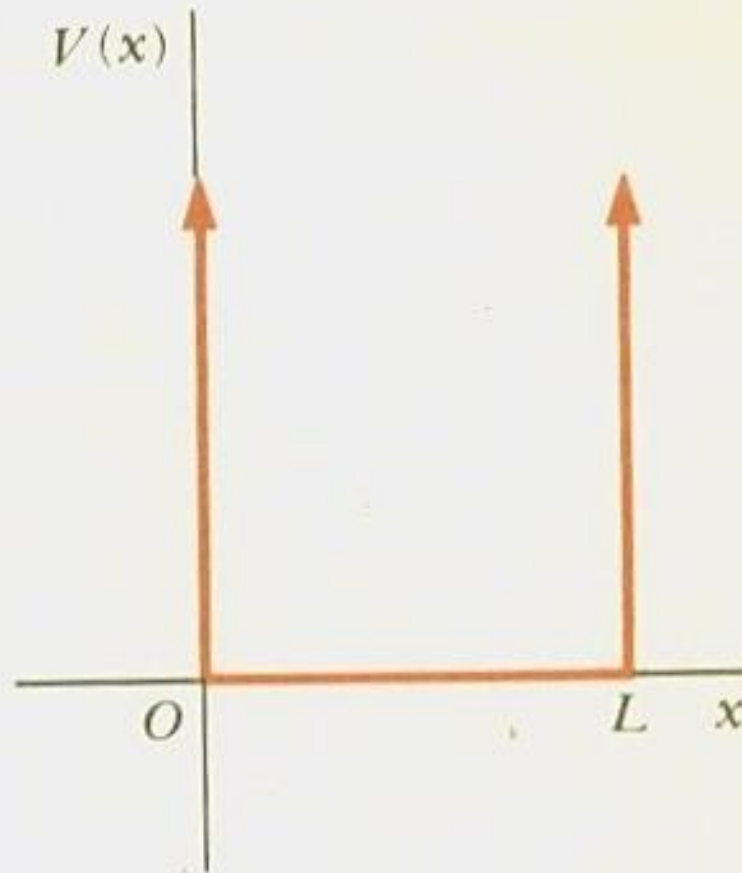


Fig. 6.1 Energia potencial de poço quadrado infinito. Para $0 < x < L$, a energia potencial $V(x)$ é nula. Fora dessa região, $V(x)$ é infinita. A partícula está confinada à região no poço $0 < x < L$.

“Poço” de potencial infinito unidimensional

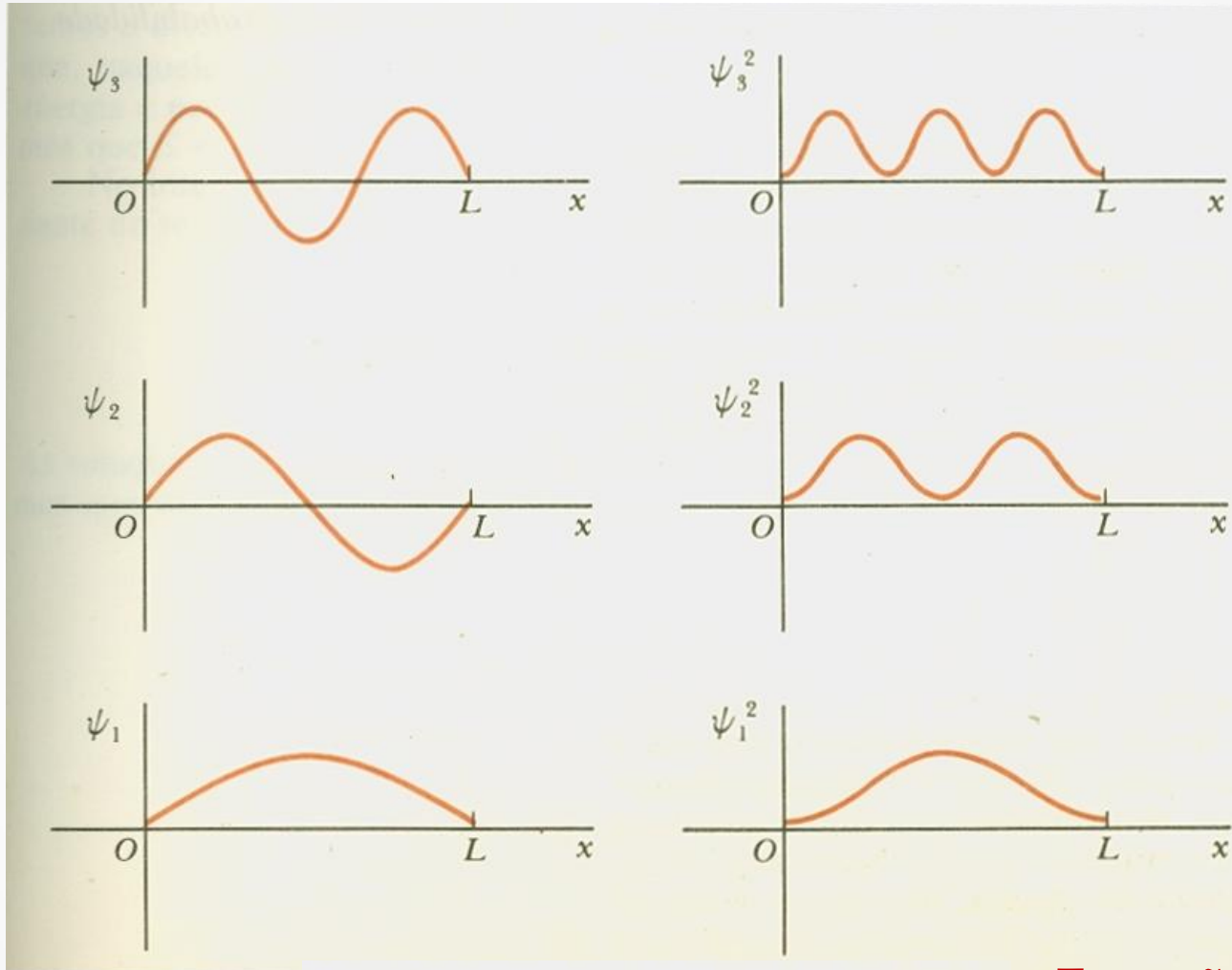
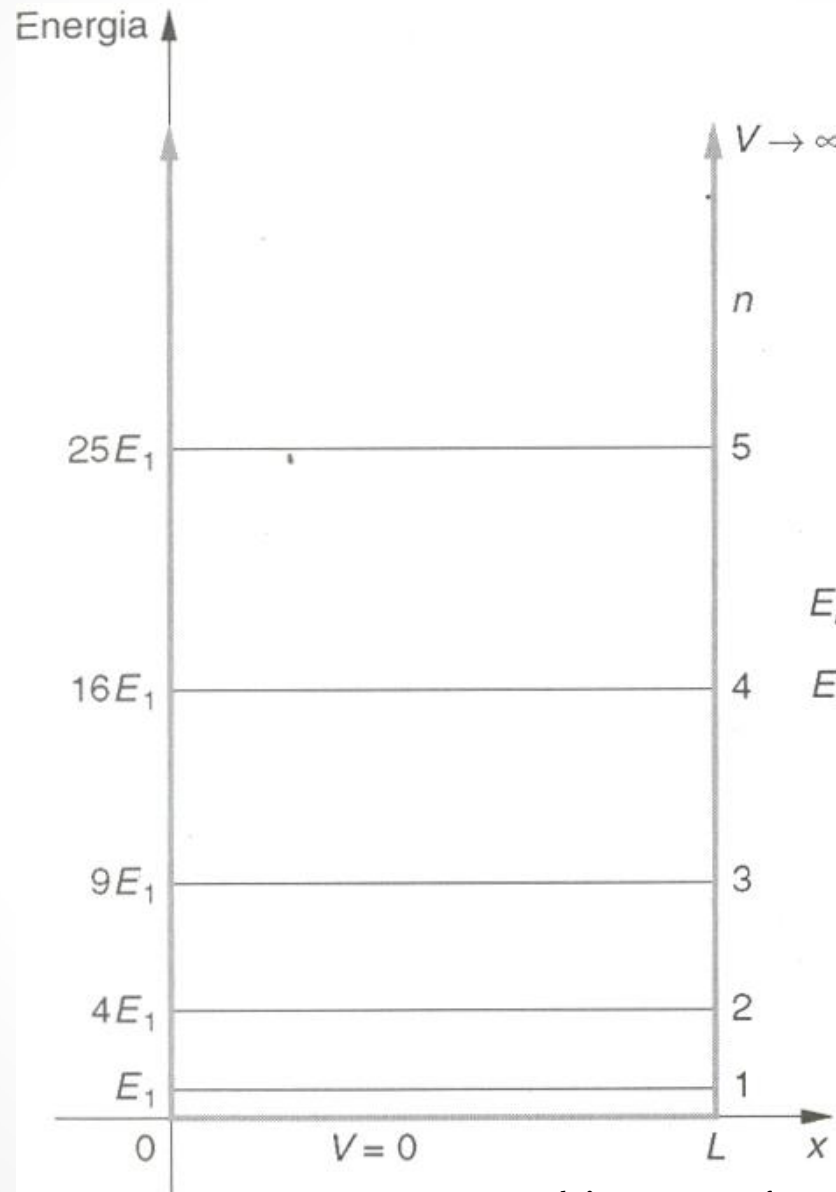


Fig. 6.3 Funções de onda $\psi_n(x)$ e densidades de probabilidade $P_n(x) = \psi_n^2(x)$ para $n = 1, 2$ e 3 para o potencial de poço quadrado infinito.

Equações, soluções e interpretações em aula

Energias do “poço” de potencial infinito



Energia coincidente com a da onda de de Broglie e a quantização de Wilson-Sommerfeld

$$E_n = n^2 E_1$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

soluções e interpretações em aula