Instituto de Física
USP

Física V - Aula 31

Professora: Mazé Bechara

Aula 31 - Mecânica quântica de Schroedinger aplicada a estados ligados em movimentos unidimensionais.

1. **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.**

2. **Estados estacionários e ligados de uma partícula presa em uma caixa em movimento unidimensional com potencial finito nos extremos da caixa - uma análise qualitativa: da física clássica para a física quântica. As auto-funções de de energia em termos de constantes não nulas, para os estados ligados.**

3. **A solução das funções de auto-funções da energia e seus auto-valores no caso de potencial infinito nos extremos da caixa. Comparação das energias com os resultados da onda de de Broglie e da quantização de Wilson-Sommerfeld.**

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

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

A equação de Schroedinger para o caso de potenciais conservativos da Física Clássica - para um conjunto particular de soluções

I. O que acontece nas situações de potenciais conservativos na Física Clássica, ou seja, dependentes apenas da posição?

II. Neste caso existe um conjunto de soluções particulares, entre todas as possíveis, tal que a função de onda pode ser escrita como o produto de uma função só da posição por outra só do tempo.

III. Vai daí que...

A equação de Schroedinger independente do tempo: autofução do operador energia (demonstração em aula)

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

$$\{ih\frac{d}{dt}\}T(t) = ET(t)$$

$$\frac{dT}{T} = -i\frac{E}{\hbar}dt$$

$$\int_{T_o}^{T}\frac{dT}{T} = \int_{0}^{t} -i\frac{E}{\hbar}dt \quad \rightarrow \quad T(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

As autofuções de energia para qualquer potencial de interação - estados estacionários

$$\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})T(t) = \varphi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 = \left|\varphi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right|^2 = \left|\varphi(\vec{r})\right|^2$$

APLICAÇÃO unidimensional realista

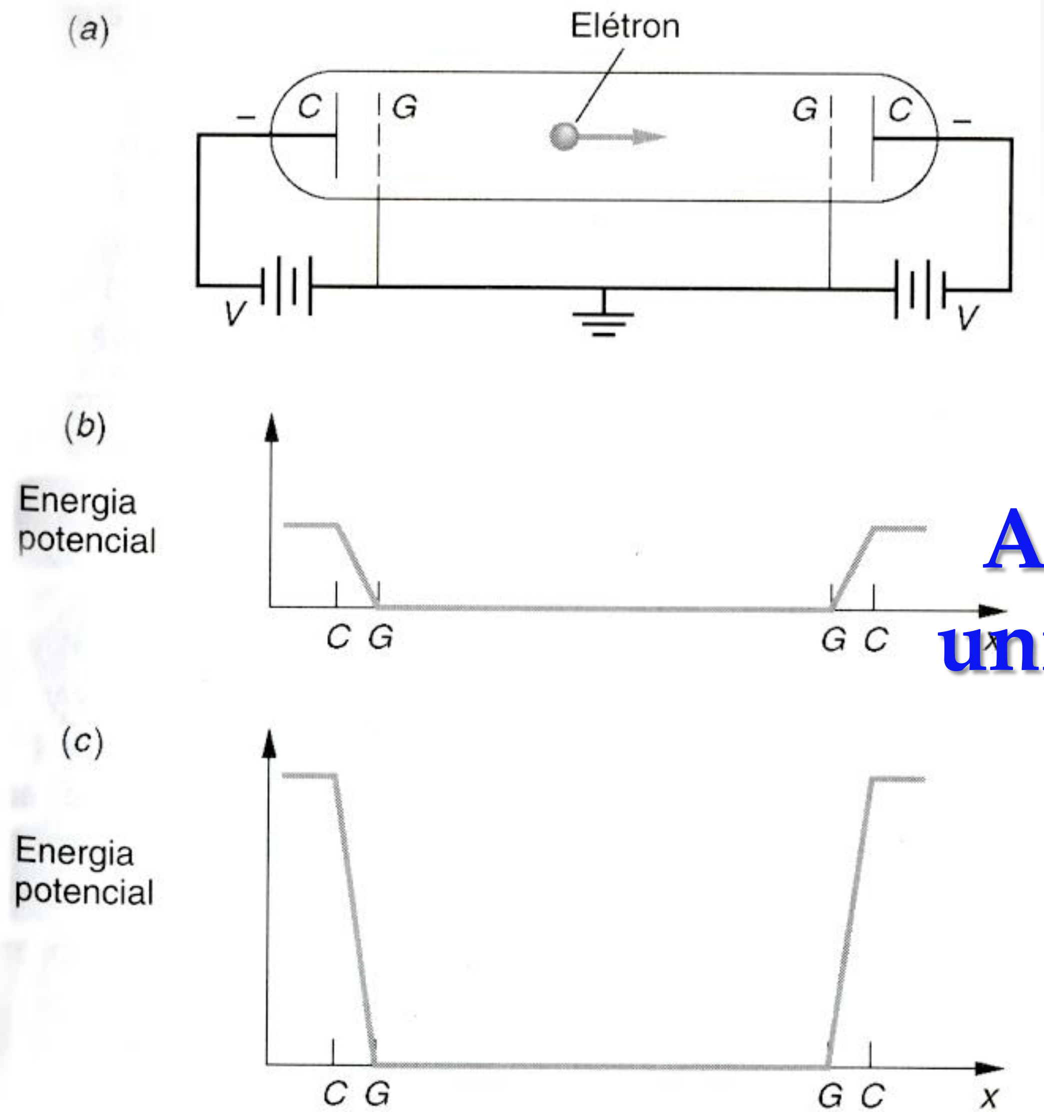


Fig. 6-1 (*a*) Um elétron que se encontre na região entre as duas grades *G* não experimenta nenhuma força, já que as grades estão aterradas. Nas regiões entre as grades *G* e os eletrodos *C*, porém, existe um campo elétrico cuja intensidade depende do valor da tensão *V*. (*b*) Quando *V* é pequena, 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 $V \to \infty$.

Figura do Tipler & Llewellyn

“Poço” de potencial esquemático de potencial V_o (finito)

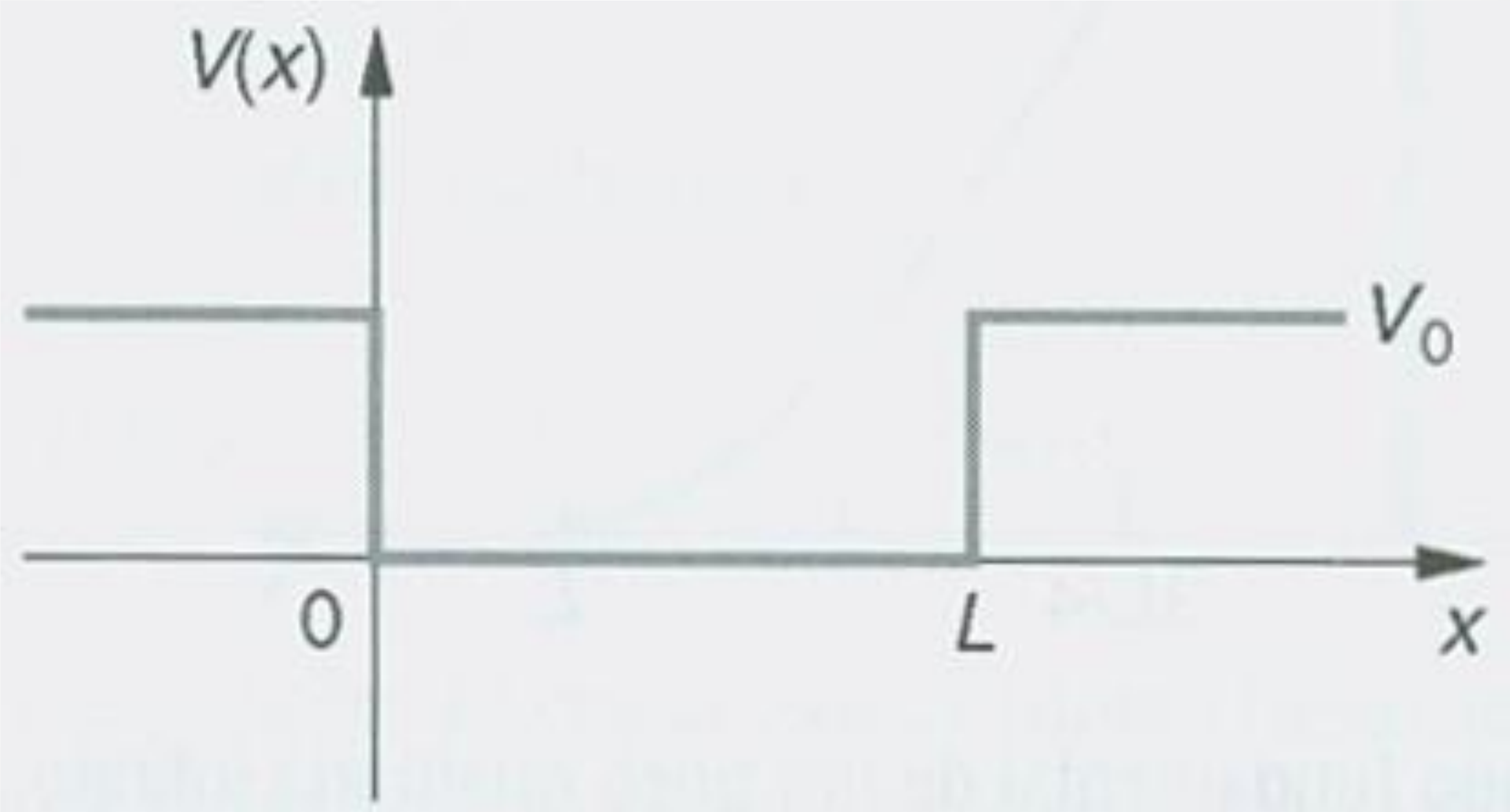


Figura do Modern Physics for Scientists and Engineers – S. Thornton, A. Rex

Da Física Clássica para a Quântica

- Para $E_c = E - V(x) > 0 \rightarrow E > V(x)$ para todo x

- Situação 1: $0 < E < V_o$
- Física Clássica: $0 < x < L \rightarrow$ trajetórias finitas.
  - Quântica: estados ligados → posições possíveis: $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$.

  - Situação 2: $E > V_o$
- 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) → posições possíveis: $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$. ***Solução mais adiante na disciplina.***

Soluções do parte espacial da função de onda do poço unidimensional finito para estados ligados (tratamentao detalhado em aula)

As funções de onda do potencial de altura V_o para $x<0$ e $x>a$ e $V=0$ para $0<x<a$, a partir da solução matemática geral, colocada as exigência de finitude da função de onda para todo x:

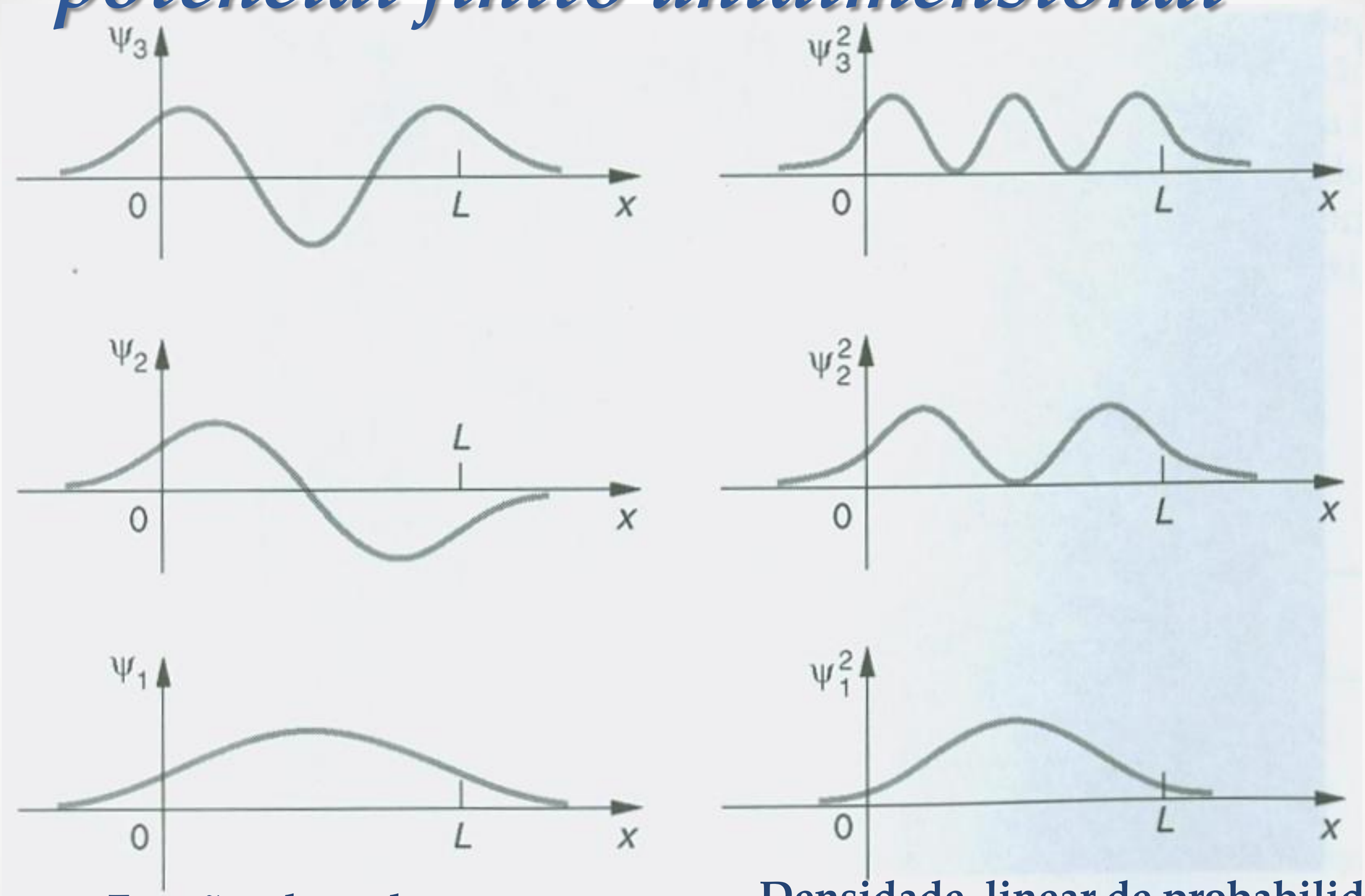
$$\varphi_I(0 \le x \le a) = A_I \cos kx + B_I senkx \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(x \le 0) = A_{II} e^{k'x}$$

$$k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{III}(x \ge a) = B_{III} e^{-k'x}$$

Estados de E constante do "poço" de potencial finito unidimensional



Funções de onda

Densidade linear de probabilidade

Equações, soluções e interpretações em aula

Figura do Modern Physics for Scientists and Engineers – S. Thornton, A. Rex

☠ ***"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 $x \to \infty$
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!

Características das soluções

Funções de onda e densidades de probabilidades:

- *E se o potencial for muito maior do que as energias, que tipo de aproximação seria razoavelmente válida?*

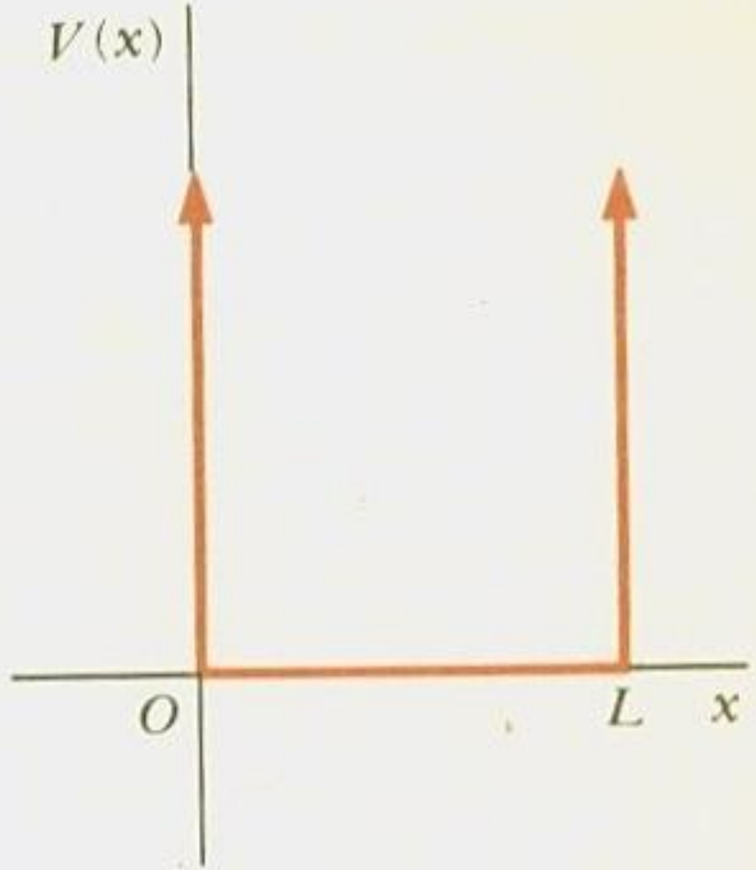


Fig. 6.1 Energia potencial de poço quadrado infinito. Para $0 < x < L$, a energia potencial $V(x)$ é nula. Fora dessa região, $V(x)$ é infinita. A partícula está confinada à região no poço $0 < x < L$.

Figura do Tipler & Llewellyn

Soluções do parte espacial da função de onda do poço unidimensional finito para estados ligados

As funções de onda do potencial finito para V_o >>E:

$$\varphi_I(0 \le x \le a) = A_I \cos kx + B_I senkx \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(x \le 0) \sim 0 \qquad k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} \to \infty$$

$$\varphi_{III}(x \ge a) \sim 0$$

- **Condições de continuidade das funções de onda:**
- $\varphi_I(0)=\varphi_{II}(0) \rightarrow A_I=0$
- $\varphi_I a)=\varphi_{III}(a) \rightarrow$ senka=0 $\rightarrow$ $ka = n\pi \rightarrow k^2 = (\frac{n\pi}{a})^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
- **Ou seja:** $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ **n=1,2,3...**

"Poço" de potencial infinito unidimensional

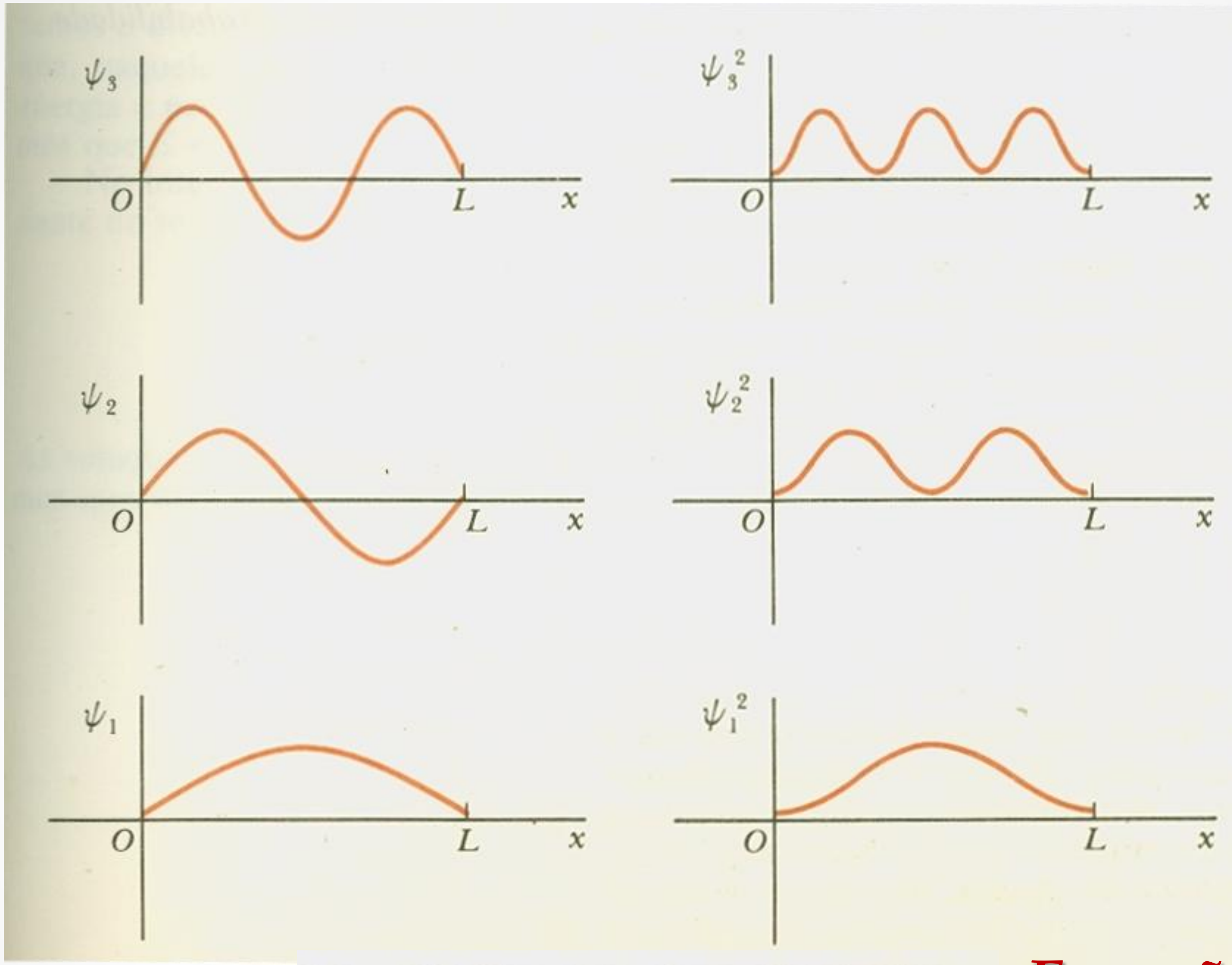
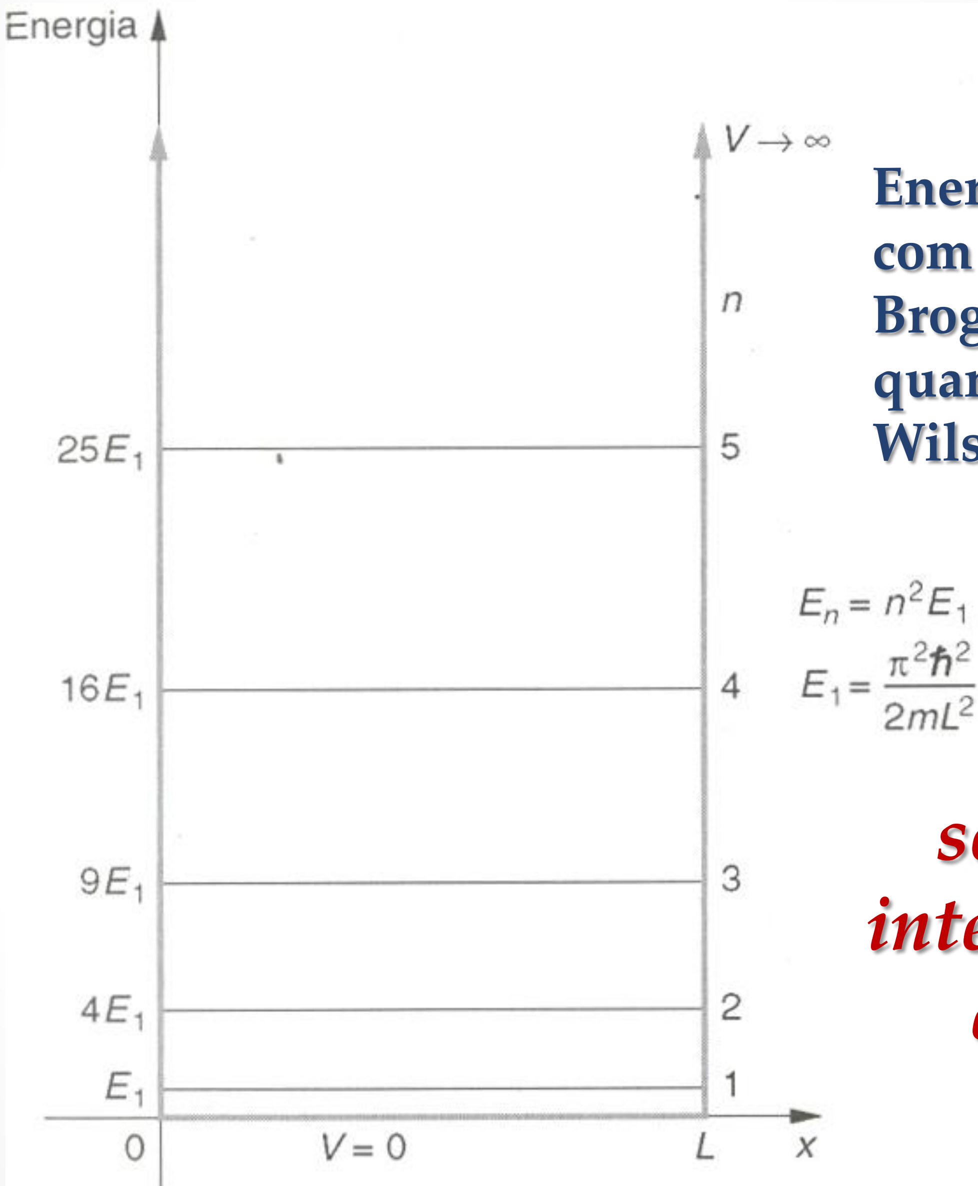


Fig. 6.3 Funções de onda $\psi_n(x)$ e densidades de probabilidade $P_n(x) = \psi_n^2(x)$ para $n = 1, 2$ e 3 para o potencial de poço quadrado infinito.

Equações, soluções e interpretações em aula

Figura do Tipler & Llewellyn

Energias do “poço” de potencial infinito



Energias coincidentes com as da onda de de Broglie e as da quantização de Wilson-Sommerfeld

soluções e interpretações em aula

Figura do Tipler & Llewellyn

Dinâmica da partícula "poço" de potencial infinito

- **A aplicação das aulas 29 e 30 discutiu** as várias informações que estas funções de onda onda dão sobre a dinâmica da partícula segundo a mecânica quântica de Schroedinger (movimentos não relataivísticos).

soluções e interpretações nas aulas citadas. **Repense!**