

Instituto de Física
USP

Física V - Aula 33

Professora: Mazé Bechara

Aula 33 - Os estados ligados nos movimentos unidimensionais – fenômenos “novos”, e características gerais

- 1. Ainda o poço de potencial unidimensional e finito: as condições de continuidade nas funções de onda e suas derivadas e as condições decorrentes. Determinação gráfica dos valores de energia, e a ambiguidade nos resultados para mesmos valores do produto V_0L^2 do potencial. As auto-funções de energia e as constantes.**
- 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.**
- 3. As características gerais dos movimentos de estados ligados na mecânica quântica: na auto-função da energia, nos valores das energias.**

Soluções do parte espacial da função de onda do poço esquemático unidimensional finito (estados ligados e centro na origem)



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

$$V(-L/2 \leq x \leq L/2) = V_0$$

$$V(x \geq L/2) = 0$$

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

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

$$\varphi_{III}(x \geq L/2) = B_{III} e^{-k'x}$$

$$k'^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$$

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

As funções de onda do potencial $V=V_0$ para $x<-L/2$ e $x>+L/2$ e $V=0$ para $-L/2<x<+L/2$:

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

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

$$k'^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{III}(x \geq +L/2) = B_{III} e^{-k'x}$$

- Observe que o potencial é descontínuo, mas as funções de onda são contínuas
- Com funções de onda não nulas para $x \leq -L/2$ e $x \geq +L/2$, a partícula na teoria quântica está “entrando pelas paredes” em $x = -L/2$ e $x = +L/2$, penetrando em posições proibidas no contexto da Mecânica Clássica.

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 incógnitas: 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 autofunções de energia e suas funções de onda (obtidas em aula depois de manipulações matemáticas!)

Condições:

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

$A_{II} - B_{III} \neq 0$ e $B_I \neq 0$ 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.**

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

Ou vale:

$$\bullet \quad A_{II} + B_{III} \neq 0 \quad \text{e} \quad A_I \neq 0 \quad \text{e} \quad \tan(kL/2) = \frac{k'L/2}{kL/2} \quad \text{Cond. (I)}$$
$$\varphi_I(-L/2 \leq x \leq L/2) = A_I \cos kx$$

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

Ou vale:

$$A_{II} - B_{III} \neq 0 \quad \text{e} \quad B_I \neq 0 \quad \text{e} \quad -\cot(kL/2) = \frac{k'L/2}{kL/2} \quad \text{Cond. (II)}$$
$$\varphi_I(-L/2 \leq x \leq L/2) = B_I \sin kx$$

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

Em qualquer das duas condições acima vale:

$$\varphi_{II}(x \leq -L/2) = A_{II} e^{k'x} \quad \text{e} \quad \varphi_{III}(x \geq L/2) = B_{III} e^{-k'x}$$

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

Solução gráfica (feita em aula)

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

$$(kL/2)^2 + (k'L/2)^2 = (mV_0L^2)/2\hbar^2$$

Observe-se que:

1. só tem sentido físico $(kL/2) > 0$ e $(k'L/2) > 0$
2. Há uma ambiguidade para os raios da circunferência acima para os mesmos valores de V_0L^2 , que define o número de estados ligados.
3. O menor valor de energia é sempre para a condição I (auto-funções de energia, sendo funções pares).

Solução Gráfica que determina as energias do poço finito (*em sala*)

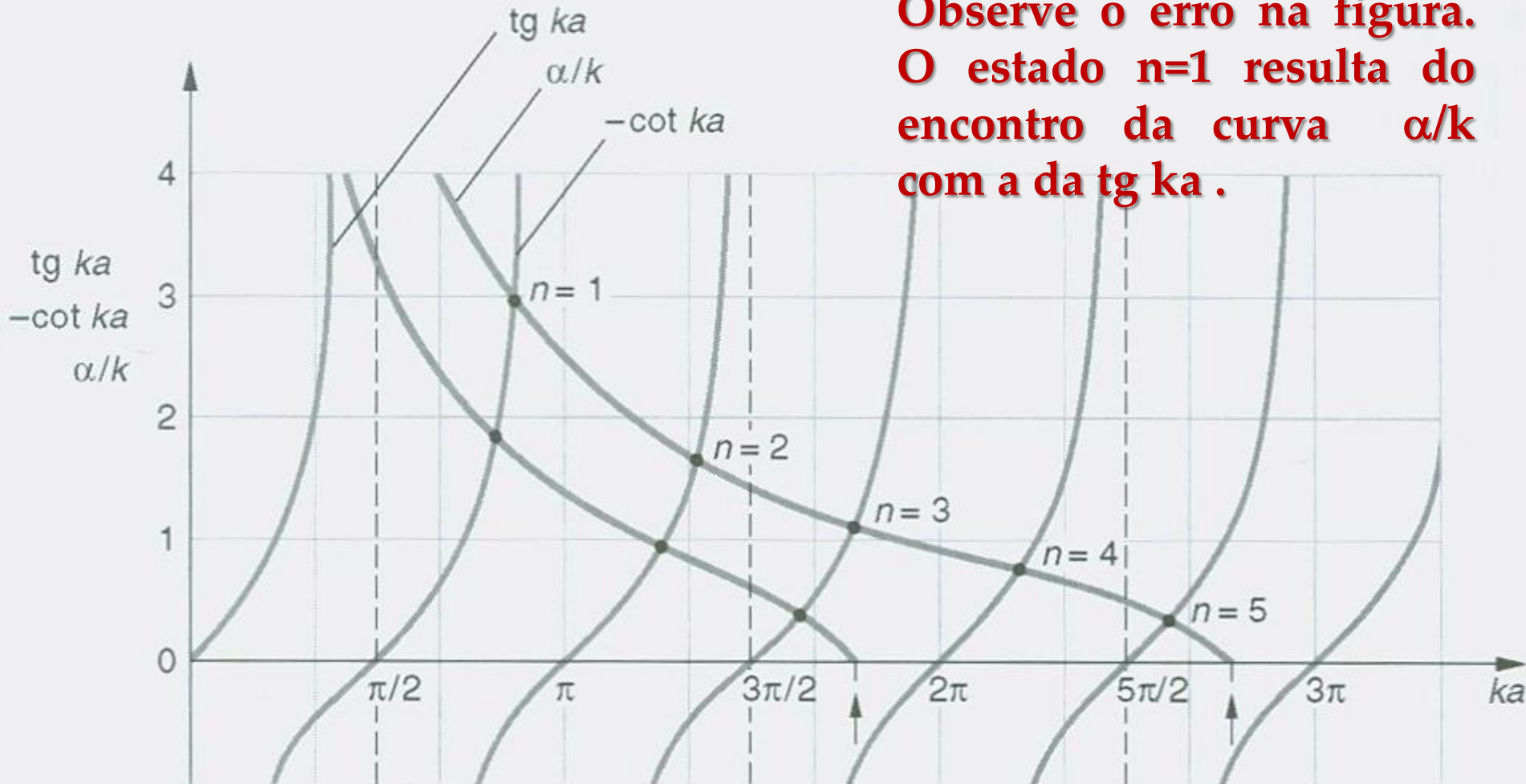
Resultados importantes:

1. O número de estados é finito, e portanto as energias dos estados ligados e este número depende do produto $V_0 L^2$, ou seja, da produto da altura pela largura do potencial.
2. Os estados com função de onda de paridade par e impar se alternam (funções pares e ímpares) 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**).
3. 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 .
4. 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

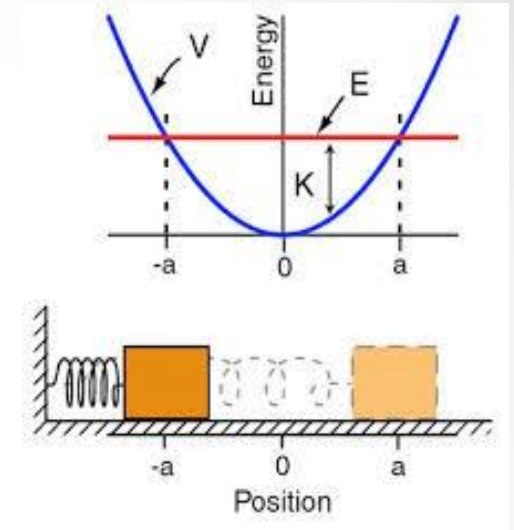
A figura mostra duas curvas diferentes de α/k (nossa equação é k/k), que correspondem a diferentes valores de V_0 . Os valores permitidos de energia E são dados pelos valores de ka nas intersecções das curvas de α/k com as curvas $\tan ka$ e $-\cot ka$. (A largura do poço da figura é $2a$, enquanto na aula era L . 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 $\tan ka$.



MHS unidimensional: análise do clássico ao quântico

- Só há estados ligados, ou seja, com trajetórias finitas \Rightarrow **só há estados ligados na Mecânica Quântica.**
- A energia mecânica E , soma da cinética com a potencial é constante $= ka^2/2 \Rightarrow$ **vamos procurar inicialmente os auto-estados de energia na Mecânica Quântica.**
- A massa pode ficar parada na posição de equilíbrio. No caso $x=0 \Rightarrow$ **o princípio de incerteza não admite partículas paradas.**
- Para a energia cinética ser positiva: $E > 0$ e $E > U(x) \Rightarrow$ **em Mecânica Quântica isto é verdade, dentro do princípio de incerteza.**
- As amplitudes a estão marcadas na figura \Rightarrow **só a solução da equação de Schroedinger poderá dizer quais as posições que podem ser ocupadas pela partícula.**
- Para a energia potencial desenhada, com o ponto de equilíbrio em $x=0$, $U=kx^2/2$.



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; e vale para $-\infty < x < \infty$.**
- **As condições físicas são as mesmas: funções normalizadas, portanto $\varphi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$, contínuas e com derivadas contínuas.**
- **Primeiro se acha a solução assintótica, ou seja, para $x \rightarrow \pm\infty$, com a condição da solução ser finita para todo x . **Indicação em aula.****

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi_{as}(x) = -\frac{mk}{\hbar^2} x^2 \varphi_{as}(x) \quad \varphi_{as}(x) = a e^{-\frac{mk}{\hbar^2} x^2} + b e^{\frac{mk}{\hbar^2} x^2} = a e^{-\frac{mk}{\hbar^2} x^2}$$

$b = 0$

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 .

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

$$H_n\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right) = a_0 + a_1\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x + a_2\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right)^2 + \dots a_n\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right)^n + \dots$$

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

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

- $$\psi_n(x,t) = H_n\left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}x\right)e^{-\frac{mk}{\hbar^2}x^2}e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

- $E_n = (n+1/2)\hbar\omega = (n+1/2)h\nu \quad n=0,1,2\dots$
- O Polinômio H_n é chamado de Polinômio de Hermite, e obedece uma equação diferencial bem estudada (veja em um livro de Física Matemática, no 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

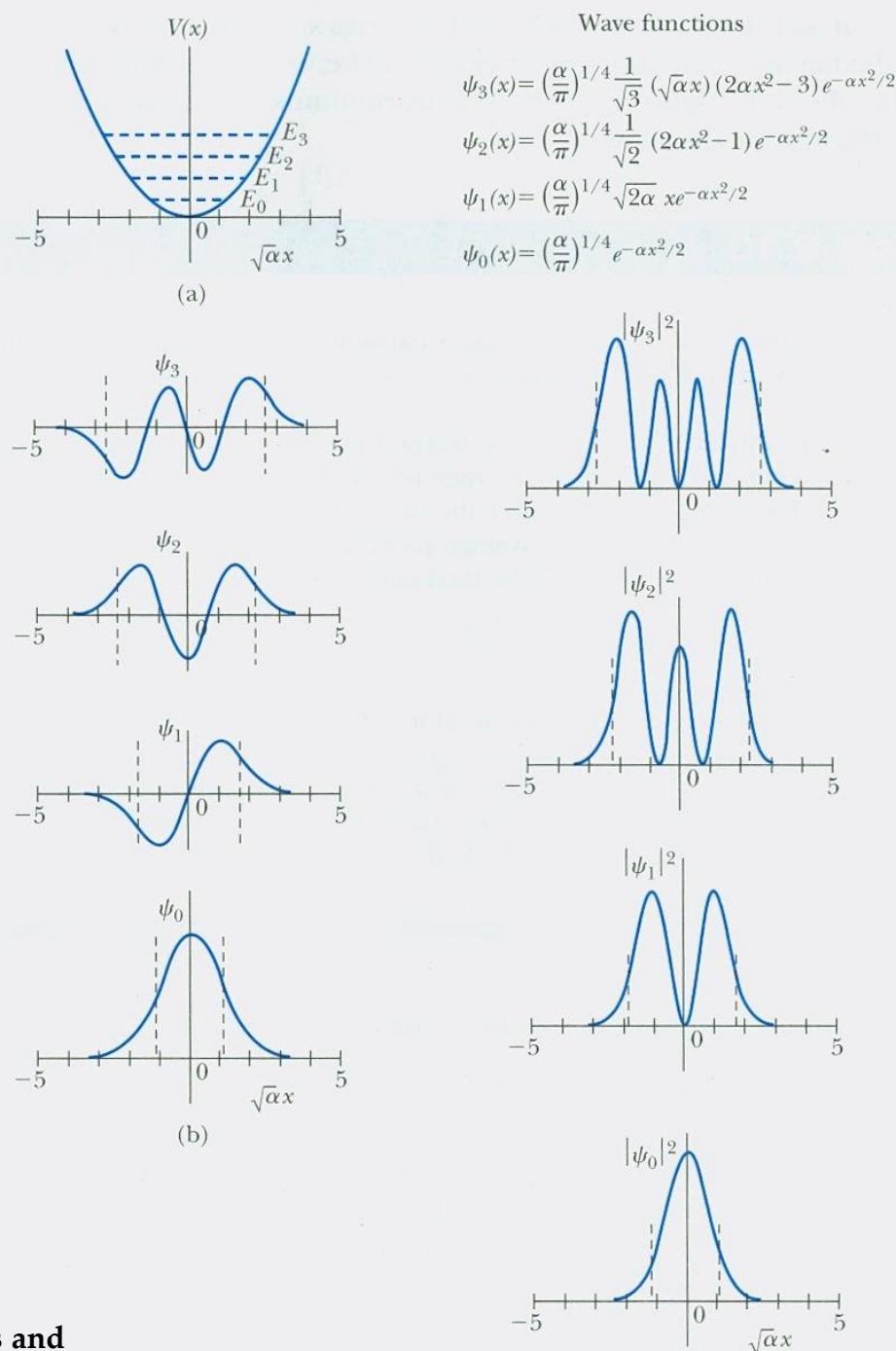
- **Parte espacial das funções de onda com paridade bem definida:** oscilam na região classicamente permitida, e caem na região classicamente proibida, tendendo a zero para $x \rightarrow \pm\infty$
- **As linhas pontilhadas indicam a posição da amplitude da solução clássica:** há penetração na região classicamente proibida.

Os auto-valores de energia (quantizados)

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

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Planck + energia de ponto zero do princípio de incerteza



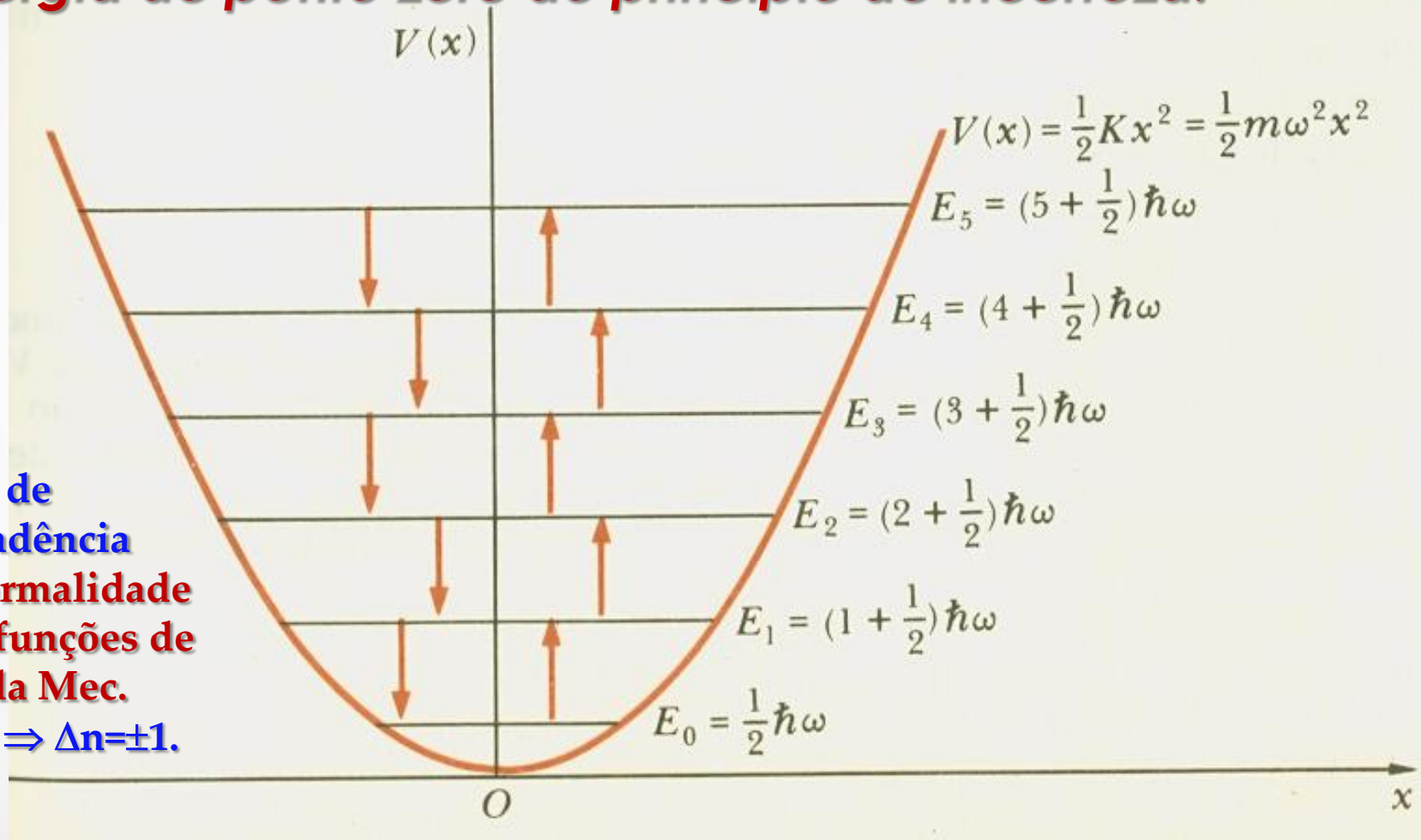
à esquerda:
graficos da parte espacial da função de onda;
(polinômio de Hermite vezes Gaussiana).

à direita:
gráficos das densidades de probabilidade.

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

As energias do MHS unidimensional

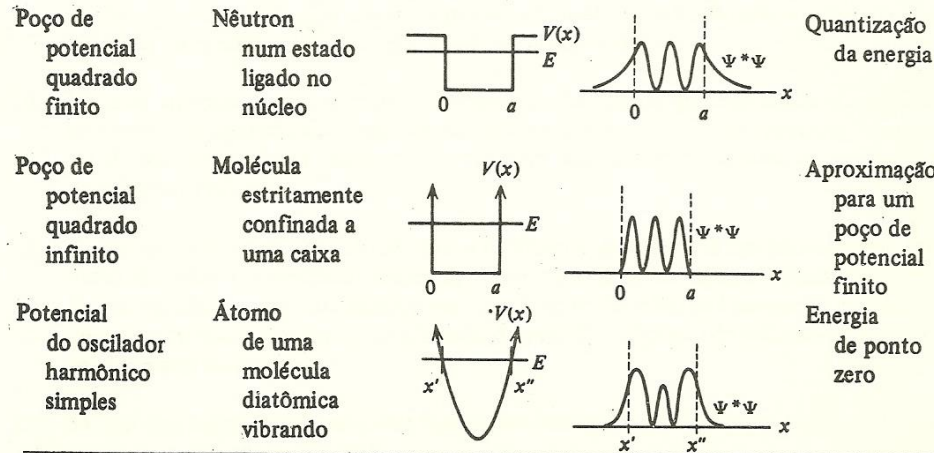
- **Energia na Mecânica Quântica \equiv Energia de Planck + energia de ponto zero do princípio de incerteza.**



Princípio de correspondência
 \equiv ornonormalidade das auto-funções de energia da Mec. Quântica $\Rightarrow \Delta n = \pm 1$.

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

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



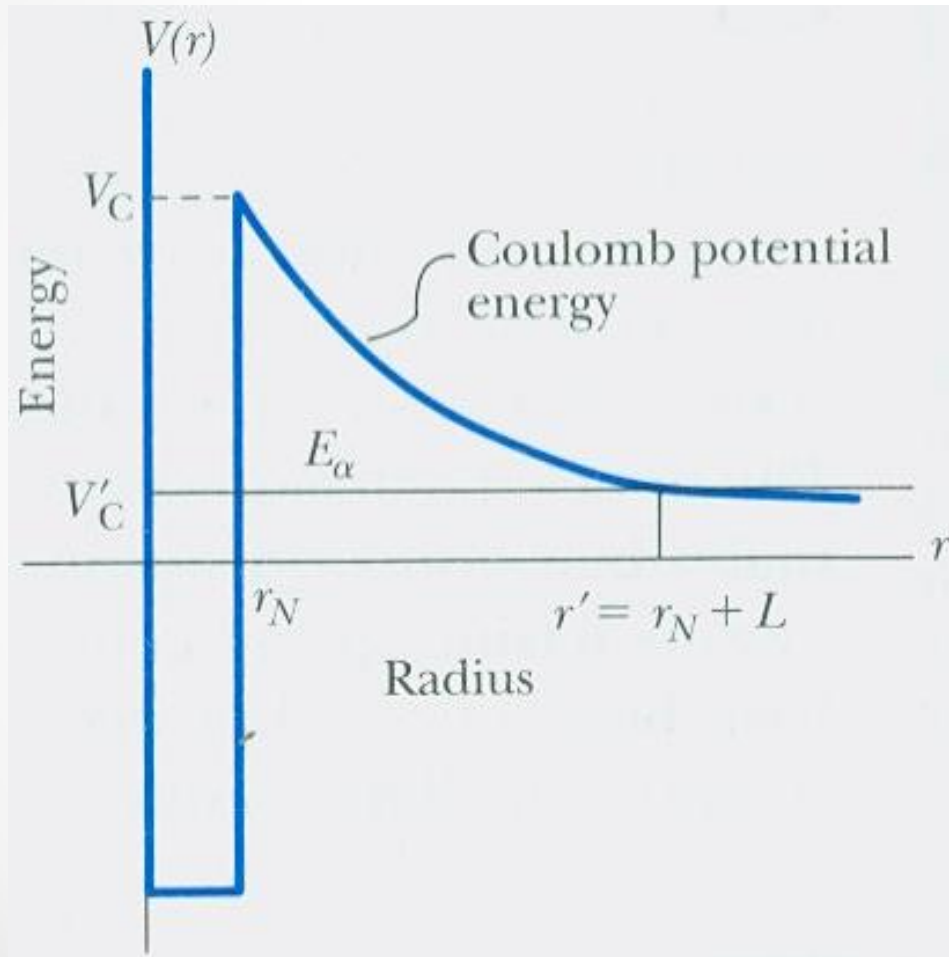
As auto-funções de energia dos estados ligados:

- *são normalizáveis;*
- *têm paridade bem definida;*
- *têm a parte espacial que depende do potencial, e são sempre funções reais;*
- *tem a mesma parte temporal: função exponencial imaginária;*
- *têm auto-valores reais e quantizados.*

As densidades de probabilidade:

- *independem do tempo;*
- *oscilam na região classicamente permitida ;*
- *tem probabilidades não nulas de estarem em regiões classicamente proibidas (só são nulas em uma região inteira, como uma aproximação!);*
- *caem rapidamente a zero na região classicamente proibida;*
- *têm valores nulos para posições infinitamente longe da origem.*

Uma partícula alfa no interior do núcleo: potencial nuclear atrativo (poço fundo) + coulombiano repulsivo: $+2e$ com $+(Z-2)e$



Se a mínima energia, estado fundamental, for positiva, como o caso de V_C há probabilidade não nula da alfa escapar do interior do núcleo. O núcleo emite uma alfa, e se torna outro núcleo após emissão de uma alfa de energia constante.

Se a mínima energia for negativa, o núcleo é estável.

(voltaremos a este exemplo oportunamente)