Instituto de Física USP

Física V - Aula 35

Professora: Mazé Bechara

Aula 35 – Soluções da equação de Schroedinger para auto-estados de energia não ligados.

1. **Aplicação: os estados mistos de estados não degenerados em energia e de estados degenerados em energia o o potencial cúbico de valores infinitos nas "paredes."**

2. A partícula livre. As auto-funções de energia. As auto-funções de energia e de momento linear – a onda plana da partícula na mecânica quântica.

- **A impossibilidade de normalização da função de onda. A partícula na condição inicial e sua evolução dinâmica.**
- **O princípio de incerteza na onda plana.**
- **O pacote de ondas planas – uma partícula "melhor" localizada no espaço.**

3. Reinterpretação da conservação da partícula

- **Uma equação de continuidade para a densidade de probabilidade unidimensional, e o conceito de fluxo de partícula.**
- **O fluxo de partícula para a onda plana no sentido positivo de x e no sentido negativo de x.**

Aplicação - continuação

- **Uma partícula de massa m está em movimento unidimensional, com velocidades não relativísticas, no interior de "uma caixa" (ou um poço, se preferir) de lados L_x, L_y e L_z. Considere a energia potencial infinita nas posições $(x,y,z) \leq (0,0,0)$ e $(x,y,z) \geq (L_x,L_y,L_z)$ e 0 no interior da caixa**

e) A partícula sujeita a este potencial **pode ter estados com energia não constante**? Justifique e dê um exemplo.

f) Há combinações lineares de auto - estados de energia que tenham energia constante? Justifique e dê um exemplo.

g) Determine a densidade linear da probabilidade desta partícula estar na posição x no instante t, no caso do exemplo do item d) e no exemplo do item e). Comente.

As energias da partícula na caixa tridimensional de potencial infinito

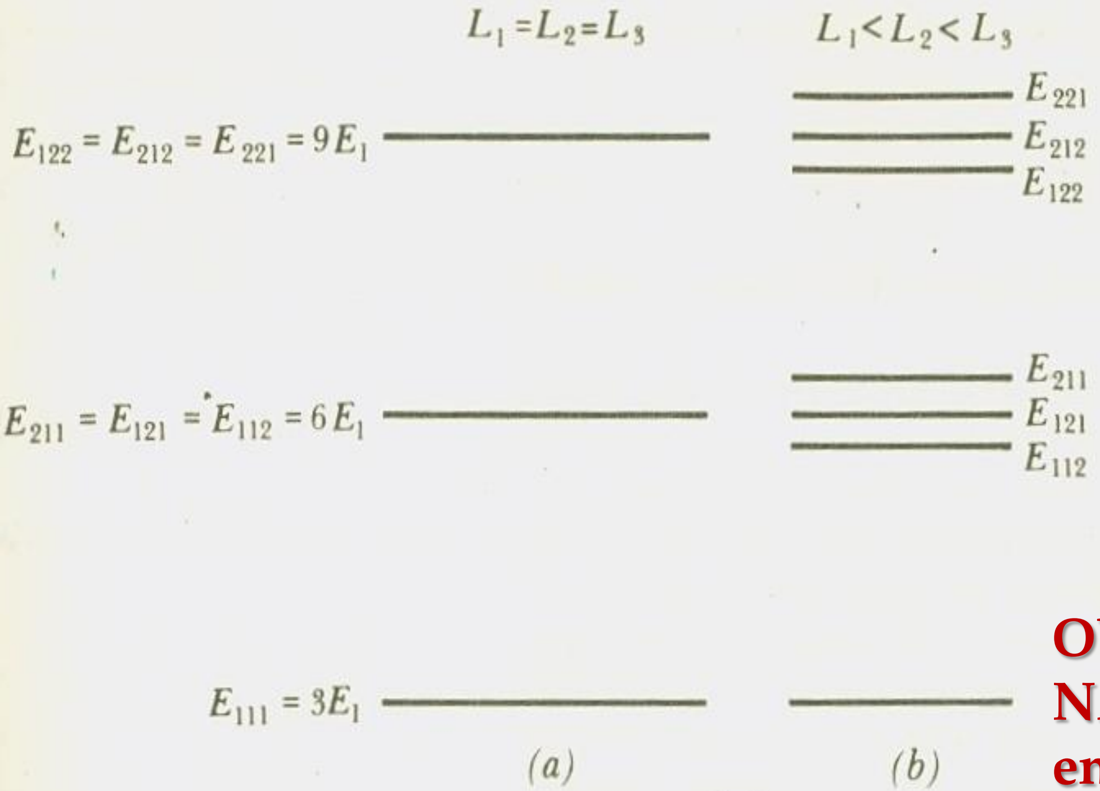
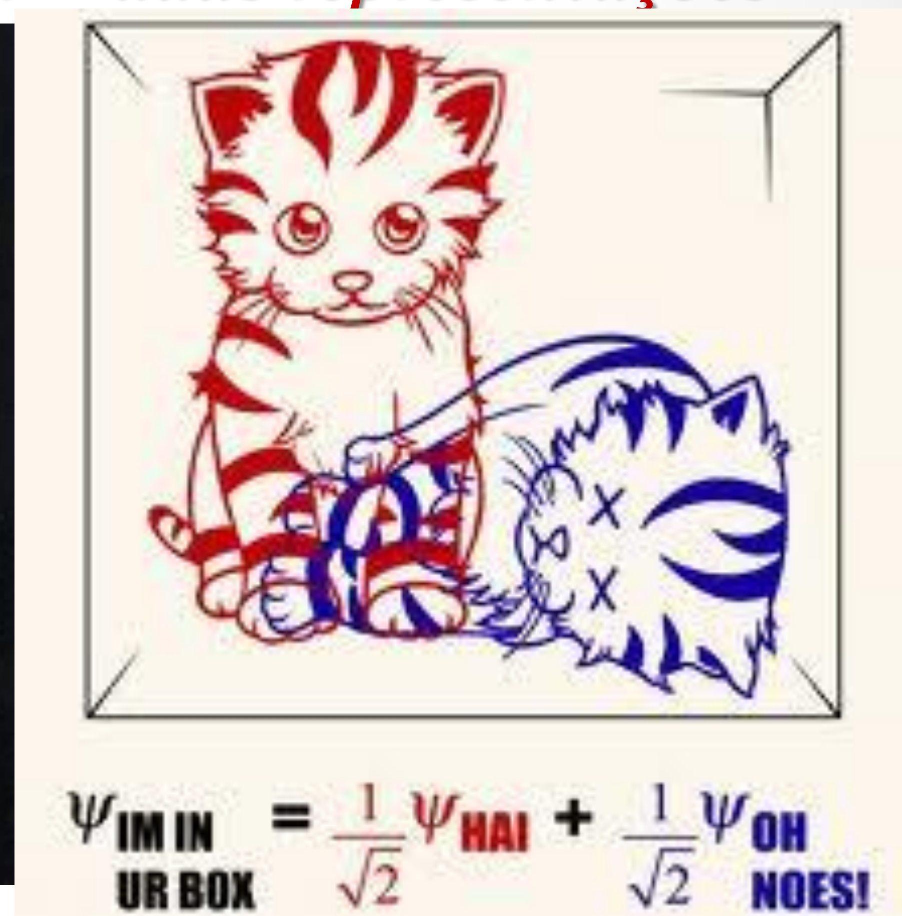


Fig. 6.24 Diagrama de nível de energia para (*a*) potencial de poço cúbico infinito e (*b*) poço infinito não-cúbico. No poço cúbico, os níveis de energia são degenerados, isto é, há duas ou mais funções de onda tendo a mesma energia. A degenerescência será removida quando a simetria do potencial for removida, como em (*b*).

Observe que a caixa NÃO cúbica NÃO tem degenerescência em energia.

Estados mistos, ou, combinações lineares de duas (ou mais) auto-funções, deram origem ao chamado "gato de Schroedinger".

O gato de Schroedinger - duas representações



A solução para partícula livre – ondas planas e pacote de ondas planas

Auto-estados de energia: a solução geral da equação da partícula livre.

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\frac{E}{\hbar}t)} + Be^{-i(kx+\frac{E}{\hbar}t)} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

- **A auto-função de energia e de momento linear: onda plana que se move no sentido de x positivo:**
-

$$\psi_+(x,t) = A_+ e^{i(kx-\frac{E}{\hbar})t} = A_+ e^{i(kx-w)t}$$

- **A auto-função de energia e momento linear: onda plana que se move no sentido de x negativo:**

$$\psi_-(x,t) = A_- e^{-i(kx+\frac{E}{\hbar}t)} = A_- e^{-i(kx+wt)}$$

- **Os pacotes de onda com todas as ondas planas, movendo-se no sentido positivo (ψ_+) ou negativo (ψ_-) de x:**

$$\psi_+(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A_+(k) e^{i(kx-\frac{E}{\hbar}t)} dk \qquad \psi_-(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A_-(k) e^{-i(kx+\frac{E}{\hbar}t)} dk$$

O princípio de incerteza das ondas planas e pacote de ondas planas

No caso da onda plana, sendo p uma constante no movimento, então a indeterminação em p_x é nula, ou seja. $\Delta p_x=0$ e portanto $\Delta x \rightarrow \infty$, pelo princípio de indeterminação de Heisenberg.

- **No caso de um pacote de onda, com todas as ondas planas, o momento não é bem definido (constante de movimento), e então pelo princípio de incerteza**

  $\Delta p_x \, \Delta x = C \geq \hbar/2$.

- **O pacote de onda é mais próximo da realidade física, mas adotamos a onda plana para simplificar os cálculos**

O fluxo de partícula a partir da equação de Schroedinger
(dedução em aula)

O fluxo da partícula entre as posições x_1 e x_2 no estado $\psi(x,t)$:

$$S(x_2,t)-S(x_1,t)=-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*(x_2)\frac{\partial\Psi(x_2)}{\partial x}-\Psi(x_2)\frac{\partial\Psi^*(x_2)}{\partial x}\right]-$$

$$-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*(x_1)\frac{\partial\Psi(x_1)}{\partial x}-\Psi(x_1)\frac{\partial\Psi^*(x_1)}{\partial x}\right]=-\frac{\partial P(entre\,x_1\,e\,x_2)}{\partial t}$$

- ***P(entre x_1 e x_2)*** **é a probabilidade da partícula estar entre as posições x_1 e x_2 no instante *t*.**
- **Observe que se a função de onda for real os fluxos são nulos. É o caso dos estados ligados.**

Conservação do fluxo de partícula a partir da equação de Schroedinger (dedução em aula)

Se $P(x_1,x_2)$ não variar no tempo, então haverá conservação de fluxo, ou seja, $S(x_2,t)=S(x_1,t)$.

$$S(x_2,t)-S(x_1,t)=-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*(x_2)\frac{\partial\Psi(x_2)}{\partial x}-\Psi(x_2)\frac{\partial\Psi^*(x_2)}{\partial x}\right]-$$

$$-\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*(x_1)\frac{\partial\Psi(x_1)}{\partial x}-\Psi(x_1)\frac{\partial\Psi^*(x_1)}{\partial x}\right]=-\frac{\partial P(entre x_1 e x_2)}{\partial t}=0$$

Fluxo da partícula representada por onda plana, movendo-se no sentido positivo e no negativo de x

O fluxo de partícula no estado ψ_+, quando a partícula se move no sentido positivo de x:

$$S_+ = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_+^* \frac{\partial \Psi_+}{\partial x} - \Psi_+ \frac{\partial \Psi_+^*}{\partial x}\right] = \frac{\hbar k}{m} A_I^* A_I = v A_I^* A_I$$

- **O fluxo da partícula no estado ψ_-, ou seja, no sentido negativo de x:**
-

$$S_- = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_-^* \frac{\partial \Psi_-}{\partial x} - \Psi_- \frac{\partial \Psi_-^*}{\partial x}\right] = -\frac{\hbar k}{m} B_I^* B_I = -v B_I^* B_I$$

- ***Observação importante: No caso de funções de onda reals os fluxos são nulos. Estão incluídos aí todos os casos dos estados ligados unidimensionais.***