Instituto de Física USP

Física V - Aula 32

Professora: Mazé Bechara

Aula 32 - Movimentos unidimensionais – estados ligados estacionários

1. **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.**

2. **A solução das funções de auto-funções da energia e seus auto-valores na aproximação de potencial infinito (V_o>>E ou $V_o \to \infty$) extremos da caixa. Comparação das energias com os resultados da onda de de Broglie e da quantização de Wilson-Sommerfeld.**

As autofuções de energia para qualquer potencial de interação depende somente da posição - estados estacionários

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

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

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

APLICAÇÃO
Poço de potencial unidimensional

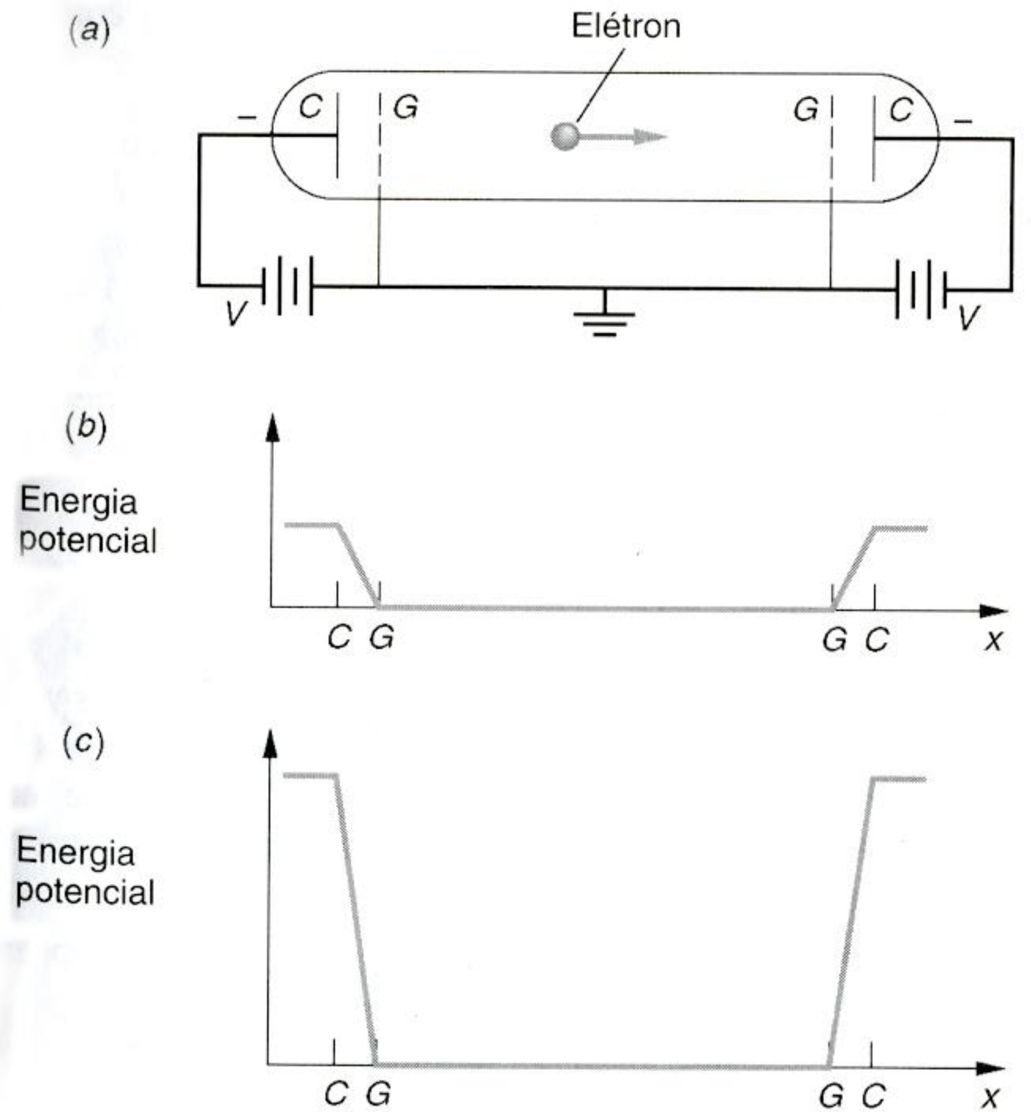


Fig. 6-1 (*a*) Um elétron que se encontre na região entre as duas grades *G* não experimenta nenhuma força, já que as grades estão aterradas. Nas regiões entre as grades *G* e os eletrodos *C*, porém, existe um campo elétrico cuja intensidade depende do valor da tensão *V*. (*b*) Quando *V* é pequena,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

Analise do ponto de vista da física clássica as posições, para diferentes valores de energias, que a partícula pode ocupar.

Observações:

1. o movimento da partícula é no eixo x;

2. A energia total (mecânica) E é constante nos estados estacionários, e é a soma da energia cinética com a potencial;

3. a energia cinética deve ser sempre positiva , ou seja: $E_c = E-U(x) > 0$.

Poço de potencial esquemático de potencial V_o (finito)

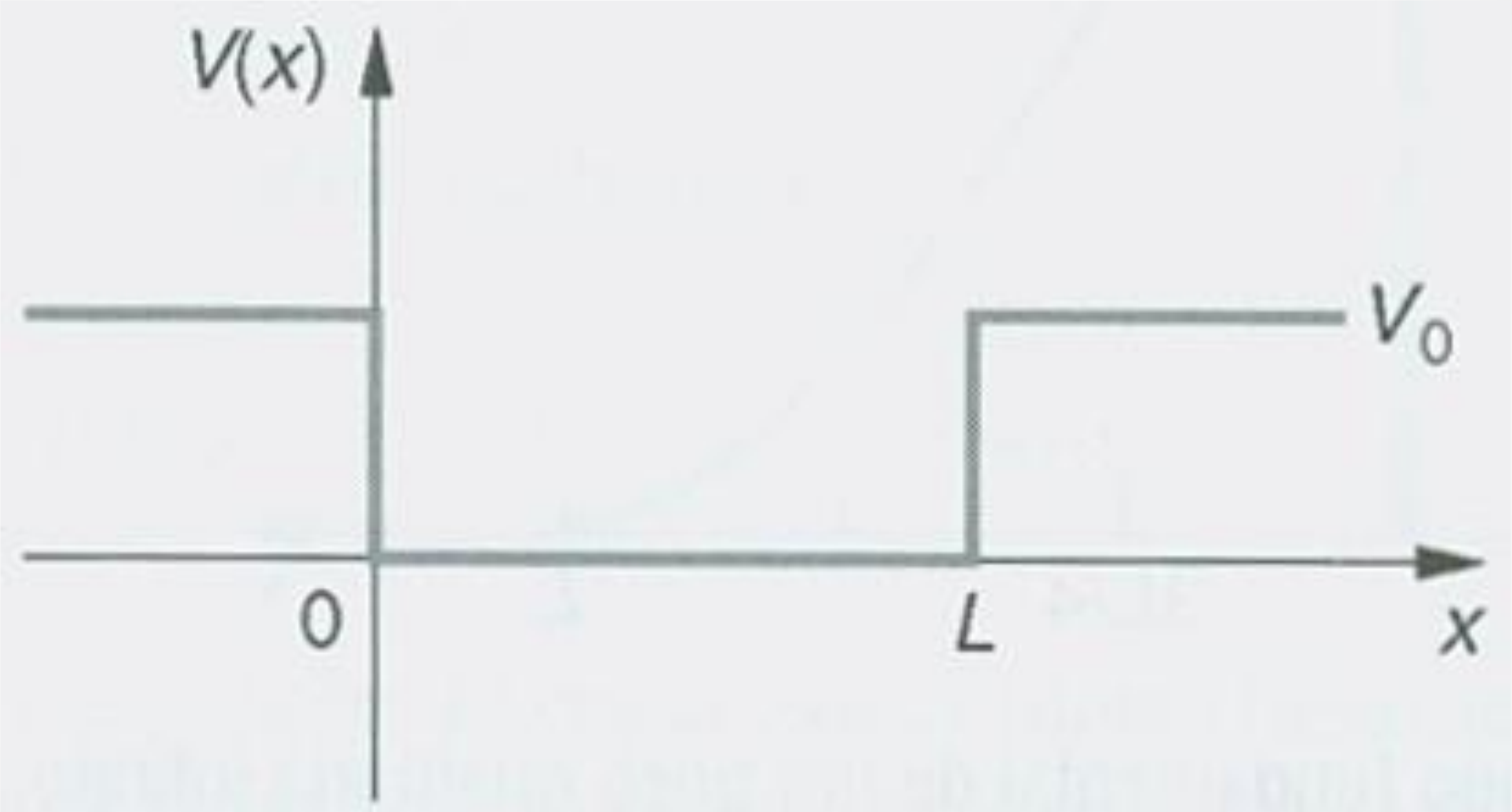


Figura do Modern Physics for Scientists and Engineers – S. Thornton, A. Rex

Da Física Clássica para a Quântica

- Impondo $E_c = E - V(x) > 0 \quad \Rightarrow \quad E > V(x)$ para todo x
- $\Rightarrow$ Para o poço esquemático $E > 0$.
  - Situação 1: Energia no intervalo $0 < E < V_o$
- Física Clássica: posições possíveis no intervalo:

$0 < x < L \rightarrow$ as trajetórias são portanto finitas.

  - Quântica: estados ligados $\rightarrow$ posições possíveis: $\lambda(x,t) = |\psi(x,t)|^2$

  - Situação 2: Energia no intervalo $E > V_o$
- Física Clássica: possições possíveis estão no intervalo: $-\infty < x < +\infty \rightarrow$ as trajetórias são infinitas
  - Quântica: estados não ligados (ou de espalhamento no caso geral, que é de transmissão e reflexão no caso unidimensional) $\rightarrow$ posições possíveis: *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>L e V=0 para 0<x<L, a partir da solução matemática geral, colocada as exigência de finitude da função de onda para todo x:

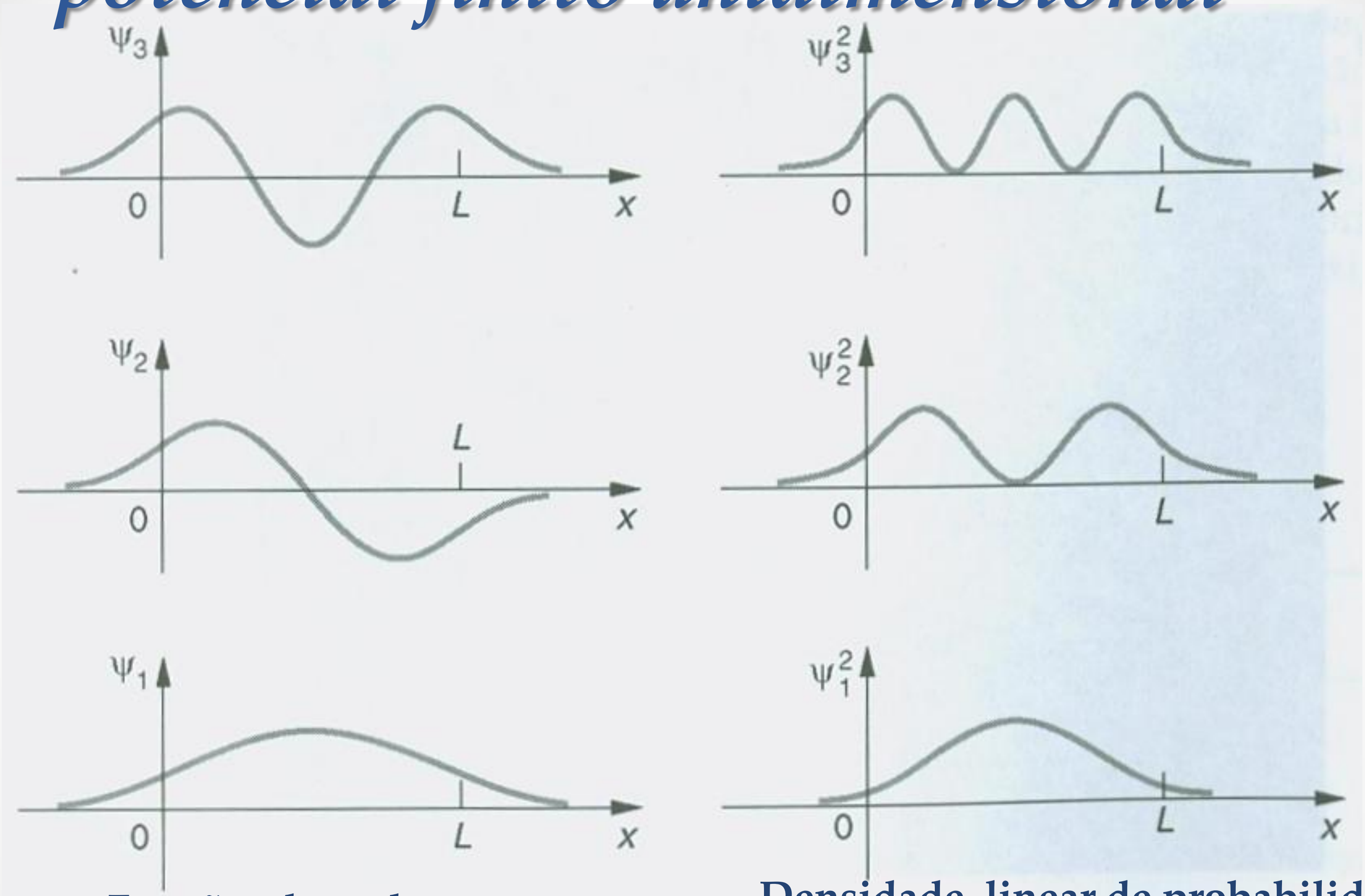
$$\varphi_I(0 \le x \le L) = A_I \cos kx + B_I \operatorname{sen} kx \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

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

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

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

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?*

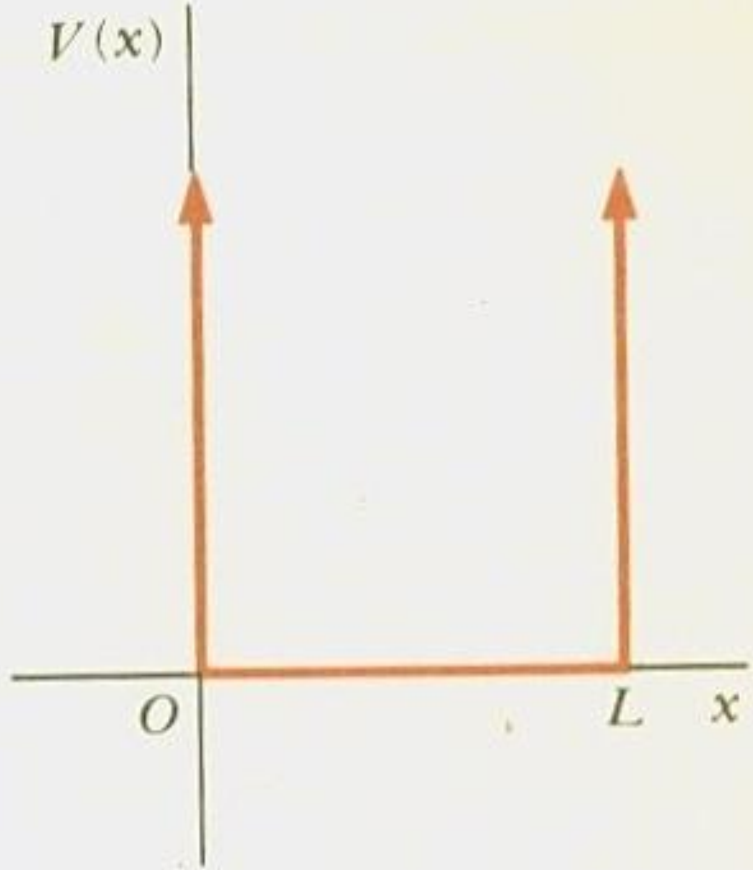


Fig. 6.1 Energia potencial de poço quadrado infinito. Para $0 < x < L$, a energia potencial $V(x)$ é nula. Fora dessa região, $V(x)$ é infinita. A partícula está confinada à região no poço $0 < x < L$.

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 para $V_o >> E$:

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

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

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

- **Condições de continuidade das funções de onda:**
- $\varphi_I(0)=\varphi_{II}(0) \;\to\; A_I=0$
- $\varphi_I(L)=\varphi_{III}(L) \to senkL=0 \to \quad kL = n\pi \quad \to \quad k^2 = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
- **Ou seja:** $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ ***n*=1,2,3...**

Poço de potencial infinito unidimensional

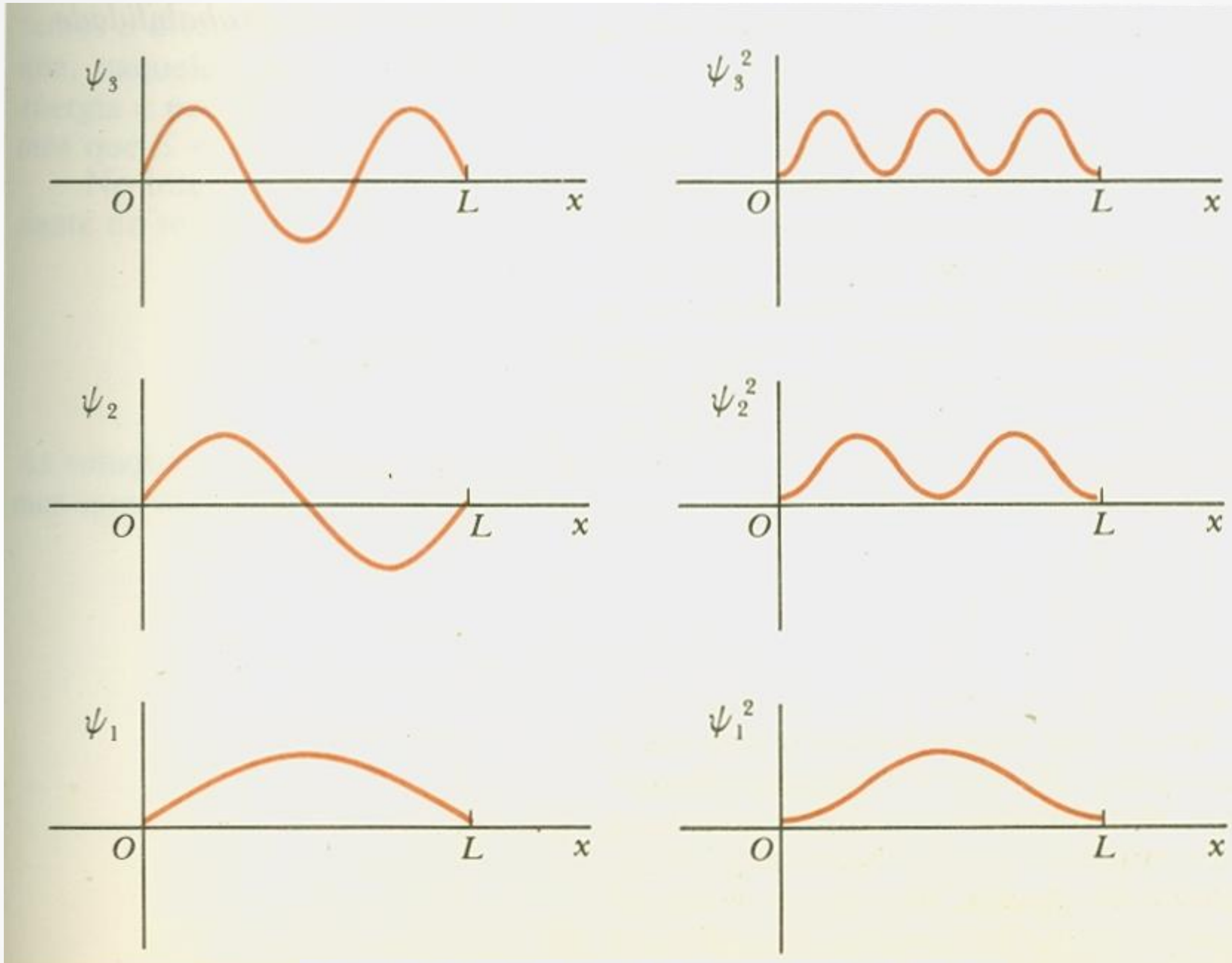
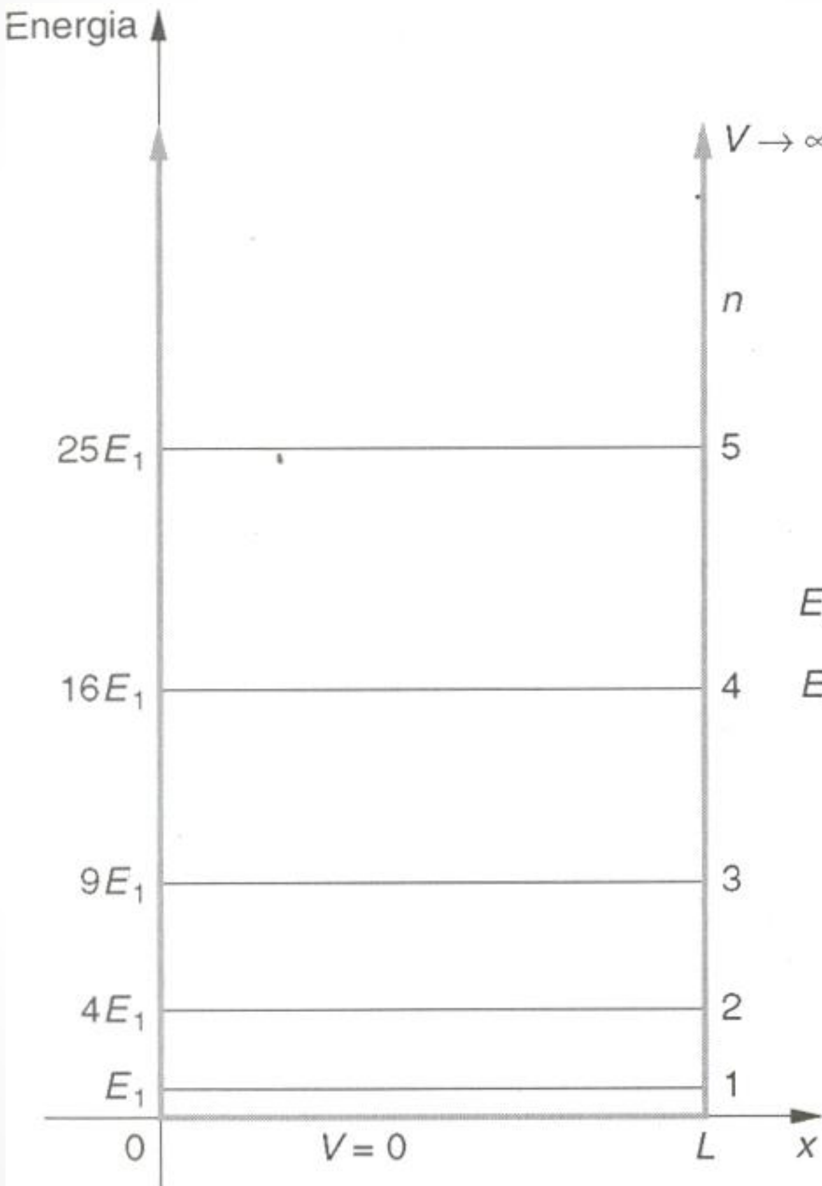


Fig. 6.3 Funções de onda $\psi_n(x)$ e densidades de probabilidade $P_n(x) = \psi_n^2(x)$ para $n = 1$, 2 e 3 para o potencial de poço quadrado infinito.

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

$$E_n = n^2 E_1$$

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

soluções e interpretações em aula

Figura do Tipler & Llewellyn

Soluções deSchroedinger do potencial unidimensional $V_o \to \infty$ (V_o>>E)

Comparação com onda de Broglie e energia de Wilson-Sommerfeld

$$\Psi(0 \le x \le L, t) = A sen \frac{n\pi x}{L} \exp(-i \frac{E_n}{h} t)$$

$$n = 1,2,3...$$

$$\Psi(x \le o, t) \sim 0$$

$$\Psi(x \ge L, t) \sim 0$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

Dinâmica da partícula no poço de potencial infinito e unidimensional

- **A aplicação da aula 30, completada na aula 31, discutiu as várias informações que estas funções de onda onda dão sobre a dinâmica da partícula, segundo a mecânica quântica no formalismo de Schroedinger.**

- **Reveja as *interpretações e informações extraídas a partir das funções de onda espaço-temporal.***

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

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

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

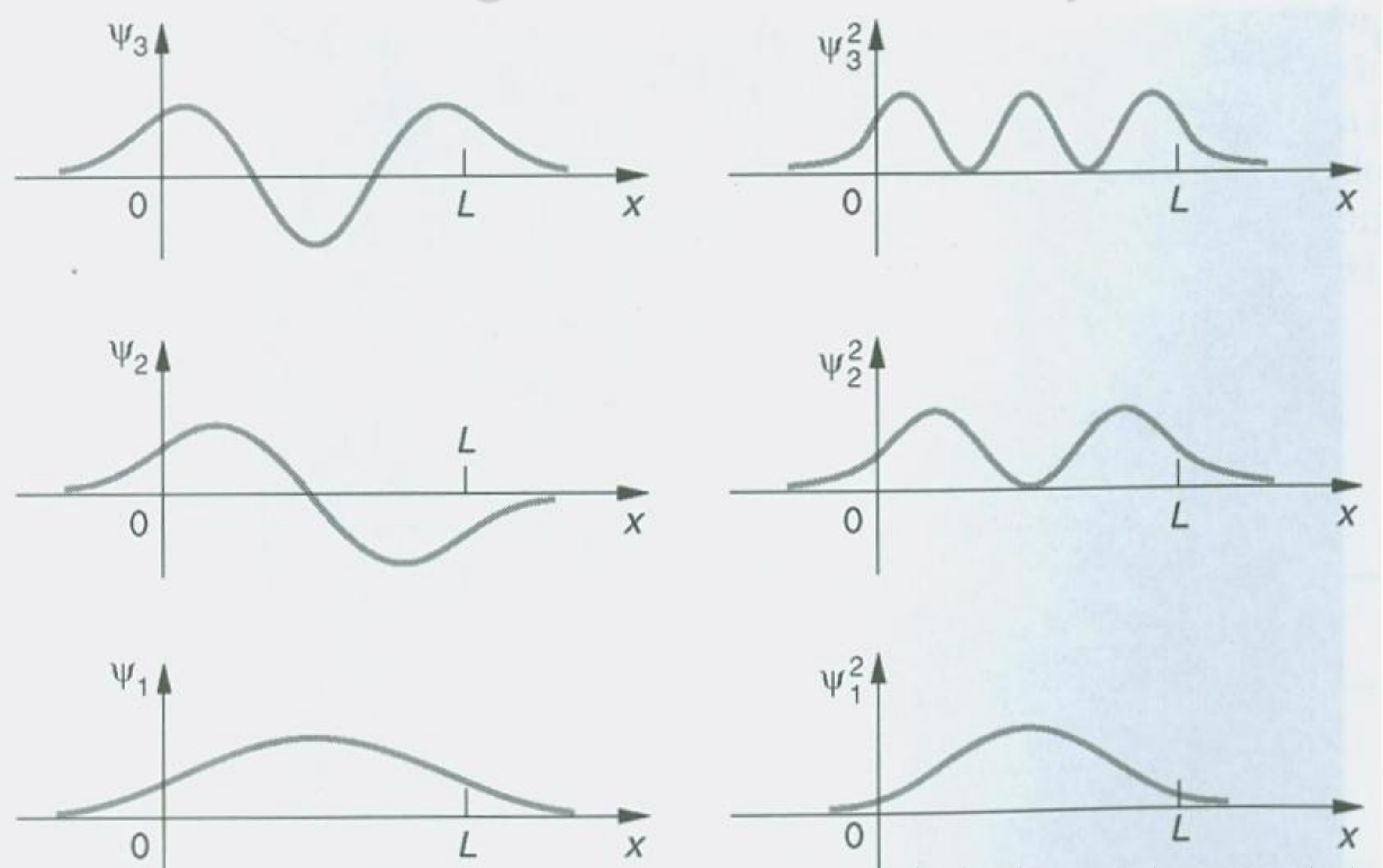
$$\varphi_{II}(x \le 0) = A_{II} e^{k'x}$$

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

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

- **Observe que o potencial é descoantínuo, mas as funções de onda são contínuas**
- **Com funções de onda não nulas para x≤o e x≥L, a partícula na teoria quântica está "entrando pelas paredes" em x=0 e x=L, indo para regiões proibidas no contexto da Mecânica Clássica.**

Estados de E constante do poço de potencial finito unidimensional – a passagem "através das paredes" (entrando em regiões classicamente proibidas)



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 esquemático unidimensional finito (estados ligados e centro na origem)

$$V(x \le -L/2) = 0$$
$$V(-L/2 \le x \le L/2) = V_o$$
$$V(x \le L/2) = 0$$

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

$$\varphi_{II}(x \le -L/2) = A_{II} e^{k\acute{} x}$$

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

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: -L/2 e L/2**

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

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

2. **Continuidade das derivadas em x ($\varphi'(x)$) das funções de onda nos pontos de descontinuidade do potencial:**

$$\varphi'_I(x=-L/2)=\varphi'_{II}(x=-L/2)$$

$$\varphi'_I(x=L/2)=\varphi'_{III}(x=L/2)$$

3. **Somadas as 4 condições à normalização da função de onda em todo o espaço, teremos 5 equações e cinco incóginitas: E, A_I, B_I, A_{II} e B_{III} que precisam ser determinadas (E está em k e k´da função de onda).**

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

Condições:

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

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

- **Mostre que ou vale I e não vale II, ou vale II e não vale I.**