Instituto de Física
USP

Física V - Aula 32

Professora: Mazé Bechara

Aula 32 - Estados ligados em movimentos unidimensionais

1. O "poço de potencial" finito: colocando as condições de continuidade nas funções de onda e suas derivadas; determinação gráfica dos valores de energia e das constantes das funções de onda.

2. Estados estacionários do oscilador harmônico – discussão semi-quantitativa. Comparação das energias dos estados estacionários com a proposta de Planck e resultados da quantização de Wilson-Sommerfeld e da onda estacionária de de Broglie.

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

As funções de onda do potencial de altura V_o para x<0 e x>a e V=0 para 0<x<a:

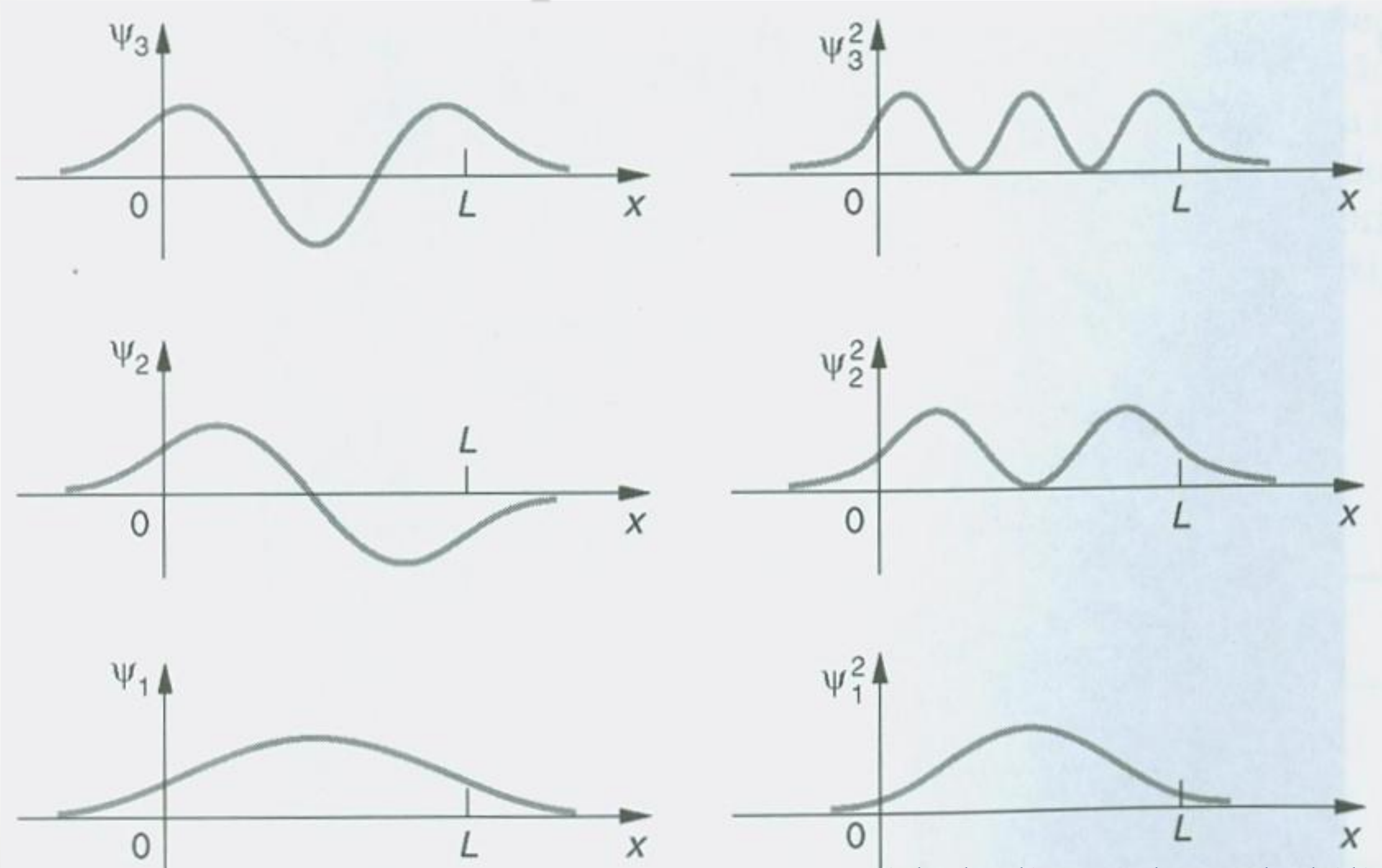
$$\varphi_I(0 \le x \le a) = A_I \cos kx + B_I senkx \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

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

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

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

Estados de E constante do “poço” de potencial finito unidimensional – a penetração na região classidamente proibida (densidade #0)



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

Soluções do parte espacial da função de onda do poço unidimensional finito para estados ligados com centro na origem

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se} \quad x \geq a/2 \\ 0, & \text{se} \quad -a/2 < x < a/2, \\ V_0, & \text{se} \quad x \leq -a/2 \end{cases}$$

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

$$\varphi_{II}(x \leq -a/2) = A_{II} e^{k'x}$$

$$\varphi_{III}(x \geq a/2) = B_{III} e^{-k'x} \qquad k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

Soluções do poço unidimensional finito na mecânica quântica com centro na origem (para usufruir das simetrias das funções)

- **Condições sobre a função de onda :**

1. **Continuidade das funções de onda nos pontos de descontinuidade do potencial: -a/2 e a/2**

$$\varphi_I(x=-a/2)=\varphi_{II}(x=-a/2)$$

$$\varphi_I(x=a/2)=\varphi_{III}(x=a/2)$$

2. **Continuidade das derivadas em x (φ´(x)) das funções de onda nos pontos de descontinuidade do potencial:**

$$\varphi_I^{\prime}(x=-a/2)=\varphi_{II}^{\prime}(x=-a/2)$$

$$\varphi_I^{\prime}(x=a/2)=\varphi_{III}^{\prime}(x=a/2)$$

3. **Normalização da função de onda em todo o espaço: O que significa 5 equações e cinco incóginitas: E, que precisa ser determinada e está também em k e k´da função de onda, A_I, B_I, A_{II} e B_{III}.**

Condições que devem ser observadas por todas as auto-funções de energia e suas funções de onda (obtidas em aula depois de manipulações matemáticas!)

Ou vale:

- $A_{II} + B_{III} \# 0$ e $A_I \# 0$ **e** $\tan ka/2 = \dfrac{k'a/2}{ka/2}$ **Cond. (I)**

$$\varphi_I(-a/2 \le x \le a/2) = A_I \cos kx$$

(Neste caso: B_I=0 e A_{II}=B_{III} pois necessariamente não vale II)

Ou vale:

$A_{II} - B_{III} \# 0$ e $B_I \# 0$ **e** $-\cot ka/2 = \dfrac{k'a/2}{ka/2}$ **Cond. (II)**

$$\varphi_I(-a/2 \le x \le a/2) = B_I senkx$$

(Neste caso: A_I=0 e A_{II}=-B_{III} pois necessariamente não vale I)

Em qualquer das duas condições acima vale:

$$\varphi_{II}(x \le -a/2) = A_{II} e^{k'x} \qquad \varphi_{III}(x \ge a/2) = B_{III} e^{-k'x}$$

- **Valendo as relações acima entre A_{II} e B_{III} em cada caso.**

Solução gráfica em aula (refaça)

- Na solução gráfica feita em aula se explorou o ponto de encontro entre as funções da condição I e da condição II com a equação da circunferência:

$$(ka/2)^2 + (k'a/2)^2 = (mV_o a^2)/2\hbar^2$$

Observe-se que:

1. só tem sentido físico $(ka/2)>0$ e $(k'a/2)>O$
2. Há uma ambiguidade para os raios da circunferência acima para os mesmos valores de $V_o a^2$, que define o número de estados ligados.
3. O menor valor de energia é sempre para a condição I.

Solução Gráfica que determina as energias do poço finito

- **Resultados importantes:**

- **O número de estados é finito, e portanto as energias dos estados ligados e este número depende do produto $V_o a^2$, ou seja, da produto da altura pela largura do potencial.**

- Os **estados com função de onda de paridade par e impar se alternam (funções pares e impares)** sendo sempre o **estado de menor energia o com a função de onda com paridade par** ***(Cuidado com o erro na figura do Tipler & Llewellyn).***

- ***As energias vem de solução numérica. Os estados podem ser chamados de n=1,2,3 até n, mas não dependem de um número quântico n.***

- ***Depois de encontradas as energias, volta-se para as equações de continuidade da função de onda e se determina as constantes em função de uma delas, e depois se normaliza a função de onda no espaço todo,determinando-se a última constante. FAÇA!***

Outra solução Gráfica que determina as energias do poço finito

A figura mostra duas curvas diferentes de α/k (nossa equação é k /k) , que correspondem a diferentes valores de V_o . **Os valores permitidos de energia E são dados pelos valores de ka nas intersecções das curvas de α/k com as curvas tan ka e –cot ka** . ***(A largura do poço da figura é 2a, enquanto na aula era a. Também o k´ e das outras transparências é o α desta figura.)***

Observe o erro na figura. O estado n=1 resulta do encontro da curva α/k com a da tg ka .

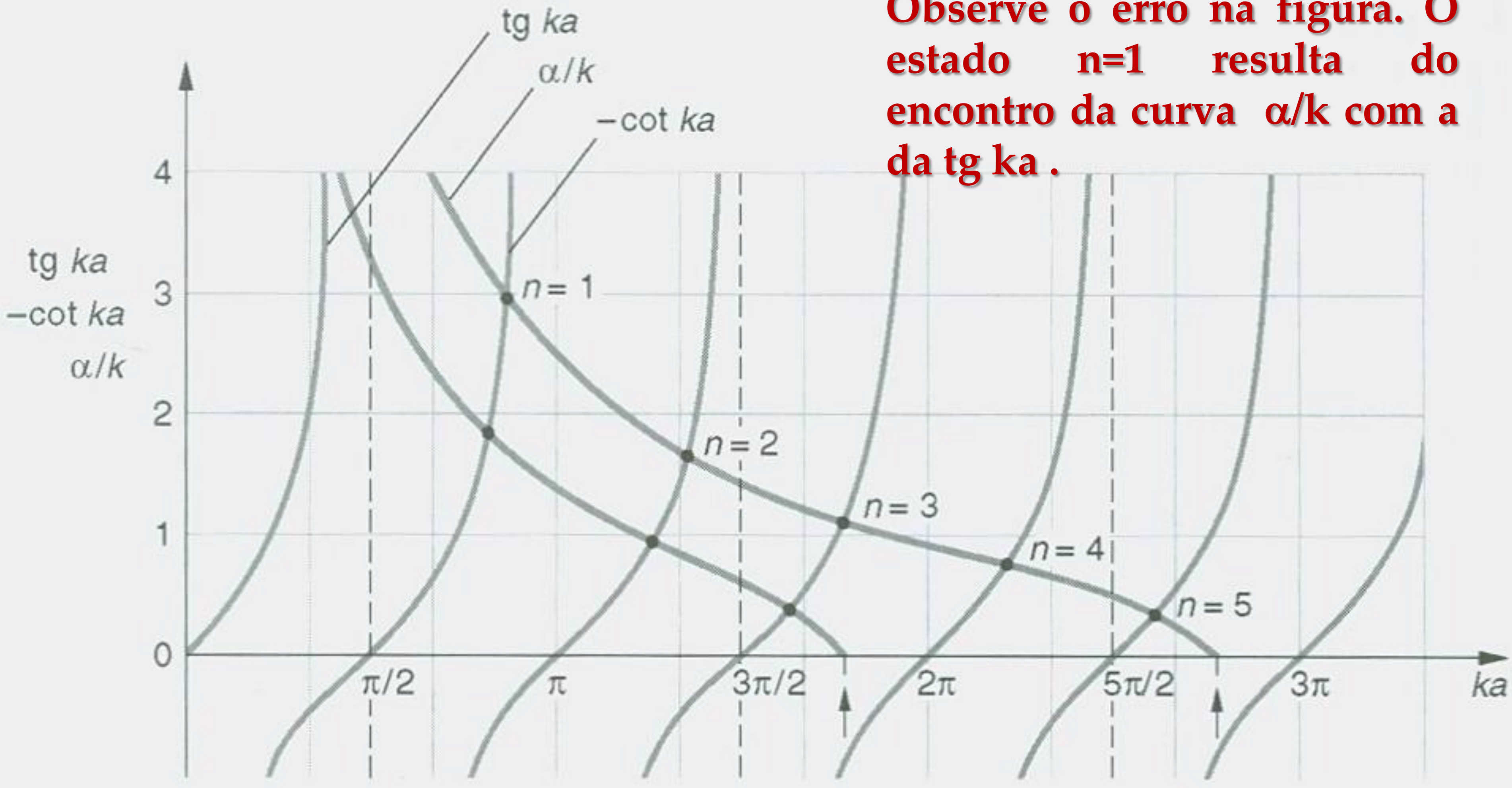


Figura do Tipler & Llewellyn

A equação de Schroedinger das auto-funções de energia do MHS unidimensional

solução semi-quantitativa em aula

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+\frac{1}{2}kx^2\varphi(x)=E\varphi(x)$$

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

- **A solução depende de conhecimento matemático. Aqui a energia potencial é contínua mas não é constante.**
- **As condições físicas são as mesmas: funções normalizadas, portanto tendendo a zero para x tendendo a infinito, finitas para todo x, contínuas e com derivadas contínuas.**
- **Primeiro se acha a solução assintótica, ou seja, para x grande, com a condição da solução ser finita para todo x. Indicação em aula.**

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{as\sin}(x)=-\frac{mk}{\hbar^2}x^2\varphi_{as\sin}(x)$$

$$\varphi_{as\sin}(x)=e^{-\frac{mk}{\hbar^2}x^2}$$

A equação de Schroedinger das auto-funções de energia do MHS unidimensional
solução semi-quantitativa em aula

- Depois se acha a equação e a solução do polinômio que multiplicado pela solução assintótica, da função de onda vale para todo x. E se acha a condição de recorrência entre os coeficientes a_n e a_{n+2} do polinômio, **impondo solução finita para todo x.**

$$\varphi_n(x) = H_n\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right)e^{-\frac{mk}{\hbar^2}x^2}$$

$$H_n\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right) = a_o + a_1\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x + a_2\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right)^2 + \dots\dots\dots a_n\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right)^n + \dots$$

- a condição solução finita para H_n exige: *(Acredite ou melhor, olhe em um livro de Física Matemática, como o do Arfken, por exemplo):*
- $(2mE/\hbar^2)=2(n+1/2)(mk/\hbar^2)^{1/2}$ $\Rightarrow$
- $\Rightarrow$ $E_n=(n+1/2)\hbar w=(n+1/2)h\nu$ n=0,1,2,...

A equação de Schroedinger das auto-funções de energia do MHS unidimensional

- $$\psi_n(x,t) = H_n\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right)e^{-\frac{mk}{\hbar^2}x^2}e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$
- $E_n=(n+1/2)\hbar w=(n+1/2)h\nu$
- **O Polinômio H_n é chamado de Polinômio de Hermite** (veja no livro de Física Matemática do Arfken, por exemplo).
- **Novamente se alternam funções de paridade par e impar, sendo a função par a de mais baixa energia (n=0).**

AS SOLUÇÕES do MHS

Parte espacial das funções de onda com paridade bem definida

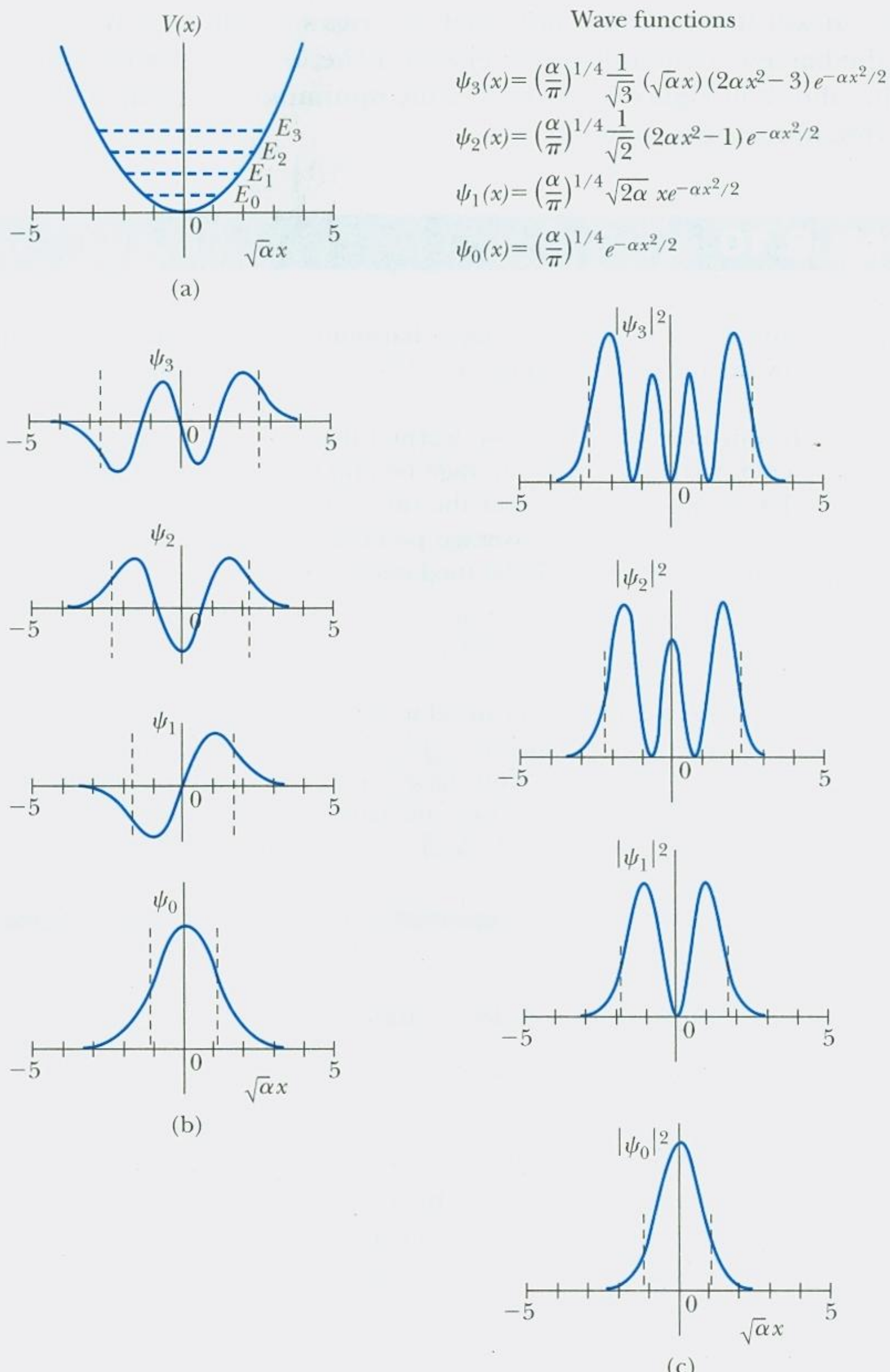
oscilam na região classicamente permitida e caem na região classicamente proibida, indo a zero para x infinito.

As linhas pontilhadas indicam a posição da amplitude da solução clássica.

Os auto-valores de energia (quantizados)

$E=(n+1/2)\,h\nu$
$n=0,1,2,3...$

Planck + energia de ponto zero do princípio de incerteza



Graficos da Parte espacial da Função de onda: Polinômio de Hermite vezes Gaussiana (à esquerda)

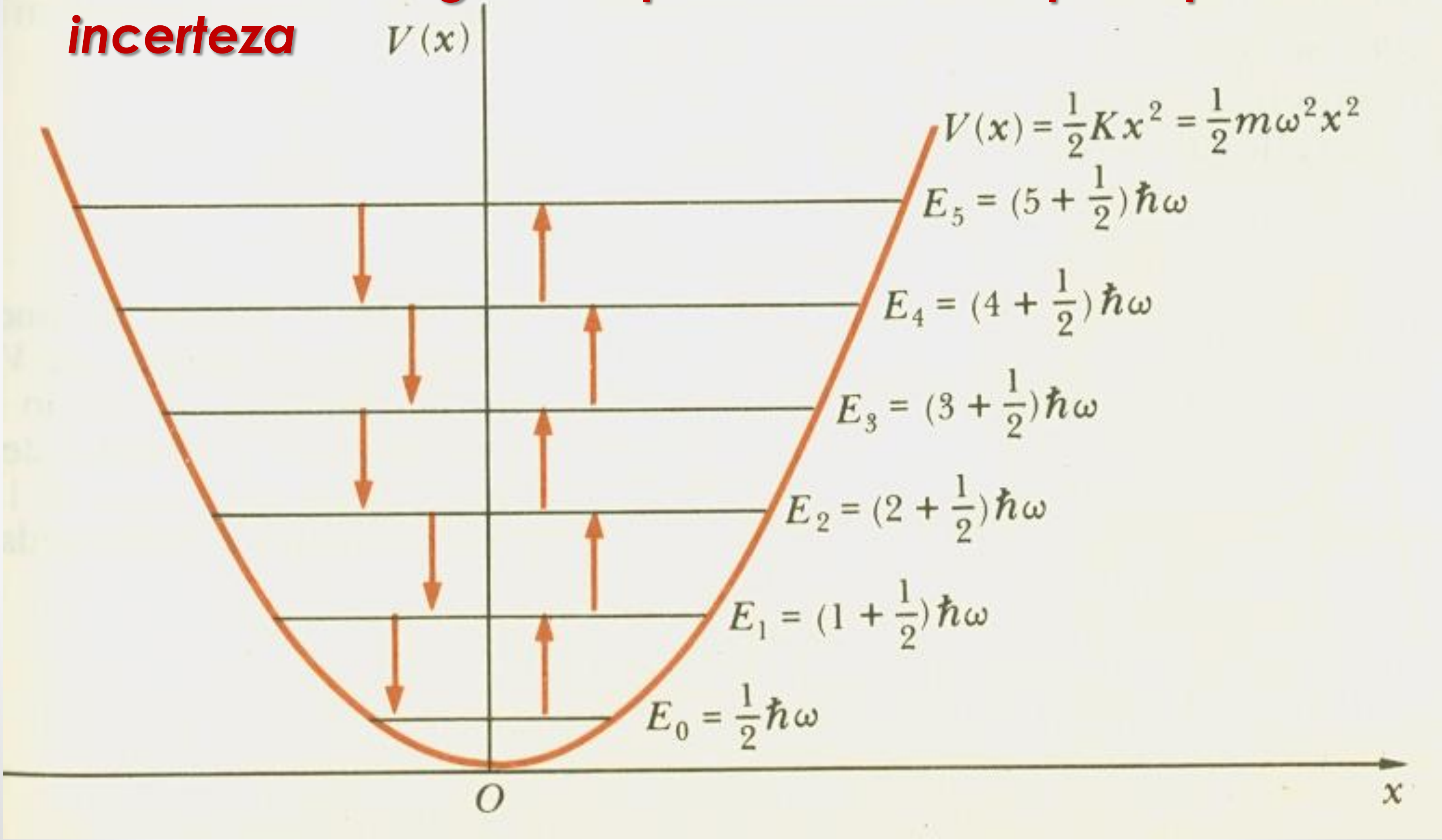
Gráficos dos módulos ao quadrado da funç]ão de onda para todo t (à direita)

$$\alpha^2=\frac{mk}{\hbar^2}$$

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

As energias do MHS unidimensional

- **Planck + energia de ponto zero do princípio de incerteza**



Simulações de funções de onda de diversos potenciais unidimensionais, no Site da página da Universidade de Colorado:

http://phet.colorado.edu/en/simulation/