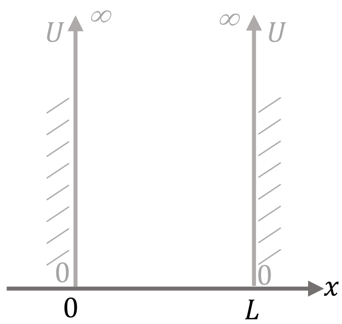
Física IV – Poli – Engenharia Elétrica: *14ª Aula* (02/10/2014)

Prof. Alvaro Vannucci

Na última aula vimos:

- Princípio de Incerteza de Heisenberg: $\begin{cases} \boxed{\Delta x \Delta p \geq \hbar / 2} \\ \boxed{\Delta E \Delta t \geq \hbar / 2} \end{cases}$
- Equação de Schrödinger: $\boxed{-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi}$
- Propriedades de ψ: ***(i)*** deve ser <u>unívoca</u>; ***(ii)*** deve ser <u>contínua</u>; ***(iii)*** a <u>primeira derivada</u> deve ser <u>contínua</u>.

➢ Vamos analisar o problema de uma partícula presa em uma caixa, que no caso *1D* será representada por duas "*paredes de potencial*" <u>infinitas</u>, localizadas em $x = 0$ e $x = L$.



➢ Note que, neste caso, a partícula nunca será encontrada fora da caixa, de forma que a função de onda ψ que descreve o sistema (e que será determinada ao resolvermos a equação de Schrödinger) deve se anular para $x \leq 0$ e $x \geq L$.

➢ Em particular, $\psi(x=0) = 0$ e $\psi(x=L) = 0$ são as *condições de contorno* a serem satisfeitas para que a solução que venhamos a encontrar tenha coerência física.

➢ Note também que na região de interesse $(0 \leq x \leq L)$ a energia potencial do sistema é nula $(U = 0)$.

➢ Portanto, da equação de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi = -K^2\psi \ \left(\text{pois } E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}} \ (1)\right)$$

➢ Ou seja, $\underline{\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0}$; (equação diferencial que admite soluções - verifique!):

$$\begin{cases} \boxed{\psi = e^{-ikx}} \rightarrow \text{propagação no sentido dos } \underline{\text{x positivos}} \\ \boxed{\psi = e^{+ikx}} \rightarrow \text{propagação no sentido dos } \underline{\text{x negativos}} \end{cases}$$

- A <u>solução geral</u> será a *combinação linear* destas soluções particulares:

$$\psi_{part.livre} = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx}$$; sendo que as constantes A' e B' podem ser complexas

- O passo seguinte é <u>aplicar as condições de contorno</u> do problema:

(i) $\psi(x=0)=0 \;\Rightarrow\; A'+B'=0 \;\Rightarrow\; \underline{B'=-A'}$

(ii) $\psi(x=L)=0 \Rightarrow A'\,e^{ikL} - A'\,e^{-ikL} = 0 \Rightarrow (\textit{aplicando Euler}\;\; \underline{e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i\sin\theta}) \Rightarrow$

$$\Rightarrow\; \cancel{\cos(kL)} + i\sin(kL) - \cancel{\cos(kL)} + i\sin(kL) = 0 \;\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sin(kL)=0 \;\Rightarrow\; \underline{kL=n\pi};\; \therefore\; \boxed{k=\frac{n\pi}{L}} \quad (2)$$

elevando este resultado ao quadrado e substituindo na equação (1):

$$\frac{2mE}{\hbar^2}L^2 = n^2\pi^2 \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{h^2}{8mL^2}n^2};\; n=1,2,3,\ldots$$

níveis de energia quantizados!

- Quanto à função de onda ψ correspondente:

$$\psi = A'\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = A'\left(\cancel{\cos(kx)} + i\sin(kx) - \cancel{\cos(kx)} + i\sin(kx)\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \underbrace{2iA'}_{=A}\sin(kx) \Rightarrow \boxed{\psi(x) = A\sin(kx)}$$

- *<u>Normalizando</u>* esta função de onda:

$$\int_0^L |\psi|^2\,dx = \int_0^L A^2\sin^2(k\,x)dx = A^2\int_0^L \frac{1-\cos(2kx)}{2}dx = 1 \;\Rightarrow$$

=0, pois $k = n\pi/L$

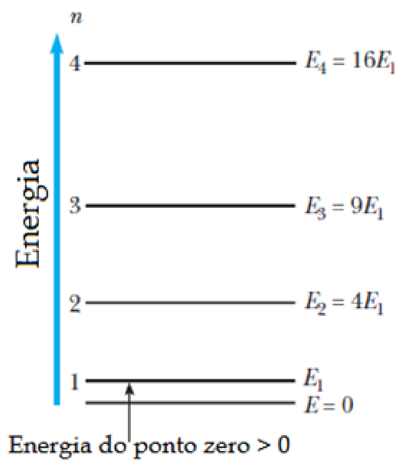
$$\Rightarrow \frac{A^2}{2}\int_0^L dx - \frac{A^2}{2}\int_0^L \cos(2kx)\,dx = \frac{LA^2}{2} - \left(\frac{A^2}{2}\right)\left(\frac{1}{2k}\right)\sin(2kx)\Big|_0^L = 1$$

=0

$$\therefore\; \frac{LA^2}{2} = 1 \;\Rightarrow\; \boxed{A=\sqrt{\frac{2}{L}}}$$

- Finalmente: $\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)}$; $n=1,2,3\ldots$

(partícula presa em uma caixa em 1D)



- Note, deste resultado, a razão pela qual o número quântico n não poder ter valor nulo: se assim fosse a função $\psi(x)=0 \left(\therefore |\psi(x)|^2 = 0 \right)$ para qualquer valor de x !

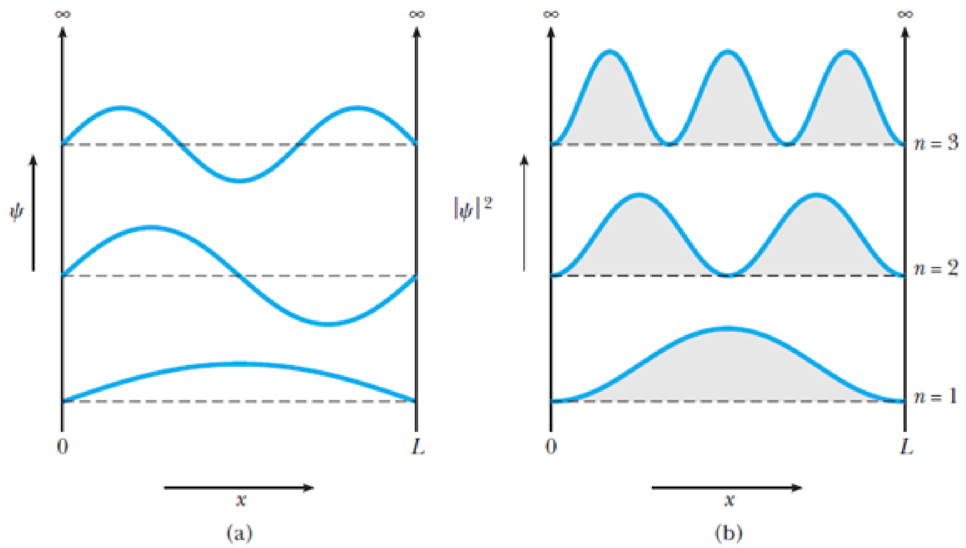
- Então, observando os valores possíveis de energia: $E_n = \left(\dfrac{\hbar^2}{8mL^2} \right) n^2$, vemos que a energia mais baixa do sistema será $E_1 = \dfrac{\hbar^2}{8mL^2}$, de forma que $\boxed{E_n = n^2 E_1}$.

- O valor mínimo de energia do sistema será $E_1(n=1)$, que corresponde à *Energia do Ponto Zero*; este resultado é contraditório com relação à Física Clássica, que prevê $E=0$!

- Note também que a energia do sistema nunca será $E=2E_1$, por exemplo! ($2E_1$ não é um estado energético permitido)

- Além disso, para o sistema passar de E_1 para E_2 (ou E_3), por exemplo, ele só irá absorver fótons com energias específicas: $\boxed{E_{fóton} = E_f - E_i = hf}$

- E para cada um destes estados de energia, há uma função de onda correspondente, dada pela equação $\boxed{\psi_n(\mathrm{x}) = \sqrt{\dfrac{2}{L}} \sin\left(\dfrac{n\pi}{L} x \right)}$, de forma que a distribuição de probabilidade de se encontrar a partícula em uma posição x dentro da caixa é:
$\boxed{|\psi_n(\mathrm{x})|^2 = \dfrac{2}{L}\sin^2\left(\dfrac{n\pi}{L} x \right)}$; $n=1,2,3,\ldots$ **Note**: $\boxed{K = \dfrac{n\pi}{L} = \dfrac{2\pi}{\lambda}} \rightarrow \boxed{\lambda = \dfrac{2\pi L}{n\pi}}$



Os primeiros três estados estacionários para uma partícula confinada a uma caixa 1D. Em (a), temos as funções de onda para n=1,2,3. Em (b) temos a função densidade de probabilidade para n=1,2,3.

- ***Exercício 37 – capítulo 28:*** Uma partícula em um poço de potencial quadrado infinito encontra-se no estado quântico determinado pela função de onda:

$\psi(\text{x}) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$, no intervalo $0 \le x \le L$.

a) Calcule o valor médio da posição x.

b) Determine a probabilidade de encontrar a partícula próximo de $x = L/2$, calculando a probabilidade dela ser encontrada no intervalo $0,49L \le x \le 0,51L$.

c) Determine a probabilidade de encontrá-la próximo de $x = L/4$, calculando a probabilidade dela estar no intervalo $0,24L \le x \le 0,26L$.

d) Discuta os resultados obtidos.

- ***Resolução:***

a) $\langle x\rangle = \int_0^L (x)\left(\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right)^2 dx = \left(\begin{array}{l}\text{lembrando que:}\\ \sin^2\theta = \dfrac{1-\cos 2\theta}{2}\end{array}\right) =$

$$= \frac{\cancel{2}}{L}\int_0^L (x)\left(\frac{1-\cos(4\pi x/L)}{\cancel{2}}\right)dx = \frac{1}{L}\int_0^L x dx - \frac{1}{L}\int_0^L \text{x}\cos(4\pi x/L)\,dx \Rightarrow$$

$$\left(\begin{array}{l}\text{integrando por partes:}\\ \int uv' = uv - \int u'v\end{array}\right) \Rightarrow \langle x\rangle = \frac{x^2}{2L}\Big|_0^L - \left\{\left[\left(\frac{x}{\cancel{L}}\right)\left(\frac{\cancel{L}}{4\pi}\underbrace{\sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)}_{=0}\right)\right]_0^L - \frac{x}{\cancel{L}}\int_0^L \frac{\cancel{L}}{4\pi}\sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)dx\right\}$$

$$\Rightarrow \langle x\rangle = \frac{L^{\cancel{2}}}{2\cancel{L}} + \left(\frac{1}{4\pi}\right)\left(\frac{L}{4\pi}\right)\left(-\cos\frac{4\pi x}{L}\right)_0^L \Rightarrow \underline{\underline{\langle x\rangle = \frac{L}{2}}}$$

(=-1 em $x=L$; =+1 em $x=0$)

b) $P_{L/2} = \int_{0,49L}^{0,51L}\frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{2\pi}{L}x\right)dx = \frac{\cancel{2}}{L}\int_{0,49L}^{0,51L}\frac{1}{\cancel{2}}dx - \frac{\cancel{2}}{L}\int_{0,49L}^{0,51L}\frac{1}{\cancel{2}}\cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right)dx =$

em radianos

$$= \frac{x}{L}\Big|_{0,49L}^{0,51L} - \frac{\cancel{L}}{4\pi\cancel{L}}\sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)\Big|_{0,49\text{L}}^{0,51L} = \frac{0,02\cancel{L}}{\cancel{L}} - \frac{1}{4\pi}\left(\sin\frac{2,04\pi\cancel{L}}{\cancel{L}} - \sin\frac{1,96\pi\cancel{L}}{\cancel{L}}\right)$$

$$\therefore P_{L/2} = 0,02 - \frac{1}{4\pi}(0,122+0,128) = 0,02 - 0,0199 \Rightarrow \underline{\underline{P_{L/2} = 10^{-4}\,(ou\,0,01\%)}}$$

c) Igualmente:

$$P_{L/4} == \frac{x}{L}\Big|_{0,24\text{L}}^{0,26L} - \frac{1}{4\pi}\left(\underbrace{\sin 1,04\pi}_{=-0,124} - \underbrace{\sin 0,96\pi}_{=0,127}\right) \Rightarrow \underline{P_{L/4} = 0,02+0,02 = 0,04\,(ou\,4\%)}$$

d) Apesar da probabilidade de encontrarmos a partícula (ao efetuarmos uma medida) no entorno de $x = L/4 \left(ou\; x = 3L/4 \right)$ ser muito <u>maior</u> que no entorno de $x = L/2$, é razoável que o valor médio (*após inúmeras medidas*) da sua posição seja $x = L/2$. Fica fácil ver isto se pegarmos, por exemplo, duas classes com dez alunos cada; sendo que em uma delas as notas da prova foram:

Classe A	
Alunos	**Nota**
1	3
2	4
5	5
2	7

Classe B	
Alunos	**Nota**
5	zero
5	dez

observe: nos dois casos,
a média da classe é ***5*** !