

# NOTAS DE AULAS DE FÍSICA MODERNA

Prof. Carlos R. A. Lima

CAPÍTULO 6

## **SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHORÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO**

Edição de junho de 2014

# CAPÍTULO 06 – SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

## ÍNDICE

- 6.1- Partícula Livre
- 6.2- Potencial Degrau
- 6.3- Barreira de Potencial
- 6.4- Poços de Potenciais Finito e Infinito
- 6.5- Oscilador Harmônico

Nessa apostila aparecem seções, sub-seções e exemplos resolvidos intitulados como **facultativos**. Os assuntos que se referem esses casos, podem ser dispensados pelo professor durante a exposição de aula sem prejuízo da continuidade do curso de Física Moderna. Entretanto, é desejável que os alunos leiam tais assuntos e discutam dúvidas com o professor fora do horário de aula. Fica a cargo do professor a cobrança ou não dos tópicos facultativos.

Excluindo os tópicos facultativos, esse capítulo deve ser abordado no máximo em **4 aulas de quatro créditos**.

## CAPÍTULO 6

### SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO.

Neste capítulo, propõe-se analisar o comportamento dos sistemas quânticos mais importantes, por meio da solução da equação de Schroedinger independente do tempo. Os sistemas estudados aqui ficarão restritos a uma dimensão somente, uma vez que isso leva a uma razoável simplificação no tratamento matemático, sem perda dos detalhes daquilo que se deseja investigar. As exceções a essa regra, são os fenômenos que envolvem o conceito de momento angular, uma vez que essa grandeza não tem significado unidimensional. Exemplos de sistemas como esses serão abordados nos próximos capítulos.

#### 6.1. Partícula Livre.

O sistema quântico mais simples é aquele no qual o potencial  $V(x)$  é uma constante. Esse é o caso de uma partícula livre, onde a força atuante é  $F = -dV(x)/dx = 0$ . Sem perda de generalidade, pode-se assumir que

$$V(x) = 0 \quad (6.1)$$

Nesse caso, a equação de Schrodinger independente do tempo (5.35), torna-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (6.2)$$

A solução mais geral dessa equação é uma combinação linear de duas ondas planas se deslocando, uma para a direita e outra para a esquerda, isto é,

$$\psi(x) = A e^{+ikx} + B e^{-ikx} \quad (6.3)$$

Substituindo esta solução na eq. (6.2), obtém-se o número de onda

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6.4)$$

O valor esperado do momento linear  $\langle p \rangle$ , para a parcela da função de onda que se move para a direita  $\psi_d(x) = A e^{+ikx}$ , será

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_d^* p \psi_d dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_d^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) A e^{ikx} dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_d^* \left( \frac{\hbar}{i} ik A e^{ikx} \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_d^* (\hbar k) \psi_d dx = \hbar k \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_d^* \psi_d dx, \end{aligned}$$

ou, da condição de normalização  $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_d^* \psi_d dx = 1$  e da eq. (6.4),

$$\langle p \rangle = +\hbar k = +\sqrt{2mE} \quad (6.5)$$

Similarmente, para a parcela da função de onda que se move para a esquerda,  $\psi(x) = Ae^{-ikx}$ , tem-se

$$\langle p \rangle = -\hbar k = -\sqrt{2mE}. \quad (6.6)$$

Assim, o movimento da partícula livre tem o mesmo sentido da propagação da sua onda de de Broglie.

A densidade de probabilidade,  $|\psi(x)|^2$ , para a partícula livre que se move, por exemplo, para a direita e-

$$|\psi_d(x)|^2 = \psi_d^*(x)\psi_d(x) = A^*e^{-ikx}Ae^{+ikx} = A^*A, \quad (6.7)$$

independente, portanto, da posição  $x$  da partícula. Assim, a partícula livre deve ter igual probabilidade de ser encontrada em qualquer ponto do espaço e, conseqüentemente, uma incerteza na sua localização  $\Delta x \rightarrow \infty$ . Isso significa que o pacote de ondas tem largura infinita e o princípio da incerteza,  $\Delta p \Delta x \sim \hbar/2$ , mostra que o momento  $p$  da partícula pode ser determinado com precisão total, pois  $\Delta p \rightarrow 0$ .

Do mesmo modo, das eqs. (6.5) ou (6.6), a energia  $E$  também pode ser determinada com precisão total, tal que  $\Delta E \rightarrow 0$ . Do princípio da incerteza  $\Delta E \Delta t \sim \hbar/2$  dispõe-se, portanto, de um intervalo

de tempo  $\Delta t \rightarrow \infty$  para a medida da energia total da partícula. Além dessas características, tanto a energia  $E$  como o momento  $p$  da partícula livre, podem assumir qualquer valor, inclusive zero.

Partículas livres são, evidentemente, casos idealizados que dificilmente são encontradas na natureza. A presença de algum potencial variável é mais frequente e os casos mais importantes são abordados nas próximas seções.

## 6.2. Potencial Degrau.

Nessa e nas próximas seções, deve-se adotar potenciais com descontinuidades abruptas em determinados pontos do eixo  $x$ . Potenciais como esse não existem de fato na natureza, no entanto, são frequentemente utilizados na física quântica por serem de fácil tratamento matemático e reproduzirem situações reais com boa aproximação.

Iniciá-se a discussão com o potencial degrau, mostrado na Fig. 6.1.

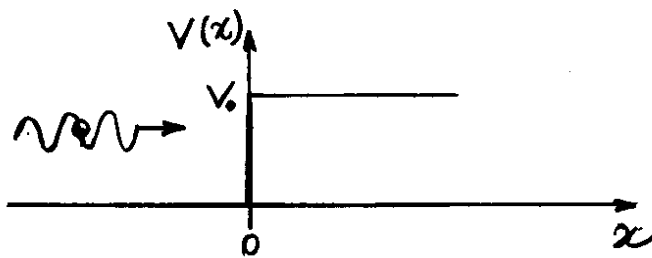


Fig. 6.1. Representação gráfica de um potencial degrau.

O potencial degrau é descrito matematicamente por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ V_0 & \text{para } x \geq 0 \end{cases} \quad (6.8)$$

em que  $V_0$  é uma constante.

Seja uma partícula de massa  $m$  e energia total  $E$  na região  $x < 0$  dirigindo-se para o ponto  $x = 0$ , onde o potencial  $V(x)$  varia abruptamente. De acordo com a mecânica clássica, a partícula moverá livremente até alcançar  $x = 0$ , onde estará sujeita a uma força impulsiva,  $F = -dV(x)/dx$ , atuando no sentido negativo do eixo  $x$ . A idealização do potencial, dado na Fig. 6.1, implica numa força impulsiva de módulo infinito em  $x = 0$ , pois, nesse ponto,  $dx \rightarrow 0$ . No entanto, como sua ação é durante um tempo infinitesimal pequeno, não exatamente zero, o impulso  $I = \int F dt$ , que dá a variação do momento linear  $\Delta p$  da partícula, é finito. Conclui-se que a idealização do potencial não afeta a variação do momento linear  $\Delta p$  da partícula.

Na mecânica clássica, o comportamento da partícula, após receber a ação do potencial em  $x = 0$ , depende da relação entre  $E$  e  $V_0$ . Isso também deve ocorrer do ponto de vista da mecânica quântica. O caso onde  $E < V_0$ , o qual se propõe estudar em primeiro lugar, está ilustrado na Fig. 6.2. O caso  $E > V_0$  será analisado no final dessa seção.

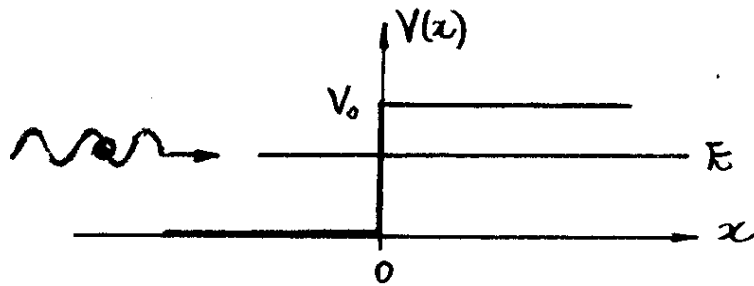


Fig. 6.2 - Incidência de uma partícula de energia total  $E$  sobre um potencial degrau  $E < V_0$ .

Como a região  $x > 0$  é uma região classicamente proibida, de acordo com a mecânica clássica a força impulsiva sempre inverterá o momento linear da partícula. Da lei da conservação do momento linear, o módulo do momento  $p$  permanece o mesmo após inversão.

Para determinar o movimento da partícula, de acordo com a mecânica quântica, deve-se encontrar uma função de onda que é solução da equação de Schrödinger independente do tempo para o caso  $E < V_0$ . Para o potencial degrau, o eixo  $x$  se divide em duas regiões: A região  $x < 0$  onde  $V(x) = 0$  e a região  $x \geq 0$  onde  $V(x) = V_0$ . As equações de Schrödinger independente do tempo correspondentes a essas regiões são:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad \text{para } x < 0 \quad (6.9)$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E\psi(x) \quad \text{para } x \geq 0. \quad (6.10)$$

A eq. (6.9) é, essencialmente, a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula livre,



discutida na seção anterior cuja solução, dada na eq. (6.3), é

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{para } x < 0. \quad (6.11)$$

Por outro lado, como se refere a uma região classicamente proibida, não se deve esperar uma função  $\psi(x)$  oscilatória como solução da eq. (6.10) e sim uma função que se aproxima gradativamente do eixo  $x$ . A função com essa propriedade é uma exponencial real decrescente, isto é,

$$\psi(x) = e^{-k_2x} \quad \text{para } x \geq 0. \quad (6.12)$$

Derivando duas vezes em relação a  $x$ , obtêm-se

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (-k_2)^2 e^{-k_2x} = k_2^2 \psi(x). \quad (6.13)$$

Substituindo esta equação na eq. (6.10), deve-se concluir que a eq. (6.12) será solução se

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad E < V_0. \quad (6.14)$$

Como na eq. (6.13) aparece o quadrado de  $k_2$ , então não há nenhum impedimento formal para que o sinal na exponencial na eq. (6.12), também seja positivo, tal que se possa assumir a solução geral:

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}, \quad k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad \text{para } x \geq 0. \quad (6.15)$$

As constantes  $A, B, C$  e  $D$  nas eqs. (6.11) e (6.15) podem ser determinadas utilizando as condições de localidade e continuidade das funções  $\psi(x)$  e  $d\psi(x)/dx$ .

Seja inicialmente o comportamento de  $\psi(x)$  quando  $x \rightarrow +\infty$ . Nessa região do eixo  $x$ , a solução é dada pela eq. (6.15) e constata-se que,  $\psi(x) \rightarrow +\infty$  quando  $x \rightarrow +\infty$ , por causa do termo  $Ce^{k_2x}$ . Logo, para evitar que isso ocorra, é necessário assumir  $C=0$ .

Por outro lado, para garantir a continuidade em  $x=0$ , as duas formas de  $\psi(x)$  em (6.11) e (6.15), e suas derivadas, devem ser iguais em  $x=0$ . No primeiro caso, obtém-se

$$D(e^{-k_2x})_{x=0} = A(e^{ik_1x})_{x=0} + B(e^{-ik_1x})_{x=0} \Rightarrow D = A + B \quad (6.16)$$

e, no segundo caso, encontra-se

$$-k_2 D(e^{-k_2x})_{x=0} = ik_1 A(e^{ik_1x})_{x=0} - ik_1 B(e^{-ik_1x})_{x=0}$$

ou

$$\frac{ik_2}{k_1} D = A - B \quad (6.17)$$

Somando as eqs. (6.16) e (6.17), obtém-se

$$A = \frac{D}{2} \left( 1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) \quad (6.18) \leftarrow$$

e, subtraindo-as, encontra-se

$$B = \frac{D}{2} \left( 1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) \quad (6.19) \leftarrow$$

Assim, a solução para o potencial degrau, com  $E < V_0$ , será

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2}(1+ik_2/k_1)e^{ik_1x} + \frac{D}{2}(1-ik_2/k_1)e^{-ik_1x} & \text{para } x \leq 0 \\ De^{-k_2x} & \text{para } x > 0 \end{cases} \quad (6.20)$$

A função de onda completa  $\Psi(x,t)$  será obtida substituindo as eqs. (6.20) na seguinte equação geral:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (6.21)$$

A constante  $D$  na eq. (6.20) define a amplitude da função de onda e é conveniente mantê-la arbitrária.

Para  $x \leq 0$ , o primeiro termo na eq. (6.20), é uma onda que se propaga no sentido positivo do eixo  $x$  e o segundo uma onda que se propaga no sentido negativo. Esse fato, somada às previsões clássicas, sugere que se deve associar ao primeiro termo a incidência da partícula sobre o potencial degrau e ao segundo a reflexão da partícula no degrau.

A partir dessa concepção, pode-se calcular a probabilidade da partícula incidente ser refletida, denominada de reflectância  $R$ . Como a intensidade de uma onda é proporcional ao quadrado do módulo de sua amplitude, a reflectância  $R$ , será a razão entre módulos quadráticos da amplitude da onda refletida  $|B|^2$  e da amplitude da onda incidente  $|A|^2$ , isto é,

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{B^* B}{A^* A}, \quad (6.22)$$

ou, de acordo com a eq. (6.20),

$$R = \frac{(1 + ik_2/k_1)(1 - ik_2/k_1)}{(1 - ik_2/k_1)(1 + ik_2/k_1)} = 1.$$

Esse resultado mostra que, similarmente à previsão clássica, a partícula microscópica será sempre refletida ao incidir sobre o degrau. Entretanto, diferentemente da partícula clássica, a segunda eq. (6.20) mostra que a partícula microscópica pode ser encontrada na região  $x > 0$ . De acordo com essa equação e também da eq. (6.21), a densidade de probabilidade da partícula ocupar a região  $x > 0$  é

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)\psi(x) = D^* D e^{-2k_2 x} \text{ para } x > 0. \quad (6.23)$$

A Fig. 6.3 mostra o comportamento das funções  $\psi(x)$  e  $|\Psi(x,t)|^2$ , de acordo com as eqs. (6.20), (6.21) e (6.23). É importante perceber que o pacote de ondas é infinito para  $x < 0$  e finito para  $x > 0$ .

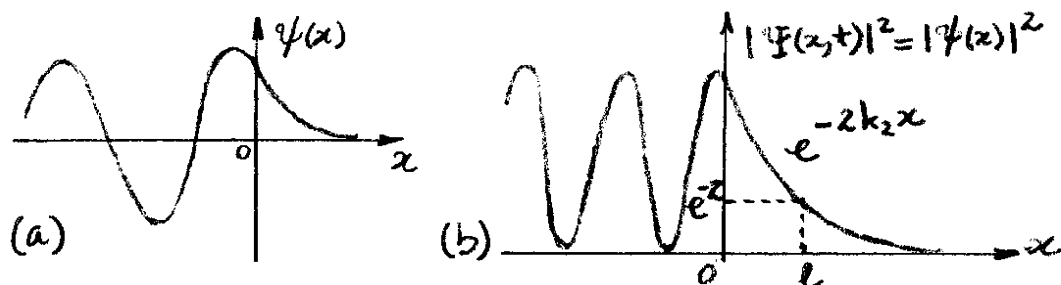


Fig. 6.3 - Comportamento, (a) da função de onda e (b) da densidade de probabilidade, para um potencial de degrau com  $E < V_0$ .

A presença de uma partícula microscópica numa região onde  $E < V_0$ , é um fenômeno denominado de penetração em região classicamente proibida e é uma das previsões mais notáveis da mecânica quântica.

Deve-se enfatizar que tal penetração não significa que a partícula seja mantida na região classicamente proibida, pois mostrou-se que ela é certamente refletida no decaimento.

A Fig. 6.3(b) mostra a definição de uma distância de penetração como sendo a distância  $x = l$  para a qual  $e^{-2k_2 l} = e^{-2}$ , isto é,

$$l = \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (6.24)$$

No limite clássico, o produto de  $m$  por  $(V_0 - E)$  é tao grande, comparado a  $\hbar$ , que  $l$  é praticamente nulo.

O princípio da incerteza permite calcular a incerteza  $\Delta E$  na energia  $E$  da partícula, quando está na região classicamente proibida. A incerteza  $\Delta x$  na posição  $x$ , nessa região, pode ser extrapolada para ser a metade da distância de penetração  $l/2$ , tal que

$$\Delta p \Delta x \approx \hbar/2 \Rightarrow \Delta p \cdot l/2 \approx \hbar/2 \Rightarrow \Delta p \approx \frac{\hbar}{l} = \sqrt{2m(V_0 - E)}.$$

Como a incerteza do potencial  $V$  é nula na região  $x > 0$ , pois seu valor é certamente  $V_0$ , então a incerteza na energia total  $E = V_0 + K$  será

$$\Delta E = \Delta V + \Delta K = 0 + \frac{\Delta p^2}{2m} \approx V_0 - E, \quad (6.25)$$

O que mostra que, do ponto de vista ondulatório, não é possível afirmar que a energia total  $E$  da partícula é de fato menor do que a energia potencial  $V_0$  na região  $x > 0$ . Isso significa que as características ondulatória e corpuscular da partícula não se conflitam na região classicamente proibida.

Seja agora o caso  $E > V_0$ , como mostra a Fig. 6.4.

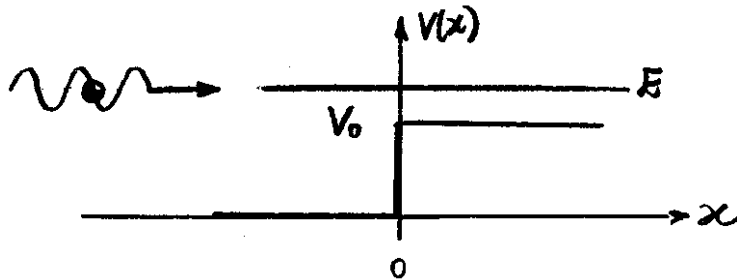


Fig. 6.4 - Incidência de uma partícula de energia total  $E$  sobre um potencial degrau, em que  $E > V_0$ .

De acordo com a mecânica clássica, a força impulsiva  $F = -dV(x)/dx$  sobre a partícula de energia total  $E$ , no ponto  $x = 0$ , fará apenas com que a partícula fique mais lenta e continue seu movimento em  $x > 0$ . Então, de acordo com a teoria clássica, a partícula sempre atingirá a região  $x > 0$ . Deve-se concluir, na sequência, que as previsões quânticas não são tão simples assim.

Como não existem regiões classicamente proibidas, isto é,  $E > V_0$  para todos os pontos do eixo  $x$ , então as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo devem ser funções oscilatórias para ambas as regiões  $x < 0$  e  $x > 0$ , isto é,

$$\psi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad \text{para } x < 0, \quad (6.26)$$

e

$$\psi(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad \text{para } x > 0, \quad (6.27)$$

onde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar} \quad \text{e} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar}. \quad (6.28)$$

Observa-se que, como  $k_2 < k_1$ , as funções de onda se referem às ondas de de Broglie de comprimentos de onda  $\lambda_2 > \lambda_1$ , pois  $\lambda_2 = 2\pi/k_2$  e  $\lambda_1 = 2\pi/k_1$ .

Após passar para a região  $x > 0$ , a partícula não deve retornar para a região de incidência e, conseqüentemente,  $D = 0$  na eq. (6.27). As outras constantes  $A$ ,  $B$  e  $C$ , podem ser encontradas assumindo as condições de continuidade de  $\psi(x)$  e  $d\psi(x)/dx$  em  $x = 0$ . No primeiro caso,

$$A(e^{ik_1 x})_{x=0} + B(e^{-ik_1 x})_{x=0} = C(e^{ik_2 x})_{x=0}$$

ou

$$A + B = C \quad (6.29)$$

e, no segundo caso,

$$ik_1 A(e^{ik_1 x})_{x=0} - ik_1 B(e^{-ik_1 x})_{x=0} = ik_2 C(e^{ik_2 x})_{x=0}$$

ou

$$k_1(A-B) = k_2 C \quad (6.30)$$

Combinando as eqs. (6.30) com a eq. (6.29), obtêm-se

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad \text{e} \quad C = \frac{2k_2}{k_1 + k_2} A \quad (6.31)$$

Assim, as soluções (6.26) e (6.27), tornam-se

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + A \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} & \text{para } x \leq 0, \\ A \frac{2k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} & \text{para } x \geq 0, \end{cases} \quad (6.32)$$

com,  $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$  e  $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$ .

O primeiro termo para  $x < 0$  especifica uma onda incidente, o segundo termo, numa mesma região, especifica uma onda refletida e o único termo para  $x > 0$  especifica a onda transmitida.

A Fig. 6.5 mostra o comportamento da densidade de probabilidade,  $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$ , de acordo com a eq. (6.32), para  $k_2 = \frac{1}{2} k_1$ .

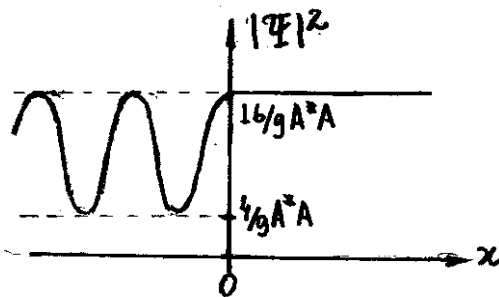


Fig. 6.5 - Densidade de probabilidade para um potencial degrau para  $E > V_0$  e  $k_2 = \frac{1}{2} k_1$ .



De acordo com a primeira eq. (6.32), a refletância  $R$  é

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \text{ para } E > V_0. \quad (6.33)$$

O fato de existir uma probabilidade da partícula ser refletida em um degrau de potencial para o qual  $E > V_0$  é surpreendente pois, do ponto de vista clássico, ela deveria sempre ser transmitida através do degrau. Mas, por outro lado, é natural que uma onda clássica possa ser refletida em qualquer descontinuidade. Um exemplo disso é a incidência de uma onda eletromagnética numa interface entre dois meios de diferentes índices de refração.

É possível determinar também, a probabilidade da partícula ser transmitida através do degrau, denominada de transmitância  $T$ . A transmitância não é tão simples de determinar, porque a velocidade da partícula é diferente nas duas regiões. Nesse caso, adota-se o conceito de fluxo de probabilidade, ou probabilidade por unidade de tempo, tal que

$$T = \frac{v_2 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{v_2}{v_1} \left( \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2,$$

Como

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{e} \quad v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m} ,$$

então

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{(2k_1)^2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \quad \text{para } E > V_0. \quad (6.34)$$

Não é difícil mostrar que a soma das eqs. (6.33) e (6.34) resulta em

$$R + T = 1. \quad (6.35)$$

Este resultado óbvio é, na verdade, a motivação para definir a transmitância  $T$ , e também a reflectância  $R$ , em termos de de fluxo de probabilidade.

### 6.3 - Barreira de Potencial.

A barreira de potencial é especificada pela presença de um potencial diferente de zero, somente numa região finita do espaço, como ilustrado na Fig. 6.6.

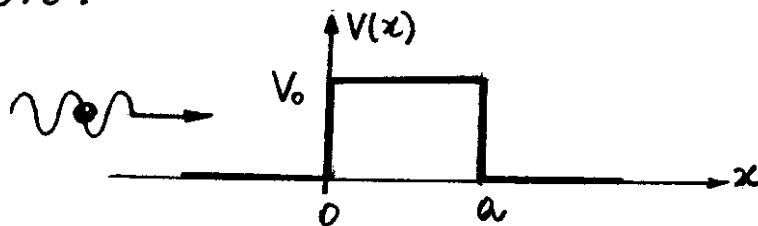


Fig. 6.6 - Representação gráfica de uma barreira de potencial.

A barreira de potencial é descrita matematicamente por

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{se } x < 0 \text{ ou } x > a \end{cases} \quad (6.36)$$

De acordo com a mecânica clássica, uma partícula de energia  $E$ , vindo da região  $x < 0$ , tem probabilidade 01 de ser refletida se  $E < V_0$  e probabilidade 01 de ser transmitida para a região  $x > a$  se  $E > V_0$ . Aqui também deve-se verificar que as previsões da teoria quântica não são tão simples assim.

Nas regiões à esquerda e à direita da barreira, as equações diferenciais são as mesmas que de uma partícula livre para  $V=0$  e energia total  $E$ , cujas soluções são

$$\psi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad \text{para } x < 0, \quad (6.37)$$

$$\psi(x) = C e^{ik_1 x} + D e^{-ik_1 x} \quad \text{para } x > a, \quad (6.38)$$

em que,

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

No interior da barreira, deve-se ter diferentes soluções para  $E < V_0$  e  $E > V_0$ . Os dois casos já foram discutidos na seção 6.2. No caso  $E < V_0$ , a solução é

$$\psi(x) = F e^{-k_2 x} + G e^{k_2 x} \quad \text{para } 0 \leq x \leq a, \quad (6.39)$$

em que,

$$k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

e, no caso  $E > V_0$ , a solução é

$$\psi(x) = F e^{ik_3 x} + G e^{-ik_3 x} \text{ para } 0 < x < a, \quad (6.40)$$

em que

$$k_3 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar.$$

Como a partícula se desloca para a direita, na região à direita da barreira  $x > a$ , só pode existir uma onda transmitida tal que  $D = 0$ . Entretanto, não se pode assumir  $G = 0$  nos eqs. (6.39) e (6.40) pois, nestes casos, nada impede que se tenha uma componente de reflexão em  $x = a$ .

### 6.3.1 - Caso $E < V_0$ .

Usando a condição de continuidade de  $\psi(x)$  e  $d\psi(x)/dx$  nos pontos  $x = 0$  e  $x = a$ , obtêm-se quatro equações independentes, que permitem determinar  $B, C, F$  e  $G$  em termos de  $A$ . O comportamento de  $\psi(x)$  e da densidade de probabilidade  $|\psi(x,t)|^2$ , correspondente é mostrado na Fig. 6.7.

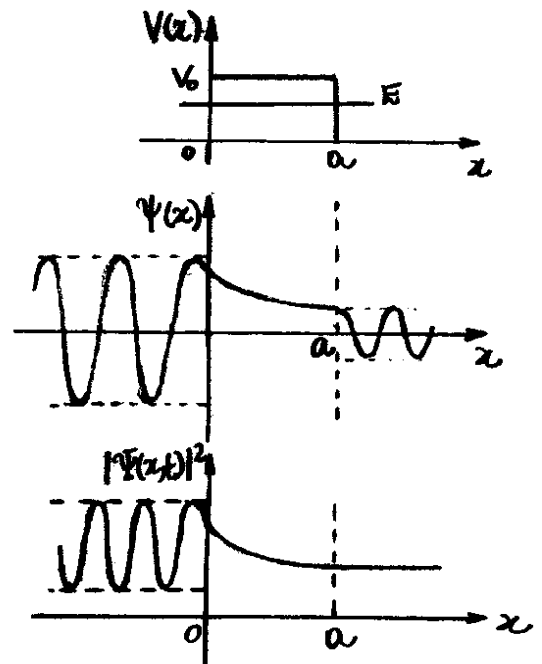


Fig. 6.7 - Comportamento de  $\psi(x)$  e  $|\psi(x,t)|^2$  para uma barreira de potencial para  $E < V_0$ .

O resultado mais importante aqui se refere a transmitância  $T$ , cujo valor é dado pela razão entre os fluxos de probabilidade na transmissão  $v_2 C^* C$  e na incidência  $v_1 A^* A$ .

Sem se preocupar com os detalhes dos cálculos, pode-se mostrar que a transmitância é

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[ 1 + \frac{(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a})^2}{16E/V_0 (1-E/V_0)} \right]^{-1} = \left[ 1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4E/V_0 (1-E/V_0)} \right]^{-1}, \quad (6.41)$$

em que

$$k_2 a = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \quad \text{para } E < V_0. \quad (6.42)$$

Se o expoente  $k_2 a \gg 1$  ou  $a \gg \lambda_2$ , então  $e^{k_2 a} \gg e^{-k_2 a}$ . Logo, a primeira eq. (6.41) torna-se

$$T \approx \left[ 1 + \frac{e^{2k_2 a}}{16E/V_0 (1-E/V_0)} \right]^{-1} \approx \left[ \frac{e^{2k_2 a}}{16E/V_0 (1-E/V_0)} \right]^{-1},$$

ou

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_2 a} \quad \text{para } E < V_0 \text{ e } a \gg \lambda_2. \quad (6.43)$$

Esta equação mostra que uma partícula, de massa  $m$  e energia total  $E$ , incidente sobre uma barreira de potencial com  $E < V_0$  e largura finita  $a$ , tem uma probabilidade  $T \neq 0$  de atravessar a barreira. Este fenômeno é denominado de penetração de barreira, ou tunelamento. Evidentemente,  $T$  é praticamente nulo no limite clássico, pois o termo

$2mV_0 a^2/\hbar^2$  na eq. (6.42), que é uma medida da opacidade da barreira, é extremamente grande e  $e^{-2k_2 a} \rightarrow 0$ .

A Fig. 6.8 mostra um método experimental para observação da penetração de barreira no caso da luz. Trata-se da incidência de luz através de dois prismas de reflexão total.

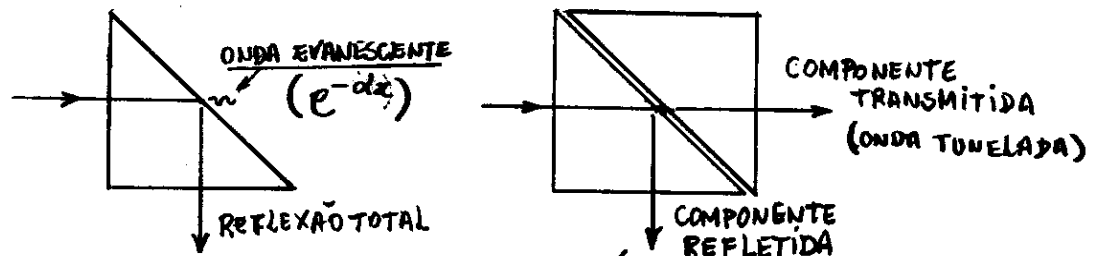


Fig. 6.8 - Experimento para demonstração da penetração de barreira para o caso da luz.

Quando se utiliza somente um prisma, a luz é refletida totalmente em uma das faces interna do prisma. A teoria ondulatória da luz prevê a existência de uma onda evanescente, cuja intensidade cai rapidamente com a distância  $z$  à superfície externa do prisma. Quando um segundo prisma se aproxima do primeiro, uma parcela da luz incidente será transmitida através de uma barreira de ar de comprimento suficientemente pequeno.

### 6.3.2 - Caso $E > V_0$ .

Nesse caso, a autojunção é oscilatória nas três regiões, mas, com um comprimento de onda  $\lambda_3$  maior no interior da barreira entre  $0 < x < a$ , pois é menor aí a diferença em energia  $E - V_0$ .

Os cálculos das constantes B, C, F e G em termos de A pela aplicação das condições de continuidade em  $x=0$  e  $x=a$ , resulta na seguinte transmitância:

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_2 A^* A} = \left[ 1 + \frac{(e^{ik_3 a} - e^{-ik_3 a})^2}{16 \frac{E}{V_0} \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right]^{-1} = \left[ 1 + \frac{4 \sin^2 k_3 a}{4 \frac{E}{V_0} \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right]^{-1},$$

onde (6.44)

$$k_3 a = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \text{ para } E > V_0. \quad (6.45)$$

Um exemplo prático de barreira de potencial ocorre numa lâmpada de gás monoatômico, onde elétrons interagem com átomos negativamente ionizados.

Esse sistema pode ser idealizado por uma barreira retangular de altura  $V_0 = 10 \text{ eV}$  e largura  $a = 1,8 \times 10^{-10} \text{ m}$ . Nesse exemplo, o termo comum  $2mV_0 a^2 / \hbar^2$  nas eqs. (6.42) e (6.45) será

$$2mV_0 a^2 / \hbar^2 \approx 9$$

A partir disso pode-se traçar gráficos de T e  $R = 1 - T$ , em função de  $E/V_0$ , para os casos  $E < V_0$  e  $E > V_0$ . Esses gráficos são mostrados na Fig. 6.9.

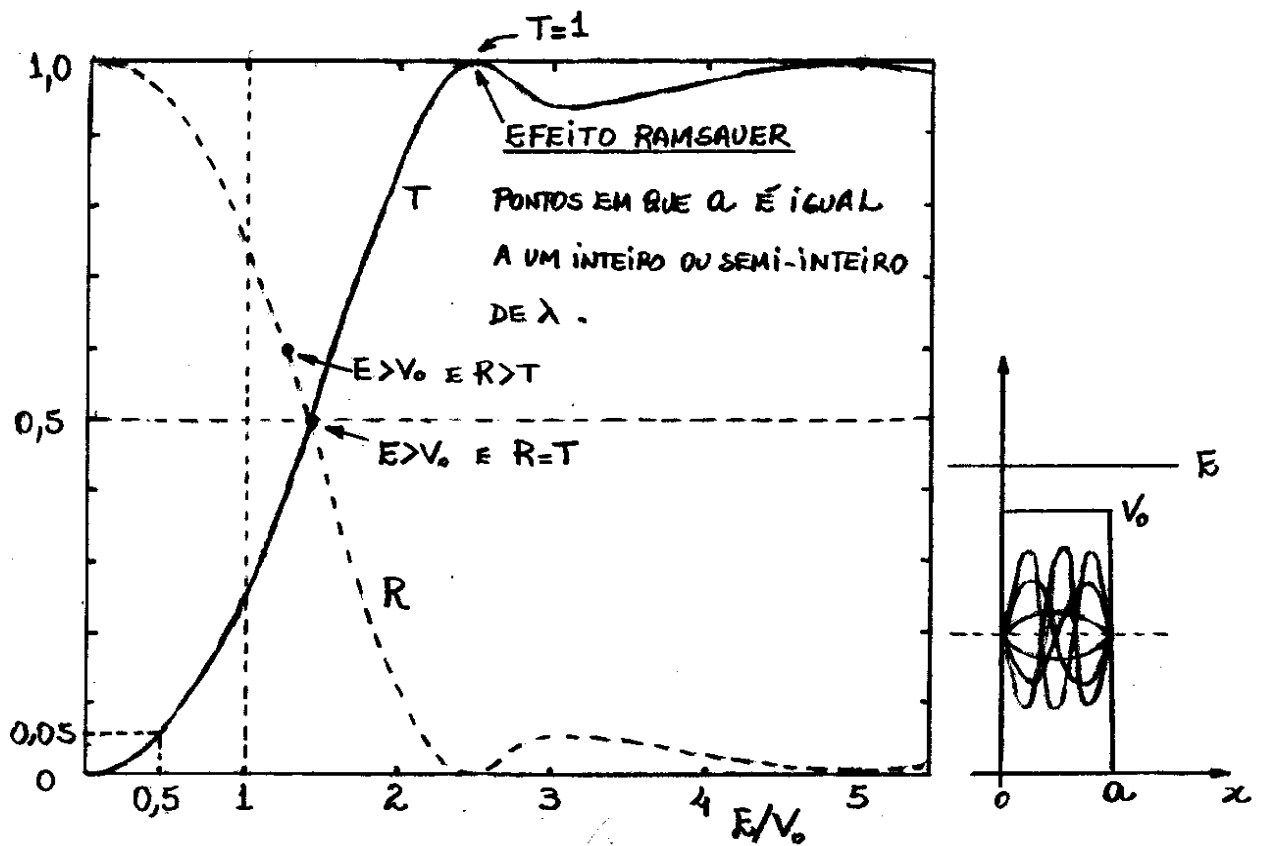


Fig. 6.7 - Comportamento de R e T para um elétron espalhado por um átomo num gás negativamente ionizado.

No gráfico vê-se que  $T \approx 0$ , quando  $E/V_0 \ll 1$ . Mas quando  $E/V_0$  é um pouco maior do que zero, observa-se que T começa a crescer. Por exemplo, quando  $E/V_0 = 0,5$ , ou  $E = V_0/2$ , tem-se  $T \approx 0,05 = 5\%$ . É evidente que os elétrons penetram nessa barreira com facilidade relativa. Por outro lado, quando  $E > V_0$ , é possível ainda que  $R > T$ , isto é, mesmo que  $E > V_0$ , o elétron tem ainda boas chances de ser refletido na barreira de potencial. Finalmente, como se pode concluir da eq. (6.44),  $T = 1$  sempre que  $k_3 a = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$  ou  $2\pi/\lambda_3 a = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$  ou ainda  $a = \frac{1}{2}\lambda_3, \lambda_3, \frac{3}{2}\lambda_3, \dots$ .

Essa é a condição em que a largura  $a$



da barreira é exatamente um número inteiro ou semi-inteiro de comprimentos de onda de de Broglie, como mostrado na Fig. 6.7. Nessas condições os elétrons tem energias  $E = 21 \text{ eV}$ ,  $53 \text{ eV}$ , etc... e passam para a região  $x > a$  como se os íons simplesmente não existissem. Esse efeito ocorre por causa de interferências construtivas entre reflexões em  $x=0$  e  $x=a$  e é denominado de efeito Ramsauer.

#### 6.4 - Poços de Potenciais finito e infinito.

Até agora, considerou-se somente potenciais que não são capazes de confinar partículas em movimento em determinadas regiões do espaço. É nesses casos que a quantização da energia tem um papel importante. Os poços de potenciais finito e infinito são os potenciais mais comuns que apresentam essa propriedade. A Fig. 6.8 mostra o poço de potencial infinito.

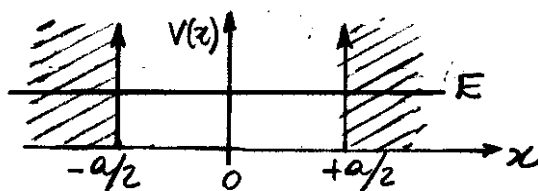


Fig. 6.8 - Representação gráfica de um poço de potencial infinito.

O poço de potencial infinito é descrito matematicamente por

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x \leq -a/2 \text{ ou } x \geq +a/2 \\ 0 & \text{se } -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6.46)$$

No interior do poço de potencial, o potencial é nulo e a partícula em movimento comporta-se como uma partícula livre. Classicamente, a partícula fica confinada no interior do poço de potencial, uma vez que sua energia total  $E$  é sempre menor do que o potencial fora do poço.

As previsões da teoria quântica podem ser obtidas a partir da solução da equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) . \quad (6.47)$$

No interior do poço de potencial  $V(x)=0$  e a solução geral é oscilatória, isto é,

$$\psi(x) = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx} \text{ para } -a/2 < x < +a/2, \quad (6.48)$$

onde

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar .$$

A descrição ondulatória da partícula oscilante no interior do poço, sugere que a autofunção, nesta região, seja uma superposição de duas ondas, de mesma amplitude, que se movem em sentidos opostos.

Por exemplo, assumindo  $A'=B'$  na eq. (6.48), obtém-se

$$\psi(x) = B'(e^{ikx} + e^{-ikx}) = 2B'\cos kx = B\cos kx, \quad (6.49)$$

onde adotou-se  $B = 2B'$ . Esta solução está associada a uma função de onda  $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} = Be^{-iEt/\hbar}\cos kx$ , que tem a forma de onda estacionária, já que é uma função espacialmente localizada de amplitude  $Be^{-iEt/\hbar}$  modulada no tempo.

Por outro lado, assumindo  $B' = -A'$  na mesma equação, obtém-se

$$\psi(x) = A'(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA'\sin kx = A\sin kx, \quad (6.50)$$

onde adotou-se  $A = 2iA'$ . Como as eqs. (6.49) e (6.50), são ambas soluções da equação de Schrödinger independente do tempo para o mesmo valor de  $E$ , então é também solução a soma das duas, isto é,

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx. \quad (6.51)$$

Na verdade, as duas soluções gerais nas eqs. (6.48) e (6.51) são equivalentes, entretanto, a segunda é apropriada para o tratamento do movimento de partículas confinadas, ou ligadas, no interior dos poços de potenciais.

Como o potencial é infinito para  $x \leq -a/2$  e  $x \geq +a/2$ , a equação de Schrödinger na eq. (6.47) só terá sentido nessas regiões se  $\psi(x) = 0$ . Logo, a condição de contorno  $\psi(x = \pm a/2) = 0$ , deve ser satisfeita para que a solução seja fisicamente aceitável. Aplicando essas condições na eq. (6.51), obtém-se

$$A\sin ka/2 + B\cos ka/2 = 0 \text{ para } x = +a/2, \quad (6.52)$$

e

$$-A \operatorname{sen} ka/2 + B \cos ka/2 = 0 \quad \text{para } x = -a/2. \quad (6.53)$$

Somando essas duas últimas equações, obtêm-se

$$2B \cos ka/2 = 0 \quad (6.54)$$

e subtraindo-as, obtêm-se

$$2A \operatorname{sen} ka/2 = 0. \quad (6.55)$$

Quando ambas essas condições forem satisfeitas, tanto  $\psi(x)$  quanto  $d\psi(x)/dx$ , serão finitas e contínuas em todos os pontos do eixo  $x$ .

Não há nenhum valor de  $k$  que faça, simultaneamente,  $\cos(ka/2)$  e  $\operatorname{sen}(ka/2)$  nulos. Também, não é desejável que  $A$  e  $B$  sejam ambos nulos para satisfazer as eqs. (6.54) e (6.55), pois  $\psi(x)$  seria nula e a partícula não estaria no poço. No entanto, é possível que ambas as equações sejam satisfeitas, assumindo uma das seguintes condições:

$$\cos(ka/2) = 0 \quad \text{e} \quad A = 0 \quad (6.56)$$

ou

$$\operatorname{sen}(ka/2) = 0 \quad \text{e} \quad B = 0. \quad (6.57)$$

Assim, existem dois tipos de soluções possíveis:

para o primeiro tipo,

$$\psi(x) = B \cos kx, \text{ onde } \cos ka/2 = 0 \quad (6.58)$$

e para o segundo tipo,

$$\psi(x) = A \sin kx, \text{ onde } \sin ka/2 = 0 \quad (6.59)$$

Os valores possíveis de  $k$  para o primeiro tipo na eq. (58), são  $ka/2 = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \dots$  ou

$$k_n = n\pi/a, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (6.60)$$

Os valores possíveis de  $k$  para o segundo tipo na eq. (6.59), são  $ka/2 = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$ . A condição  $ka/2 = 0$  não é aceitável pois nem  $a$  e nem  $k$  podem ser nulos. No primeiro caso, não existiria o poço de potencial e no segundo caso, não existiria a onda de matéria. Assim, para o segundo tipo,

$$k_n = n\pi/a, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (6.61)$$

Em resumo, as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo para o poço de potencial infinito, são

$$\psi(x) = \begin{cases} B_n \cos k_n x & ; n = 1, 3, 5, \dots \\ A_n \sin k_n x & ; n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (6.62)$$

onde  $k_n = n\pi/a$  para ambas as soluções. Como  $k_n = 2\pi/\lambda_n = n\pi/a$ , o comprimento de onda de de Broglie da partícula no interior do poço de potencial infinito é  $\lambda_n = 2a/n$ , ou

$$a = n \lambda_n / 2, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (6.63)$$

Observa-se que a eq. (6.63) é idêntica à equação usada para calcular os comprimentos de onda  $\lambda_n$  das ondas estacionárias para uma corda vibrante.

O número quântico  $n$  também pode ser utilizado para indexar os autovalores de energia. Utilizando a relação  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , dada na eq. (6.48), e a expressão  $k_n = n\pi/a$ , dada nas eqs. (6.60) e (6.61) obtém-se

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n=1,2,3,4,\dots \quad (6.64)$$

A Fig. 6.9(a) mostra as primeiras autofunções do poço de potencial infinito, de acordo com as eqs. (6.62) e a Fig. 6.9(b) ilustra o poço de potencial, juntamente com alguns dos seus primeiros autovalores de energia, de acordo com a eq. (6.64). Na Fig. 6.9(a) o número de oscilações da autofunção  $\psi_n(x)$ , para cada valor de  $n$ , foi obtida a partir da eq. (6.63).

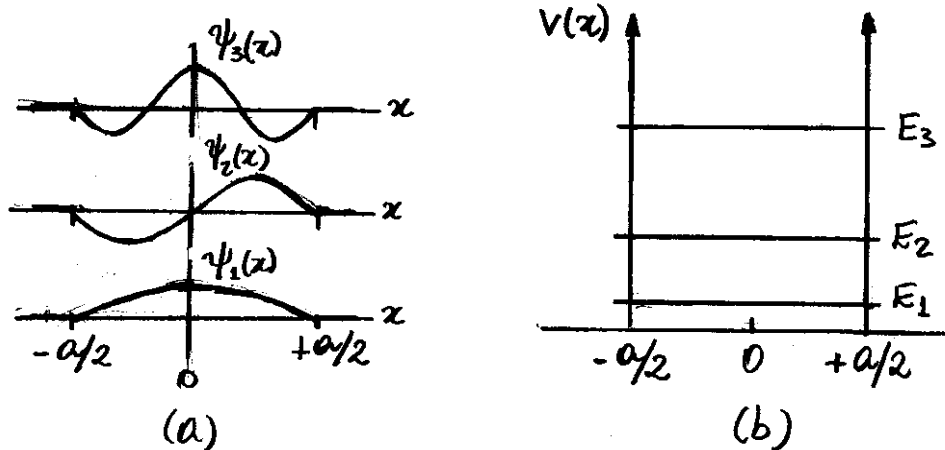


Fig. 6.9 - (a) primeiras autofunções do poço de potencial infinito e (b) primeiras autovalores para o mesmo poço de potencial.

É importante observar que a energia do estado fundamental ( $n=1$ ) para a partícula confinada no poço de potencial infinito é

$$E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2 \neq 0. \quad (6.65)$$

Essa energia mínima diferente de zero, ocorre por causa do princípio da incerteza  $\Delta x \Delta p \sim \hbar/2$ , uma vez que  $\Delta p$  é, conseqüentemente,  $\Delta E$  tem um limite inferior definido por  $\hbar$ . Evidentemente, isso contrasta fortemente com princípios básicos da mecânica clássica que garante que todo movimento cessa, isto é,  $E \equiv 0$ , quando o sistema encontra-se numa temperatura de zero absoluto.

Seja agora o caso do poço de potencial finito, como mostra a Fig. 6.10.

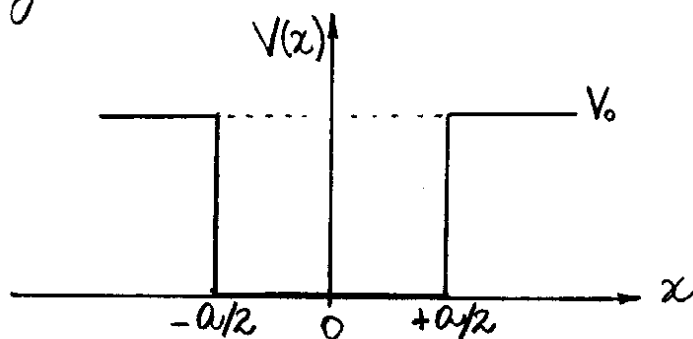


Fig. 6.10. Representação gráfica do poço de potencial finito.

Nesse caso, a descrição matemática do potencial é

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } x \leq -a/2 \text{ ou } x \geq +a/2 \\ 0 & \text{se } -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6.66)$$

Para o caso  $E < V_0$ , a teoria clássica prevê que a partícula fica sempre confinada no interior do poço. Entretanto, similarmente ao poço de potencial infinito, na região entre  $x = -a/2$  e  $x = +a/2$ , a solução da equação de Schrödinger será equivalente a eq. (6.51), isto é,

$$\psi(x) = A \sin k_1 x + B \cos k_1 x, \text{ onde } k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar. \quad (6.67)$$

Por outro lado, para as regiões  $x < -a/2$  e  $x > +a/2$ , as soluções da equação de Schrödinger são

$$\psi(x) = C e^{k_2 x} + D e^{-k_2 x} \text{ para } x \leq -a/2 \quad (6.68)$$

$$\text{e } \psi(x) = F e^{k_2 x} + G e^{-k_2 x} \text{ para } x \geq +a/2, \quad (6.69)$$

onde

$$k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar. \quad (6.70)$$

Pode-se obter autofunções aceitáveis para qualquer  $x$  juntando as soluções atribuídas a cada região. As três formas envolvem seis constantes arbitrárias  $A, B, C, D, F$  e  $G$ .



Para evitar que  $\psi(x) \rightarrow \infty$ , quando  $x \rightarrow -\infty$  na eq. (6.68) e  $x \rightarrow +\infty$  na eq. (6.69), deve-se assumir  $D=0$  e  $F=0$ .

Pode-se ainda, obter 4 equações independentes aplicando a condição de continuidade a  $\psi(x)$  e  $d\psi(x)/dx$ , nas duas fronteiras do poço de potencial.

Deve-se observar que essas 4 equações podem determinar as 4 constantes restantes. Entretanto, isso não deve representar problemas na arbitrariedade da amplitude da autofunção, pois aqui a energia total  $E$  da partícula fará o papel de uma constante adicional. Verifica-se na seqüência, que essa condição resulta na quantização da energia total  $E$  da partícula no interior do poço de potencial finito. Na Fig. 6.11 são mostrados os autofunções de energia e as autovalores correspondentes aos três primeiros estados num poço de potencial finito.

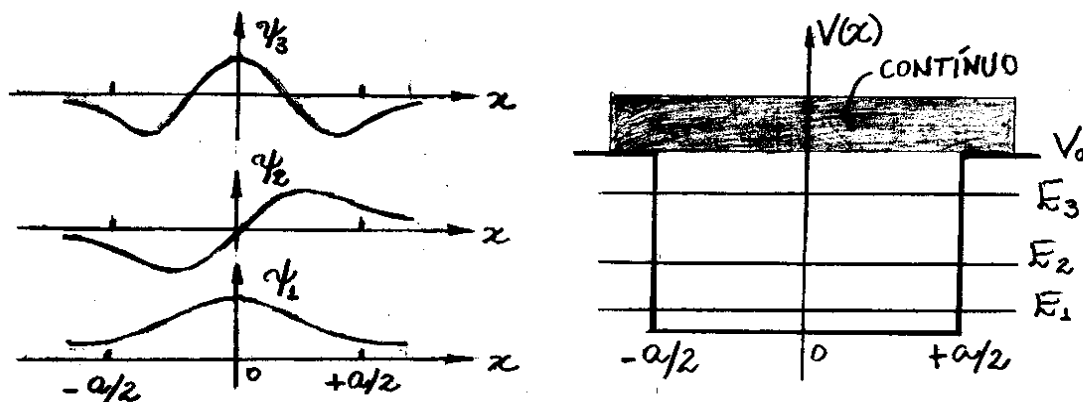


Fig. 6.11 - Autovalores e Autofunções para os três primeiros estados de uma partícula num poço de potencial finito.

Na Fig. 6.11, é mostrado ainda valores contínuos de energia para os casos em que  $E > V_0$ , onde as soluções são oscilatórias e não há restrições para elas.

Os cálculos de todos os autovalores de energia  $E$  permitidos para o poço de potencial finito, não é tão simples como no caso do poço de potencial infinito. Entretanto, o cálculo da energia do estado fundamental ( $n=1$ ), não é tão complicado e é conveniente discutir-lo aqui.

Similarmente ao poço de potencial infinito, na região  $-a/2 < x < +a/2$ , a solução para o estado fundamental ( $n=1$ ), de acordo com a eq. (6.62), deve ser a função de paridade positiva,

$$\psi(x) = B \cos k_1 x \quad \text{para } -a/2 < x < +a/2. \quad (6.71)$$

Como  $F=0$ , a solução para  $x > +a/2$ , na eq. (6.69), é

$$\psi(x) = G e^{-k_2 x} \quad \text{para } x \gg +a/2. \quad (6.72)$$

Aplicando a condição de continuidade para  $\psi(x)$  e  $d\psi(x)/dx$  em  $x = +a/2$ , obtém-se

$$B \cos k_1 a/2 = G e^{-k_2 a/2}$$

$$-k_2 B \sin k_1 a/2 = -k_2 G e^{-k_2 a/2}$$

Dividindo a segunda equação pela primeira, obtém-se

$$k_1 \operatorname{tg} k_1 a/2 = k_2 \quad (6.73)$$

Como  $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$  e  $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ , então

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \operatorname{tg} \frac{a\sqrt{2mE}}{2\hbar} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\sqrt{2mE} \operatorname{tg} \sqrt{\frac{2ma^2 E}{4\hbar^2}} = \sqrt{2mE} \left( \frac{V_0}{E} - 1 \right)$$

$$\cancel{\sqrt{2mE}} \operatorname{tg} \sqrt{\frac{ma^2 E}{2\hbar^2}} = \cancel{\sqrt{2mE}} \sqrt{\left( \frac{V_0 - E}{E} \right)}$$

$$\operatorname{tg} \sqrt{\frac{ma^2 E}{2\hbar^2}} = \sqrt{\left( \frac{V_0 - E}{E} \right)} \quad (6.74) \leftarrow$$

Sabe-se que quando  $V_0 \rightarrow \infty$ , ou o argumento da tangente, tende a  $\pi/2$ , encontra-se a energia  $E_1$  do estado fundamental do poço de potencial infinito, isto é,

$$\sqrt{\frac{ma^2 E_1}{2\hbar^2}} = \frac{\pi}{2} \quad \text{para } V_0 \rightarrow \infty$$

ou

$$E_L = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \text{ para } V_0 \rightarrow \infty, \quad (6.75)$$

que está de acordo com a eq. (6.65) obtida da solução da equação de Schrödinger independente do tempo para o poço de potencial infinito.

Substituindo  $ma^2/2\hbar^2 = \pi^2/4E_L$ , da eq. (6.75), na eq. (6.74), obtém-se

$$\operatorname{tg} \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{E}{E_L}} = \sqrt{\left(\frac{V_0 - E}{E}\right)} \quad (6.76)$$

Essa é uma equação transcendental, isto é, uma identidade de duas funções cujos argumentos constituem a incógnita do problema. Nesse caso, a incógnita é a energia  $E$  do estado fundamental da partícula no poço de potencial finito, e sua determinação só é possível utilizando o método gráfico como mostra a Fig. 6.12.

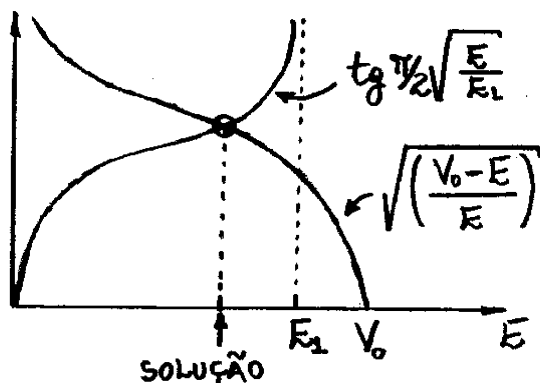


Fig. 6.12 - Solução gráfica para o autovalor de energia do estado fundamental de uma partícula no poço de potencial finito.

A solução é dada pela intersecção entre as duas curvas, mostrando que  $E \leq E_1$ . O limite  $V_0 \rightarrow \infty$ , resulta na solução  $E = E_1$ , correspondente ao estado fundamental de uma partícula no poço de potencial infinito.

## 6.5 - Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico clássico é um dos sistemas mecânicos mais importantes da física. Sua descrição quântica serve de modelo para explicar fenômenos observados em diversos sistemas microscópicos. Um exemplo disso é a interação de dois átomos numa molécula diatômica. A Fig. 6.13 mostra o comportamento da energia potencial  $V(r)$ , que varia com a separação  $r$  entre os dois átomos, simulando propriedades dinâmicas da molécula.

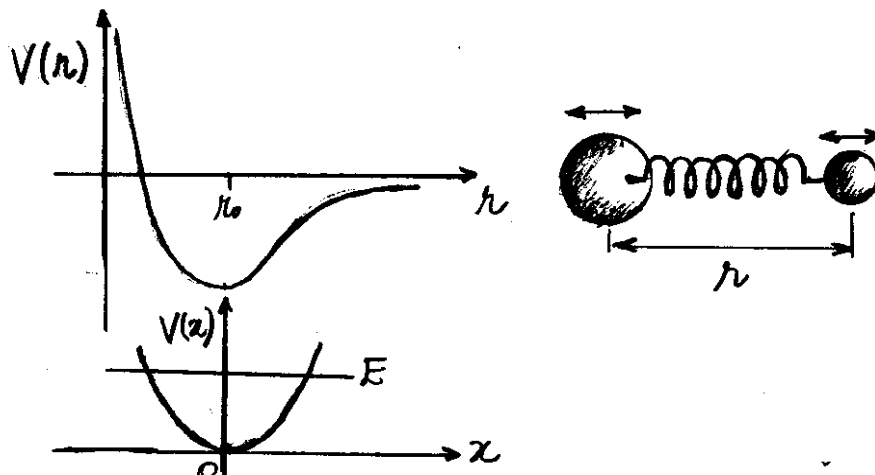


Fig. 6.13 - Modelo de energia potencial para uma molécula diatômica. O potencial de um oscilador harmônico  $V(x)$  como uma aproximação para o caso real.

A função  $V(r)$  tem uma posição de equilíbrio em  $r=r_0$ . Expandindo a função  $V(r)$  em uma série de potências em torno do ponto de equilíbrio  $r=r_0$ , obtém-se

$$V(r) = V(r_0) + \left[ \frac{d}{dr} V(r) \right]_{r=r_0} (r-r_0) + \frac{1}{2} \left[ \frac{d^2}{dr^2} V(r) \right]_{r=r_0} (r-r_0)^2 + \dots$$

Como o ponto de equilíbrio  $r=r_0$  é um ponto de mínimo, então nesse ponto  $dV(r)/dr=0$ . Além disso, admitindo oscilações ocorrendo somente nas vizinhanças de  $r=r_0$ , tal que a diferença  $r-r_0$  seja pequena o suficiente para que se possa desprezar termos de altas ordens em  $r-r_0$ , então

$$V(r) \approx V(r_0) + \frac{1}{2} \left[ \frac{d^2}{dr^2} V(r) \right]_{r=r_0} (r-r_0)^2 \quad (6.77)$$

Quando se adota a mudança de variável  $x=r-r_0$ , a origem  $x=0$  do eixo  $x$ , deve ocorrer no ponto de mínimo  $r=r_0$  do potencial  $V(r)$ . Assim, a função  $V(r)$  é trocada por uma função  $V(x)$  que tem um ponto de mínimo em  $V(x=0) = V(r=r_0) = 0$  como mostra a Fig. 6.13. Com esse procedimento a eq. (6.77), torna-se

$$V(x) \approx \frac{1}{2} k x^2, \quad (6.78)$$

em que

$$k = \left[ \frac{d^2}{dx^2} V(x) \right]_{x=0},$$

Deve-se observar que a eq. (6.78) possui exatamente a forma da energia potencial de um oscilador harmônico simples. Assim, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \psi = E\psi \quad (6.79)$$

deve fornecer a descrição quântica para o oscilador harmônico. Rearranjando os termos da eq. (6.79), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{k}{2} x^2 - E \right) \psi = \frac{mk}{\hbar^2} \left( x^2 - \frac{2E}{k} \right) \psi \\ &= \frac{\sqrt{mk}\sqrt{mk}}{\hbar\hbar} \left( x^2 - \frac{2E}{k} \right) \psi \end{aligned}$$

ou

$$\frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \left( \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x^2 - \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \frac{2E}{k} \right) \psi = \left( \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x^2 - \sqrt{\frac{m}{k}} \frac{2E}{\hbar} \right) \psi$$

ou ainda

$$\frac{1}{\alpha} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \left( \alpha x^2 - \frac{2E}{\hbar\omega_0} \right) \psi, \quad (6.80)$$

onde

$$\alpha = \sqrt{mk}/\hbar \quad (6.81)$$

e

$$\omega_0 = \sqrt{k/m}. \quad (6.82)$$

É conveniente introduzir aqui a mudança de variável

$$\xi = \sqrt{\alpha} x \quad (6.83) \leftarrow$$

e o parâmetro adimensional

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega_0} \quad (6.84) \leftarrow$$

Derivando a variável  $\xi$  e a função  $\psi$ , ambas em relação a  $x$ , obtém-se

$$\frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha} \quad , \quad \frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{d\xi}$$

ou, por essas duas equações,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{d\xi} \left( \frac{d\psi}{dx} \right) \frac{d\xi}{dx} = \frac{d}{d\xi} \left( \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{d\xi} \right) \sqrt{\alpha} = \alpha \frac{d^2\psi}{d\xi^2} \quad (6.85)$$

Substituindo as eqs. (6.85), (6.84) e (6.83) na eq. (6.80), obtém-se

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \lambda) \psi \quad (6.86) \leftarrow$$

A autofunção  $\psi$  é agora uma função da nova variável  $\xi$  e o parâmetro  $\lambda$  assume o papel do autovalor de energia no lugar de  $E$  da equação original.

Para um oscilador harmônico clássico, a energia  $E$  será toda potencial  $V(x)$ , quando a posição  $x$  da partícula for igual a amplitude  $A$ , isto é,

$$E = \frac{1}{2} k A^2$$

ou

$$A^2 = \frac{2E}{k} \quad (6.87)$$



Por outro lado, adotando  $x=A$  na eq. (6.83), obtêm-se a seguinte condição de máximo para a variável  $\xi$ :

$$\xi_{\max} = \sqrt{\alpha} A$$

ou, da eq. (6.81),

$$\xi_{\max}^2 = \alpha A^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} A^2, \quad (6.88)$$

ou ainda, do ponto de vista clássico e de acordo com as eqs. (6.87) e (6.84),

$$\xi_{\max}^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \frac{2E}{k} = \sqrt{\frac{m}{k}} \frac{2E}{\hbar} = \frac{2E}{\hbar \omega_0} = \lambda. \quad (6.89)$$

Essa equação tem um significado especial no problema quântico, por causa da presença do fator  $(\xi^2 - \lambda)$  na eq. (6.86). Observa-se nessa equação que as funções  $d^2\psi/d\xi^2$  e  $\psi$  tem zeros para  $\xi^2 < \lambda = \xi_{\max}^2$  e mesmos zeros para  $\xi^2 > \lambda = \xi_{\max}^2$ . Essas duas condições delimitam, respectivamente, as regiões classicamente permitida e proibida, como mostra a Fig. 6.14.

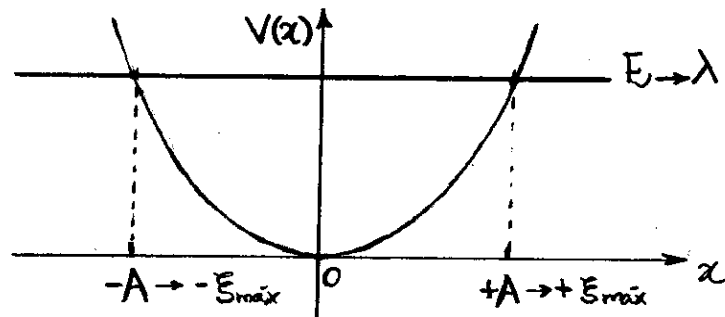


Fig. 6.14 - Regiões classicamente permitida e proibida para a energia  $E$  do oscilador harmônico.

Obviamente, espera-se uma probabilidade pequena de se encontrar a partícula na região classicamente proibida  $\xi^2 > \xi_{\text{máx}}^2$ . Nessas condições, a autofunção  $\psi$  deve se anular para valores grandes de  $\xi^2$  e a solução gaussiana

$$\psi_0(\xi) = B e^{-\xi^2/2}, \quad (6.90)$$

é apropriada para a descrição da função de onda do oscilador harmônico. Como  $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$  ou  $V(\xi) \propto \xi^2$ , a função decrescente deve de fato ser do tipo gaussiana e não simplesmente exponencial decrescente, como ocorrido com potenciais lineares. Derivando a eq. (6.90) uma e duas vezes, obtém-se

$$\frac{d\psi_0}{d\xi} = -B\xi e^{-\xi^2/2},$$

$$\frac{d^2\psi_0}{d\xi^2} = B(\xi^2 e^{-\xi^2/2} - e^{-\xi^2/2}) = (\xi^2 - 1) B e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - 1) \psi_0. \leftarrow$$

Assim, observa-se que a solução na eq. (6.90) satisfaz a eq. (6.86), quando  $\lambda$  assume o valor particular

$$\lambda = \lambda_0 = 1. \quad (6.91)$$

Como  $\lambda = 2E/\hbar\omega_0$ , de acordo com a eq. (6.84), o autovalor de energia associado a essa solução é

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \lambda_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega_0. \quad (6.92)$$

De acordo com as eqs. (6.83) e (6.84), a eq. (6.90) é escrita em termos da variável  $x$ , como

$$\psi_0(x) = B e^{-\alpha x^2/2} = B e^{-\sqrt{mk} x^2/2\hbar} \quad (6.93)$$

e a função de onda associada é

$$\Psi_0(x,t) = \psi_0(x) e^{-iE_0 t/\hbar} = B e^{-\sqrt{mk} x^2/2\hbar} e^{-iE_0 t/\hbar}$$

ou, de acordo com a condição de normalização,

$$\Psi_0(x,t) = \left(\frac{mk}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{1/8} e^{-\sqrt{mk} x^2/2\hbar} e^{-iE_0 t/\hbar}. \quad (6.94)$$

Na sequência, verifica-se que essa solução simples da eq. (6.86), é uma função de onda associada ao menor valor do parâmetro  $\lambda$  ou a menor energia  $E$ , isto é, a função de onda  $\Psi_0(x,t)$  e a energia  $E_0$  se referem ao estado fundamental do oscilador harmônico.

Deve-se esperar que as soluções da eq. (6.86) para estados excitados do oscilador harmônico, também decaiam rapidamente nas regiões classicamente proibidas. Uma solução geral com esse comportamento é

$$\psi(\xi) = H(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (6.95)$$

onde a função  $H(\xi)$  deve estar condicionada a aceitabilidade da autofunção  $\psi(\xi)$ .

A função  $H(\xi)$  pode ser determinada resolvendo a equação diferencial resultante da substituição da eq. (6.95) na eq. (6.86).

Derivando uma e duas vezes a eq. (6.95), obtêm-se

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \frac{dH}{d\xi} e^{-\xi^2/2} - (H\xi)e^{-\xi^2/2}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \frac{d^2H}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} - 2 \frac{dH}{d\xi} \xi e^{-\xi^2/2} - H e^{-\xi^2/2} + H \xi^2 e^{-\xi^2/2}$$

cuja substituição na eq. (6.86), resulta em

$$\left[ \frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\xi^2 - 1)H \right] e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - \lambda) H e^{-\xi^2/2}$$

ou

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \quad (6.96) \leftarrow$$

Observa-se que esta equação é automaticamente satisfeita para o estado fundamental no qual  $H = \text{constante}$ , uma vez que isso resultaria em  $\lambda = 1$ .

As soluções fisicamente aceitáveis da eq. (6.96) estão restritas a formas polinomiais para  $H(\xi)$ , uma vez que, qualquer outro tipo de função não satisfaz a condição de decaimento de  $\psi(\xi)$  nas regiões classicamente proibidas.

Aceitando este fato sem provas, pode-se adotar um inteiro  $n$  para definir a ordem de tais polinômios.

Observa-se que a energia potencial  $V(x)$  do oscilador harmônico é uma função simétrica de  $x$  e assim espera-se encontrar autofunções de paridades definidas, como ocorreu nas soluções do poço de potencial na Eq. 6.4.

Como o fator  $e^{-\xi^2/2}$  na eq. (6.95), é uma função par de  $\xi$ , segue que cada polinômio  $H_n(\xi)$  deve ser uma função par ou ímpar dessa mesma variável, isto é,

$$H_n(\xi) = \begin{cases} \sum_{\text{par } k=0}^n a_k \xi^k, \\ \sum_{\text{ímpar } k=1}^n a_k \xi^k. \end{cases} \quad (6.97)$$

A solução será completada encontrando os coeficientes  $a_k$  dos polinômios  $H_n(\xi)$ , que satisfaçam a eq. (6.96).

Com a finalidade de calcular os valores permitidos do parâmetro  $\lambda = \lambda_n$  na eq. (6.96) e, conseqüentemente, os autovalores de energia  $E = E_n$ , é suficiente examinar os polinômios de paridade par nas eqs. (6.97), isto é,

$$H_n = a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \dots + a_n \xi^n, \text{ onde } a_n \neq 0. \quad (6.98) \leftarrow$$

As derivadas primeira e segunda desta equação, respectivamente, são

$$H'_n = 2a_2 \xi + 4a_4 \xi^3 + \dots + na_n \xi^{n-1}$$

e

$$H''_n = 2a_2 + 12a_4 \xi^2 + \dots + n(n-1)a_n \xi^{n-2},$$

cuja inserção na eq. (6.96), resulta

$$2a_2 + 12a_4 \xi^2 + \dots + n(n-1)a_n \xi^{n-2} - 2\xi[2a_2 \xi + \dots + na_n \xi^{n-1}] \\ + (\lambda_n - 1)[a_0 + a_2 \xi^2 + \dots + a_n \xi^n] = 0$$

ou

$$2a_2 + (\lambda_n - 1)a_0 + [12a_4 - 4a_2 + (\lambda_n - 1)]\xi^2 + \dots \\ + n(n-1)a_n \xi^{n-2} + [-2na_n + (\lambda_n - 1)a_n]\xi^n = 0.$$

Para que a equação acima seja satisfeita, é necessário que todos os coeficientes de cada termo polinomial, sejam nulos. Particularmente, no caso do coeficiente do termo  $\xi^n$ , tem-se

$$-2na_n + (\lambda_n - 1)a_n = 0 \Rightarrow [-2n + (\lambda_n - 1)]a_n = 0. \leftarrow$$

Como  $a_n \neq 0$ , conclui-se que

$$\lambda_n = 2n + 1. \quad (6.99) \leftarrow$$

Esse resultado também pode ser obtido a partir do polinômio de paridade ímpar na eq. (6.97).

Substituindo a eq. (6.99) na eq. (6.96), obtém-se

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \quad (6.100)$$

Esta é uma equação diferencial especial denominada de equação diferencial de Hermite, cuja soluções são polinômios de Hermite. Os primeiros polinômios de Hermite, que satisfazem a eq. (6.100), são

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \dots \dots \end{aligned} \quad (6.101)$$

O número inteiro  $n$ , na eq. (6.99), introduz um número quântico para nivelar os estados estacionários do oscilador harmônico. Substituindo a eq. (6.99) na eq. (6.89),  $\lambda = 2E/\hbar\omega_0$ , obtém-se os autovalores de energia  $E_n$  permitidos para o oscilador harmônico:

$$E_n = \frac{1}{2} \hbar\omega_0 \lambda_n = \frac{1}{2} \hbar\omega_0 (2n+1) = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (6.102)$$

Dessa equação, observa-se que as energias discretas  $\Delta E$  são igualmente espaçadas por

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0 = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = h\nu \quad (6.103)$$

A semelhança com a energia do oscilador quântico, idealizado por Planck para a radiação de corpo negro é notável.

A Fig. 6.15 mostra as primeiras autofunções para o oscilador harmônico, bem como os respectivos autovalores permitidos, de acordo com as eqs. (6.95), (6.101) e (6.102).

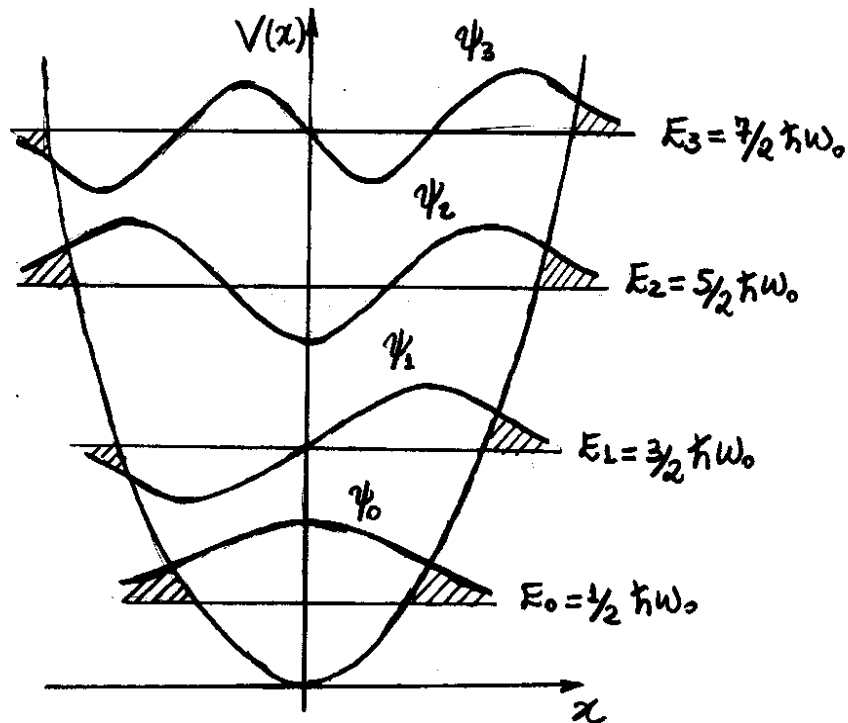


Fig. 6.15 - Alguns estados estacionários permitidos para o oscilador harmônico quântico.

A Figura mostra também como as autofunções "penetram" nas regiões classicamente proibidas e como os nodos de  $\psi_n$  aumentam em número com a energia  $E_n$ . Esse comportamento é uma característica geral de todas as soluções da equação de Schrödinger, associadas a partículas confinadas.



## Lista de Exercícios

### Questões conceituais

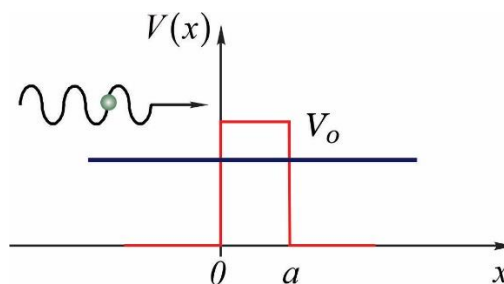
- 1- Por que na mecânica clássica não é possível ter-se  $E < V(x)$ ? Por que isto é possível na mecânica quântica, desde que haja alguma região na qual  $E > V(x)$ ?
- 2- Se duas ondas de mesmas amplitudes se propagam em sentidos contrários obtém-se uma onda estacionária. Que tipo de onda obtém-se se as amplitudes não forem iguais?
- 3- O que você entende exatamente sobre o fluxo de probabilidade?
- 4- O que significa exatamente afirmar que o coeficiente de reflexão é unitário para uma partícula incidindo sobre um potencial degrau com energia total menor do que a altura do degrau? O que significa exatamente afirmar que o coeficiente de reflexão é menor do que a unidade se a energia total for maior que a altura do degrau? O coeficiente de reflexão pode ser maior que a unidade?
- 5- Uma partícula incide sobre uma barreira de potencial, com energia total menor do que a altura da barreira, e é refletida. A reflexão envolve apenas a primeira descontinuidade do potencial? Se a outra descontinuidade fosse retirada, de forma que a barreira se transformasse em um degrau, o coeficiente de reflexão mudaria?
- 6- No sol, dois núcleos de Hidrogênio em movimento térmico violento podem colidir penetrando a barreira coulombiana que os separam. A massa do núcleo resultante é menor do que a soma das massas dos dois núcleos de iniciais, de forma que ocorre grande liberação de energia. Este processo de fusão nuclear é responsável pela emissão de calor pelo sol. Quais seriam as conseqüências para a vida na terra se isso não pudesse ocorrer?
- 7- Por que os poços quadrados finitos têm apenas um número finito de autovalores ligados? Quais são as características dos autovalores não ligados?
- 8- Como seria uma autofunção de onda estacionária para um autovalor não ligado de um poço de potencial quadrado finito?
- 9- Se as autofunções de um potencial têm paridades definidas, a de menor energia tem sempre paridade positiva. Explique por que.

### Problemas

- 1- Para o caso de um degrau de potencial com  $E > V_0$  em que os coeficientes de reflexão e transmissão são

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \text{ e } T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \text{ mostre que } R + T = 1.$$

- 2- Considere uma partícula penetrando em uma **barreira de potencial retangular**, para o caso  $E < V_0$ , como mostrado na Figura abaixo.



(a) Escreva as soluções gerais, apresentadas na seção 6.3.1, que dão a forma de  $\psi$  nas diferentes regiões do potencial. Encontre então quatro relações entre as cinco constantes arbitrárias ajustando  $\psi$  e  $d\psi/dx$  nos limites entre essas regiões. (b) Use estas relações para mostrar que o coeficiente de transmissão  $T$  é dado por

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[ 1 + \frac{(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a})^2}{16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1} = \left[ 1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1},$$

onde

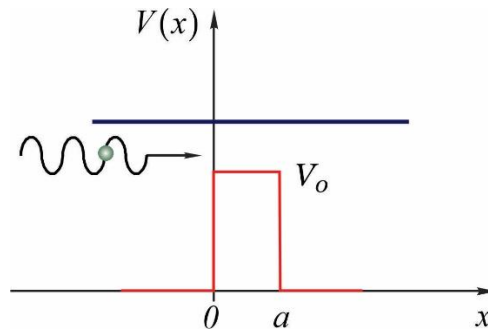
$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ para } x \leq 0 \text{ e } x \geq a \text{ e } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \text{ para } 0 < x < a,$$

verificando assim a Eq. 6.41 da apostila. (Sugestão: Escreva as soluções gerais como:  $\psi = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$  para a região  $x \leq 0$ ;  $\psi = Ce^{ik_1 x} + De^{-ik_1 x}$  para a região  $x \geq a$  e  $\psi = Fe^{-k_2 x} + Ge^{k_2 x}$  para a região  $0 < x < a$ . Explique porque é necessário que a constante  $D$  tenha que ser nulo. Mostre que as condições de continuidade de  $\psi$  e  $d\psi/dx$ , nos limites entre as regiões, resultam nas seguintes relações:

$$G = \frac{1}{2k_2} [A(k_2 + ik_1) + B(k_2 - ik_1)] \text{ e } C = \frac{4i(k_1/k_2)e^{-ik_1 a}}{(1 + ik_1/k_2)^2 e^{-k_2 a} - (1 - ik_1/k_2)^2 e^{k_2 a}} A.$$

A partir da relação entre  $C$  e  $A$ , encontre o valor do coeficiente de transmissão  $T$ , conforme solicitado.)

3- Considere uma partícula penetrando em uma **barreira de potencial retangular**, para o caso  $E > V_0$ , como mostrado na Figura abaixo.



(a) Escreva as soluções gerais, apresentadas na seção 6.3.2, que dão a forma de  $\psi$  nas diferentes regiões do potencial. Encontre então quatro relações entre as cinco constantes arbitrárias ajustando  $\psi$  e  $d\psi/dx$  nos limites entre essas regiões. (b) Use estas relações para mostrar que o coeficiente de transmissão  $T$  é dado por

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[ 1 - \frac{(e^{ik_3 a} - e^{-ik_3 a})^2}{16 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right]^{-1} = \left[ 1 + \frac{\sin^2 k_3 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right]^{-1},$$

onde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ para } x \leq 0 \text{ e } x \geq a \text{ e } k_3 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}, \text{ para } 0 < x < a,$$

verificando assim a Eq. 6.44 da apostila. (Sugestão: Escreva as soluções gerais como:  $\psi = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$  para a região  $x \leq 0$ ;  $\psi = Ce^{ik_3x}$  para a região  $x \geq a$  e  $\psi = Fe^{ik_3x} + Ge^{-ik_3x}$  para a região  $0 < x < a$ . Repita o mesmo procedimento realizado na questão 2, notando que as quatro relações se tornam exatamente as mesmas que foram encontradas na questão 2 quando se substitui  $k_2$  por  $ik_3$ .)

4- Mostre que a expressão  $T = \left[ 1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}$ , para o coeficiente de transmissão para a penetração

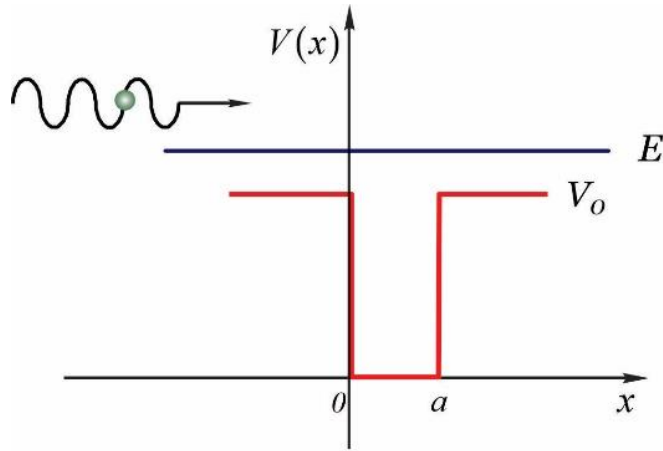
de uma barreira de potencial retangular, se reduz a  $T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2k_2 a}$  se  $k_2 a \gg 1$ .

5- (a) Calcule o coeficiente de transmissão para um elétron de energia total  $E = 2eV$  incidente sobre uma barreira de potencial retangular de altura  $V_0 = 4eV$  e largura  $a = 10^{-10}m$  (dimensão atômica), usando a relação exata e aproximada citadas na questão anterior. (b) Repita os cálculos para uma barreira de largura  $a = 10^{-9}m$ .

6- Um próton e um dêuteron (partícula de mesma carga do próton, mas de massa duas vezes maior) tentam penetrar em uma barreira de potencial retangular de altura  $V_0 = 10MeV$  e largura  $a = 10^{-14}m$  (dimensão nuclear). As duas partículas têm energias totais  $E = 3MeV$ . Use argumentos qualitativos para prevê qual das partículas tem mais chance de consegui-lo.

7- A captura de um próton por um núcleo de carbono, que tem a carga seis vezes maior do que a carga do próton e um raio  $r' \approx 2 \times 10^{-15}m$ , é uma reação de fusão comum na produção de energia solar. (a) Faça uma estimativa do potencial coulombiano eletrostático  $V_0$  que atua sobre o próton se ele estiver na superfície nuclear. (b) O próton incide sobre o núcleo por causa da sua agitação térmica. Podemos supor que a sua energia total  $E \approx 10k_B T_s$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T_s \approx 10^7 K$  é a temperatura interna do Sol. Faça uma estimativa do valor da energia  $E$  em termos do potencial coulombiano  $V_0$ . (c) Calcule o coeficiente de transmissão  $T$  de o próton penetrar em uma barreira de potencial retangular de altura  $V_0$  se estendendo a uma distância  $a = r'$ , ponto no qual a barreira de potencial cai a  $V_0/2$ . (d) A penetração da barreira de potencial coulombiana real é maior ou menor do que a da barreira de potencial retangular da parte (c)? Justifique! Resp.: (a)  $V_0 \approx 4,32MeV$ ; (b)  $E \approx 0,002V_0$ ; (c)  $T \approx 0,0073$ ; (d) maior.

8- Considere uma partícula não ligada se movendo em um **poço de potencial finito retangular**, para o caso  $E > V_0$ , como mostrado na Figura abaixo.



(a) Escreva as soluções gerais que dão a forma de  $\psi$  nas diferentes regiões do potencial,  $x \leq 0$ ,  $0 < x < a$  e  $x \geq a$ . Encontre então quatro relações entre as cinco constantes arbitrárias ajustando  $\psi$  e  $d\psi/dx$  nos limites entre essas regiões. (b) Use estas relações para mostrar que o coeficiente de transmissão  $T$  é dado por

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[ 1 - \frac{(e^{ik_3 a} - e^{-ik_3 a})^2}{16 \frac{E}{V_0} \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right]^{-1} = \left[ 1 + \frac{\text{sen}^2 k_3 a}{4 \frac{E}{V_0} \left( \frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right]^{-1}$$

onde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ para } 0 < x < a \text{ e } k_3 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \text{ para } x \leq 0 \text{ e } x \geq a$$

Isto é, equivalente ao caso da **barreira de potencial retangular**, para o caso  $E > V_0$ . (c) Encontre a condição para a energia total  $E$  da partícula para que o coeficiente de transmissão seja igual a um. (Sugestão: Como na questão 4, escreva as soluções gerais como:  $\psi = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$  para a região  $x \leq 0$ ;  $\psi = Fe^{-ik_3 x} + Ge^{ik_3 x}$  para a região  $0 < x < a$  e  $\psi = Ce^{ik_1 x}$  para a região  $x \geq a$ . Repita o mesmo procedimento utilizado na questão 2, notando que as quatro relações se tornam exatamente as mesmas que foram encontradas na questão 2 quando se substitui  $k_2$  por  $ik_3$ .)

9- Um átomo do gás nobre Kriptônio exerce um potencial atrativo sobre um elétron não ligado, que varia muito bruscamente. Devido a isto, é uma aproximação razoável descrever o potencial como um poço quadrado atrativo, de dimensão da ordem do raio atômico,  $4 \times 10^{-10} m$ . As experiências que um elétron com energia cinética  $E = 0,7 eV$ , nas regiões fora do átomo, pode atravessá-lo sem sofrer reflexão alguma. Esse é o fenômeno do **efeito Ramsauer** para um poço quadrado atrativo. Use essas informações para fazer uma estimativa da profundidade do poço de potencial quadrado. (Sugestão: Use o fato que cabe exatamente um comprimento de onda de de Broglie na largura do poço nas condições do **efeito Ramsauer**.)

10- Sabendo-se que as massas do elétron e do nêutron são respectivamente,  $m_e = 9,1 \times 10^{-31} kg$  e  $m_n = 1,67 \times 10^{-27} kg$ , faça uma estimativa das energias de ponto zero de um elétron e de um nêutron em um poço quadrado infinito de largura igual ao diâmetro nuclear  $a = 10^{-14} m$ , e compare esses resultados.

11- Sabendo-se que as energias permitidas para uma partícula num poço de potencial infinito são  $E_n = n^2 E_0$ , onde  $E_0$  é a energia do estado fundamental, mostre que a diferença fracional em energia entre autovalores adjacentes é  $\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}$ . Use esta relação para discutir o limite clássico do sistema.

12- Aplique a condição de normalização para mostrar que o valor da constante multiplicativa para a autofunção com  $n = 3$  do poço de potencial infinito é  $B_3 = \sqrt{2/a}$ .

13- Use as autofunções  $\psi_1$  e  $\psi_3$  para o poço de potencial infinito para mostra a propriedade de ortogonalidade

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x)\psi_3(x)dx = 0$$

(Sugestão: Use a relação  $\cos u \cos v = \frac{1}{2}[\cos(u+v) + \cos(u-v)]$ ).

14- A constante da força restauradora  $K$  para as vibrações interatômicas de uma molécula diatômica típica é da ordem de  $10^3 J/m^2$ . (a) Use esse valor para fazer uma estimativa da energia de ponto zero das vibrações moleculares. (b) Faça uma estimativa da diferença em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado da molécula vibrante. (c) A partir dessa estimativa, determine a energia do fóton emitido por vibrações da distribuição de carga quando o sistema faz uma transição entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental. (d) Determine o comprimento de onda desta transição e descubra em que região do espectro eletromagnético encontra-se a radiação emitida.