

**Universidade de São Paulo  
Instituto de Física**

# FÍSICA MODERNA I

---

## AULA 27 -

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto  
Pelletron – sala 114  
rizzutto@if.usp.br**

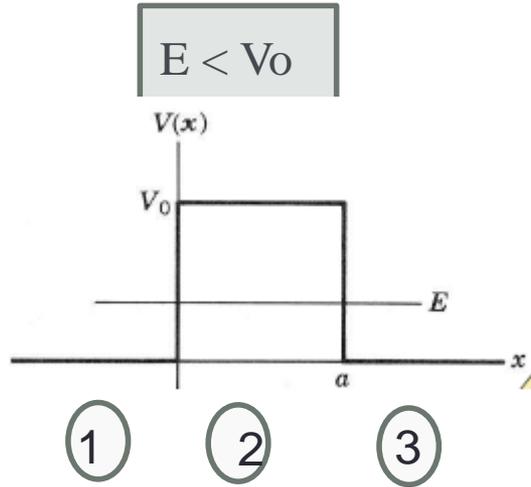
**1o. Semestre de 2014  
Monitor: Gabriel M. de Souza Santos**

Página do curso:

<http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=2905>

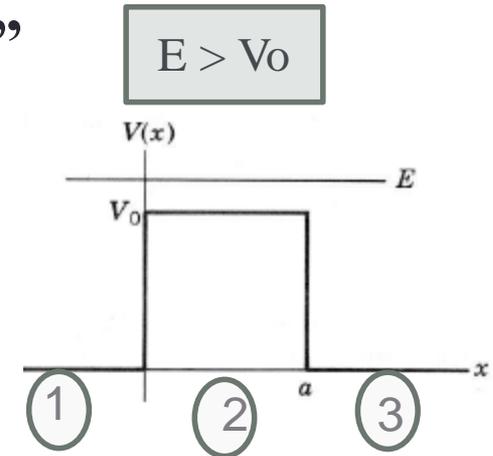
**18/06/2014**

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



“Barreira de Potencia”

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

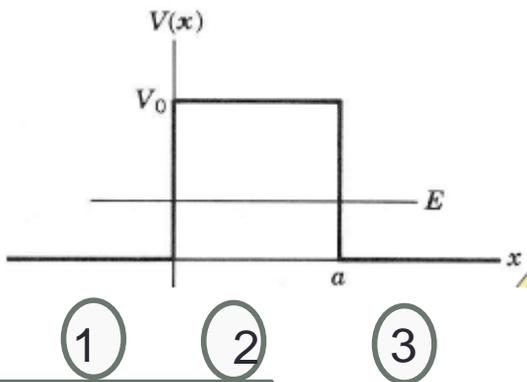


Região 1  $x < 0$

1) Caso  $E < V_0$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Solução da partícula livre}$$



Região 2  $0 < x < a$

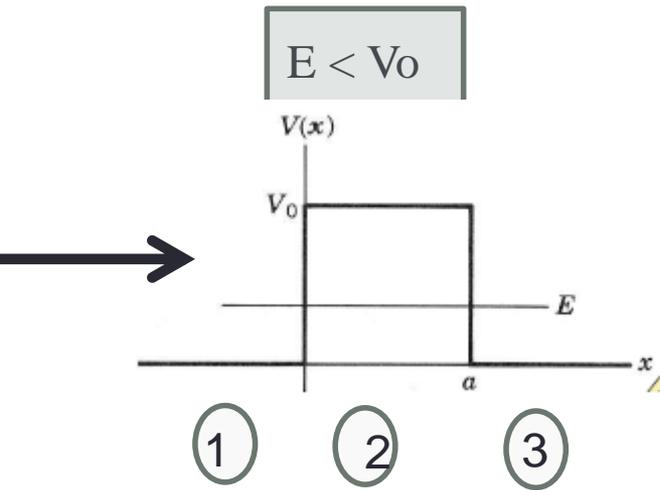
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)\psi(x)$$

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



“Barreira de Potencia”

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

Região 2  $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

Não tem onda vinda da direita  $G = 0$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2  $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

## 2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$\left. \begin{aligned} \psi_{1(x=0)} &= \psi_{2(x=0)} \\ \frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} &= \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} A+B &= C+D \\ ik_1A - ik_1B &= -k_2C + k_2D \\ \frac{ik_1}{k_2}(A-B) &= -C+D \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_{2(x=a)} &= \psi_{3(x=a)} \\ \frac{d}{dx}\psi_{2(x=a)} &= \frac{d}{dx}\psi_{3(x=a)} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} Ce^{-k_2a} + De^{k_2a} &= Fe^{ik_1a} \\ -k_2Ce^{-k_2a} + k_2De^{k_2a} &= ik_1Fe^{ik_1a} \end{aligned}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2  $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

## 2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$A + B = C + D$$

$$ik_1A - ik_1B = -k_2C + k_2D$$

$$\frac{ik_1}{k_2}(A - B) = -C + D$$

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

$$2A = C\left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) + D\left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

$$2B = C\left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) + D\left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2  $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

## 2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$2De^{k_2a} = F\left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right)e^{ik_1a}$$

$$Ce^{-k_2a} + De^{k_2a} = Fe^{ik_1a}$$

$$-k_2Ce^{-k_2a} + k_2De^{k_2a} = ik_1Fe^{ik_1a}$$

$$-Ce^{-k_2a} + De^{k_2a} = \frac{ik_1}{k_2}Fe^{ik_1a}$$

$$D = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{k_2a}}$$

$$C = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{-k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 + k_2)a}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2  $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

**Deixar tudo em função de F**  
que é amplitude da onda  
transmitida

$$D = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

$$C = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{-k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 + k_2)a}$$

$$A = \frac{C}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

$$A = \frac{F}{4} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 + k_2)a} + \frac{F}{4} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Região 2  $0 < x < a$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

**Deixar tudo em função de F**  
que é amplitude da onda transmitida

$$D = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

$$C = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{-k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 + k_2)a}$$

$$B = \frac{C}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) + \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

$$B = \frac{F}{4} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 + k_2)a} + \frac{F}{4} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

$$E < V_0$$

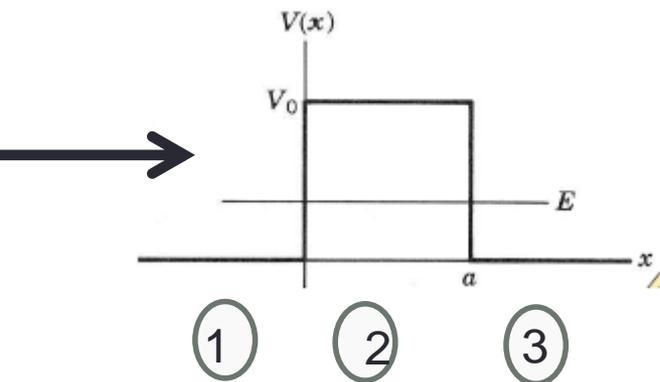
“Barreira de Potencia”

Coeficiente de Transmissão:

$$T = \frac{j_{transmitida}}{j_{incidente}} = \frac{v_{trans} F^* F}{v_{inc} A^* A}$$

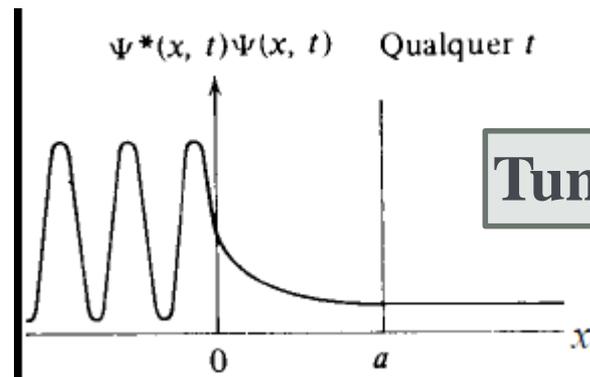
$$v_{inc} = \frac{p_{inc}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$v_{trans} = \frac{p_{trans}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$



$$T = \frac{F^* F}{A^* A} = \left[ 1 + \frac{\text{sen} \hbar k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

Ao chegar a fronteira das regiões 2 e 3 a função de onda volta a apresentar o comportamento senoidal – probabilidade de encontrar a partícula do outro lado da barreira



**Tunelamento**

Na situação em que  $k_2 a \gg 1$

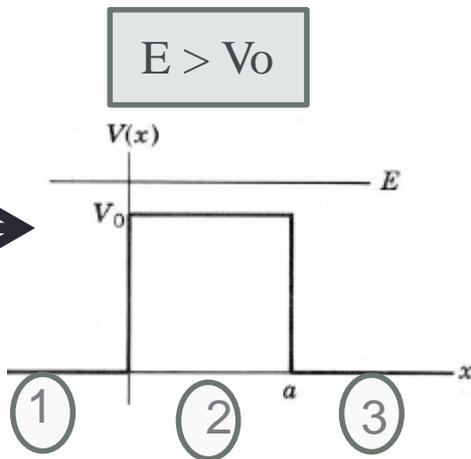
$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_2 a}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Barreira de Potencia”

Coeficiente de Transmissão:

$$T = \frac{C^* C}{A^* A}$$



$$T = \frac{C^* C}{A^* A} = \left[ 1 + \frac{\operatorname{sen}^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left( \frac{E}{V_0} + 1 \right)} \right]^{-1}$$

# Revisão

## Equação de Schrödinger

Conteúdo básico:

- É consistente com de Broglie-Einstein;
- Consistente com  $E = p^2/2m + V$  (portanto não-relativística);
- Linear em  $\Psi$ , de tal forma que, se  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$  são soluções  $\Rightarrow \Rightarrow \Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  também é solução (combinação linear). Interferência é possível.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

# Revisão

## A equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Método da separação de variáveis transforma uma eq. diferencial parcial em um conjunto de eqs. diferenciais ordinárias. Solução deve ser produto de funções:  $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$

Caso o potencial  $V(x,t)$  não dependa do tempo, seja apenas  $V(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

# Revisão

## Valores esperados

Conteúdo básico:

1. Valor médio de uma função de  $x$ :

$$\bar{f}(x) = \langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{f}(x) \psi(x) dx$$

2. Desvio padrão de uma variável:

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \Delta x$$

3. Momento da partícula:  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

4. Energia:  $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

Condição de normalização:  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$

# Revisão

## Propriedades das autofunções

Por representarem propriedades de um sistema físico, as autofunções devem apresentar características que reflitam isso.

Assim:

$\psi(x)$  deve ser finita (1)

$\psi(x)$  deve ser unívoca (2)

$\psi(x)$  deve ser contínua (3)

$d\psi(x)/dx$  deve ser finita (4)

$d\psi(x)/dx$  deve ser unívoca (5)

$d\psi(x)/dx$  deve ser contínua (6)

$P(x)$  finita e unívoca  $\Rightarrow$  (1) & (2)

Valores esperados finitos e unívocos  $\Rightarrow$  (4) & (5)

(4)  $\Rightarrow$  (3)

$V(x)$ ,  $E$  e  $\psi(x)$  finitos  $\Rightarrow d^2\psi/dx^2$  finita  $\Rightarrow$  (6)

# Revisão : Partícula livre

**O potencial nulo:**  $V(x) = 0, \forall x$ .

Partícula livre, pois  $F(x) = -dV(x)/dx = 0$ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x); \text{ e } \Psi(x,t) = \psi(x)e^{\frac{iE}{\hbar}t}$$

válido para qualquer valor de  $E \geq 0$ .

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x)$$

$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$  deve ser a solução geral

Momento da partícula:

$$\bar{p} = \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx$$

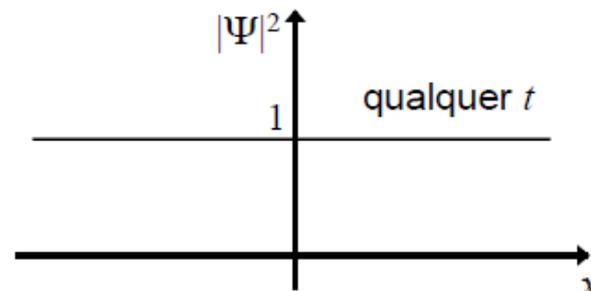
$$\text{Mas } -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar ik\psi(x) = \hbar k\psi(x) = +\sqrt{2mE}\psi(x)$$

$$\text{Portanto, } \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \sqrt{2mE} \psi(x) dx = \sqrt{2mE} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = \sqrt{2mE}$$

No outro caso,  $\Psi(x,t) = e^{-i(kx+\omega t)}$ , teremos:  $\langle p \rangle = -\sqrt{2mE}$

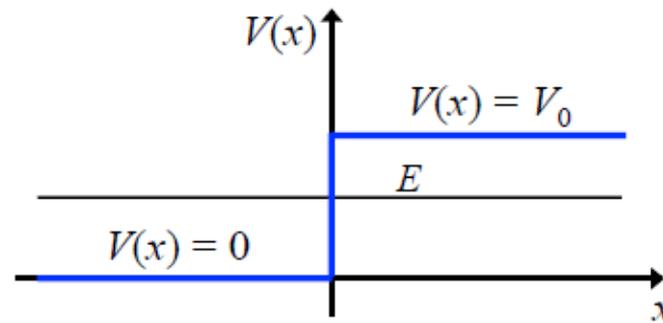
$$\text{Posição da partícula: } \Psi^* \Psi = A^* e^{-i(kx-\omega t)} Ae^{i(kx-\omega t)} = A^* A$$

Nesse caso,  $\Delta x = \infty$ . Mas  $\Delta p = 0$ .



## O potencial degrau I – $E < V_0$

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se } x > 0 \\ 0, & \text{se } x \leq 0 \end{cases}$$



$$x < 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi; \quad x > 0: -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

Região  $x \leq 0$ : solução para a partícula livre:  $\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

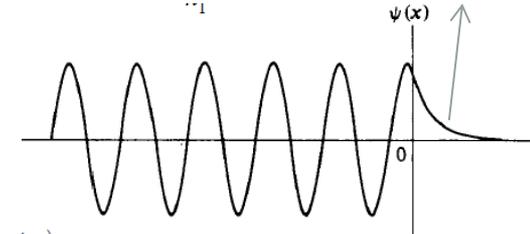
$$\text{com: } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Penetração da  
barreira

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

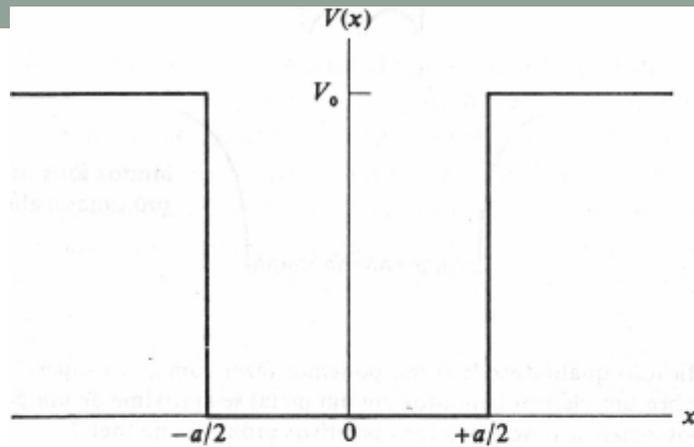
Solução geral, para  $x > 0$ :  $\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$

Determinar as constantes  $A, B, C$  e  $D$ , que satisfaçam os requisitos para  $\psi$  e  $d\psi/dx$ : finitas, unívocas e contínuas.



$$\psi(x) \text{ finita } \forall x \Rightarrow C = 0.$$

$$\text{Continuidade no ponto } x = 0 \quad \psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left( 1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} + \frac{D}{2} \left( 1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x}, & x \leq 0 \\ De^{-k_2x}, & x \geq 0 \end{cases}$$



## Poços de potencial: $E < V_0$

Dentro,  $-a/2 < x < a/2$ :

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\text{com: } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar}$$

Ondas com a mesma amplitude nos 2 sentidos.

$$A = B \Rightarrow \psi(x) = B' \cos k_1x \Rightarrow \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

A autofunção terá nós fixos nos pontos onde  $\cos k_1x = 0$ .

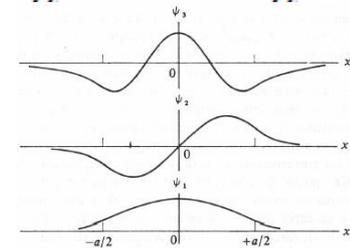
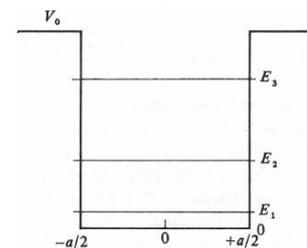
$$A = -B \Rightarrow \psi(x) = A' \sin k_1x \Rightarrow \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

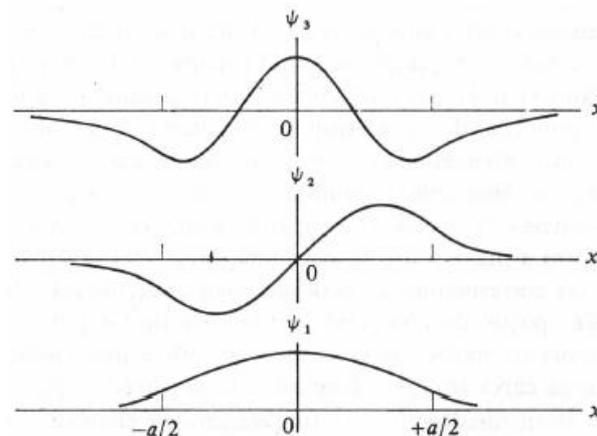
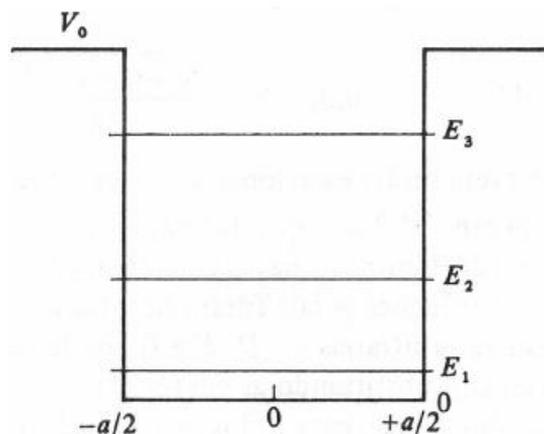
Se ambas são soluções  $\Rightarrow$  solução geral será uma combinação linear:  $\psi(x) = A' \sin k_1x + B' \cos k_1x$

Regiões fora do poço:

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{para } x < -a/2. \quad \text{Com: } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar}$$

$$\psi(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x} \quad \text{para } x > a/2$$





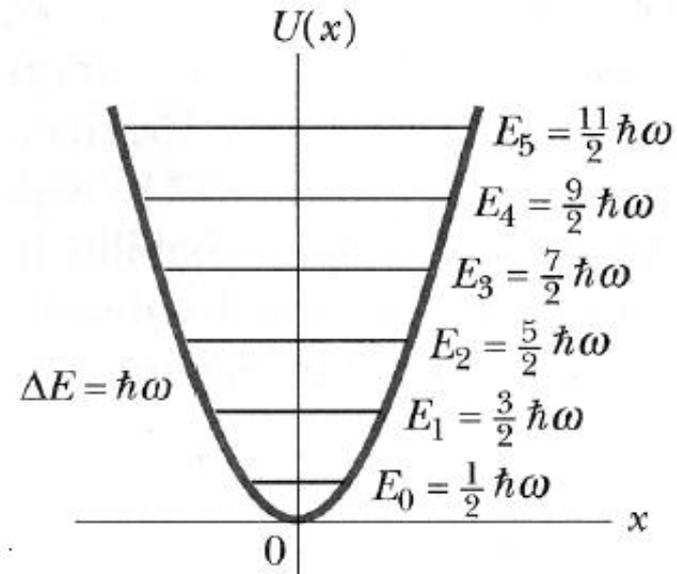
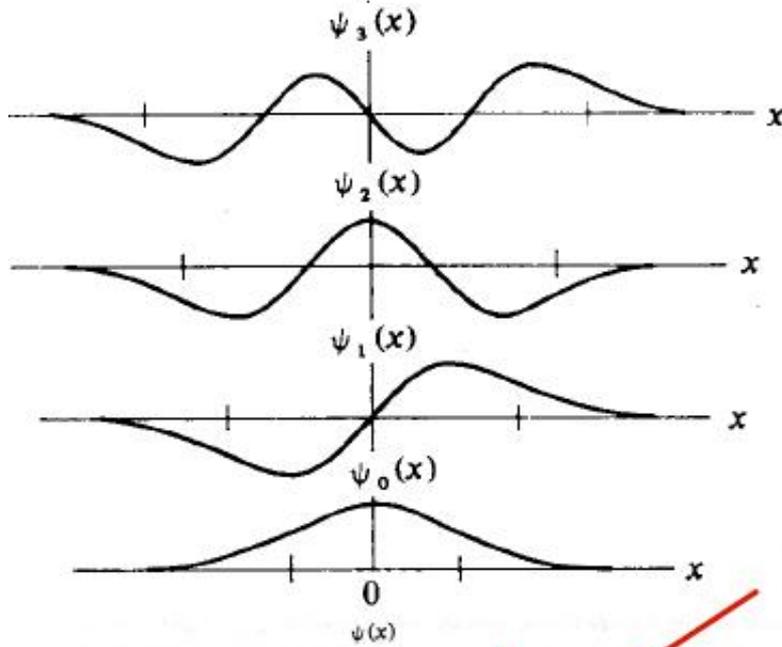
5) Normalização: neste caso, o limite de integração reduz-se ao intervalo  $[-a/2, a/2]$ , única região em que as funções de onda são não nulas.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n|^2 dx = \int_{-a/2}^{a/2} \frac{2}{a} \cos^2 \frac{n\pi x}{a} dx =$$

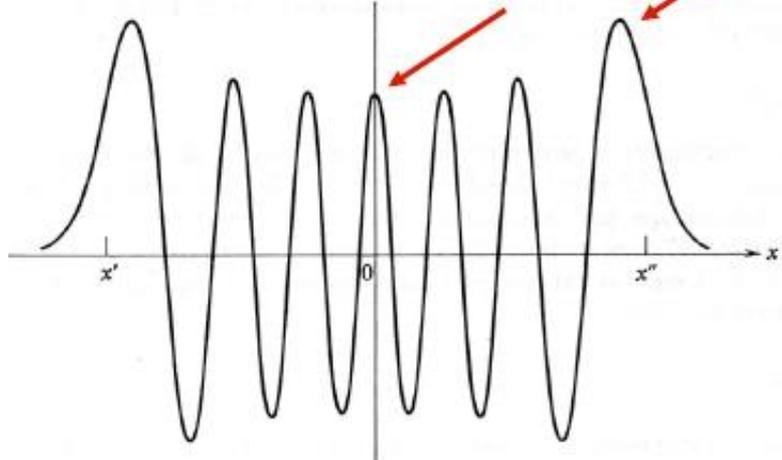
$$= \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{2} \left( 1 + \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx = \frac{1}{a} \left( x + \frac{a}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a} \right) \Big|_{-a/2}^{a/2} = 1$$

# Revisão

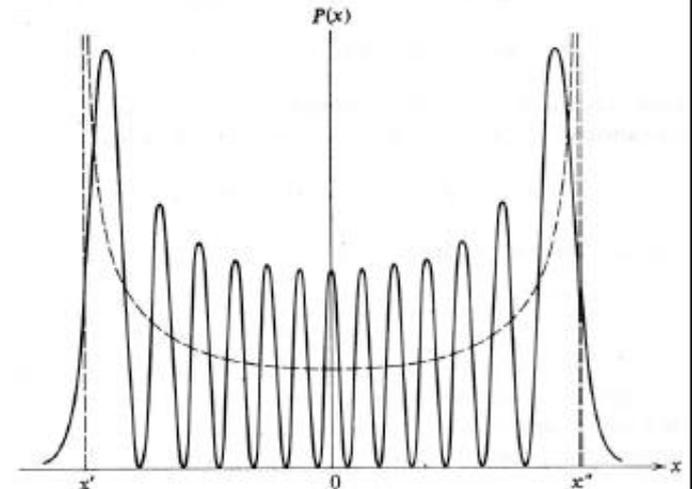
Voltando ao oscilador harmônico



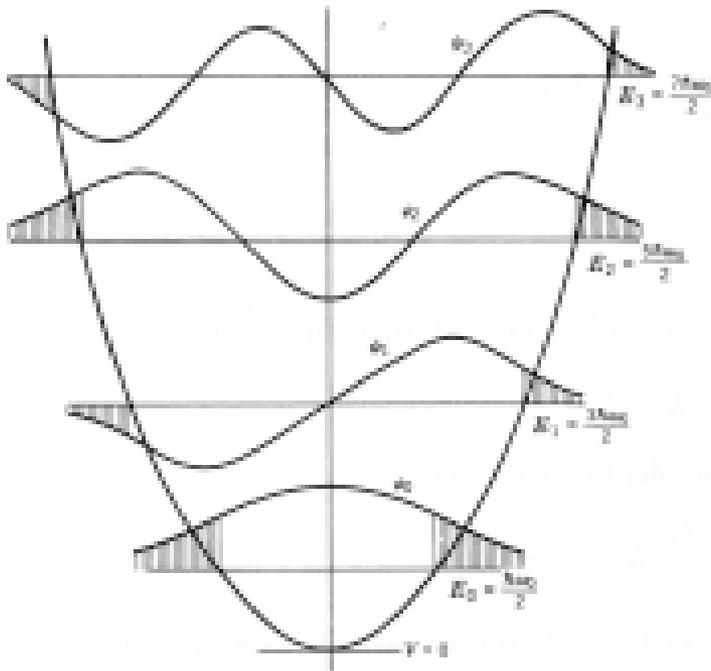
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi$$



$$\xrightarrow{|\psi|^2}$$



# Revisão



$$E_n = (n + 1/2) h \nu \quad n=0,1,2,3,\dots$$

Podemos escrever a solução da função de onda como:

$$\psi_n(x) = H_n[u(x)] e^{-\frac{u(x)^2}{2}}$$

$$u(x) = \left[ \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} \right] x$$

Onde  $H_n$  são polinômios de ordem  $n$ , com  $n \geq 0$

As funções  $H_n$  são relacionadas aos polinômios de Hermite que são tabelados tabulado

$$H_0[u(x)] = 1$$

$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$

$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$

$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$

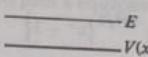
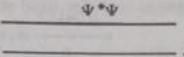
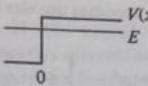
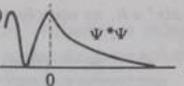
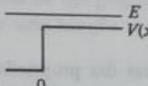
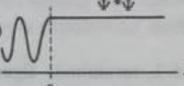
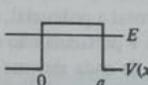
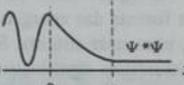
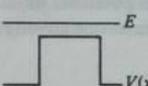
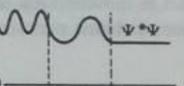
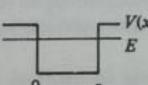
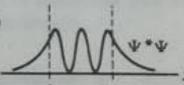
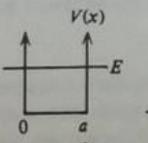
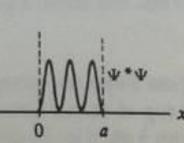
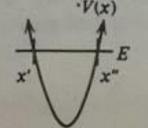
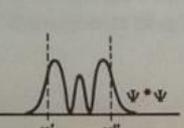
$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_1 = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_2 = A_2 (1 - 2u^2) e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_3 = A_3 (3u - 2u^3) e^{-\frac{u^2}{2}}$$

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

Nome do Sistema	Exemplo Físico	Energias Total e Potencial	Densidade de Probabilidade	Característica Significativa
Potencial nulo	Próton em um feixe de um cíclotron			Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal			Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo			Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula $\alpha$ tentando escapar de barreira coulombiana			Efeito túnel
Barreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados			Nenhuma reflexão em certas energias
Poço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo			Quantização da energia
Poço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa			Aproximação para um poço de potencial finito
Potencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando			Energia de ponto zero

## Equação de Schrödinger em três dimensões

Até o momento com consideramos apenas uma dimensão (x)

Na realidade para o sistema físico temos 3 dimensões

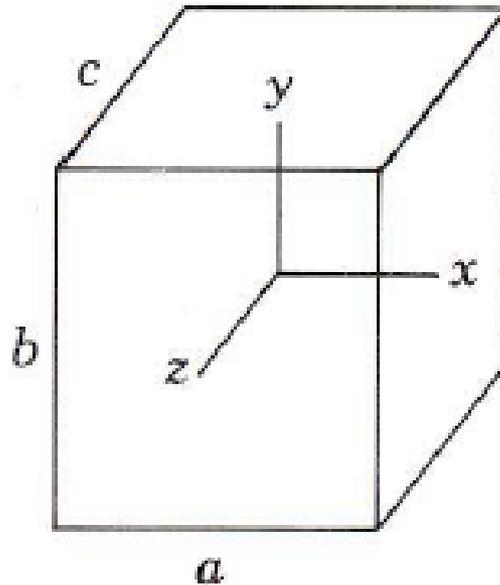
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Podemos fazer separação de variáveis:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

## Partícula em uma caixa retangular



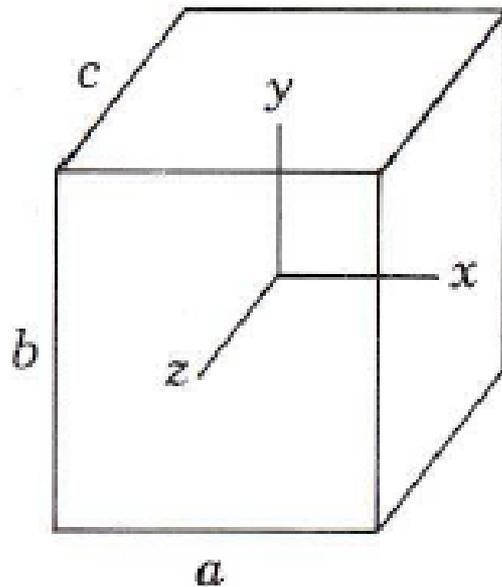
- Vamos considerar uma partícula livre “presa” em uma caixa retangular
- Este problema é equivalente ao poço infinito, porém em três dimensões

$$\psi_n(x) = A \cos\left(\frac{n\pi}{a} x\right), A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$n=1,3,5\dots$$

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \sqrt{2/b} \sqrt{2/c} \cdot \cos\left(\frac{n_1\pi}{a} x\right) \cdot \cos\left(\frac{n_2\pi}{b} y\right) \cdot \cos\left(\frac{n_3\pi}{c} z\right)$$

## Partícula em uma caixa retangular



- Vamos considerar uma partícula livre “presa” em uma caixa retangular
- Este problema é equivalente ao poço infinito, porém em três dimensões

$$\psi_n(x) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a}x\right), A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$n=2,4,6,\dots$$

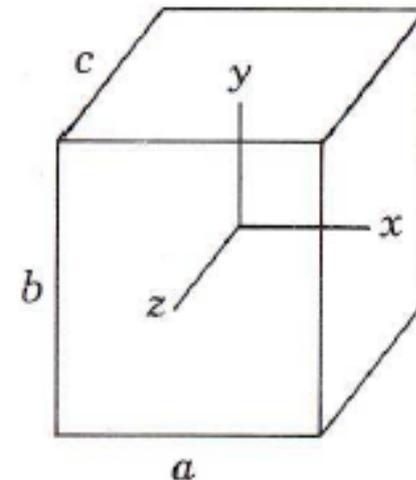
$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \sqrt{2/b} \sqrt{2/c} \cdot \operatorname{sen}\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \cdot \operatorname{sen}\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right) \cdot \operatorname{sen}\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right)$$

# Partícula em uma caixa retangular

Temos a quantização de energia

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} n^2$$

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3}$$



———— 222

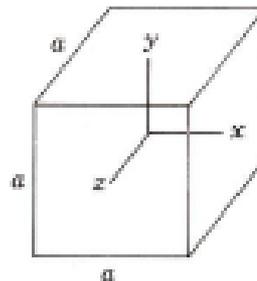
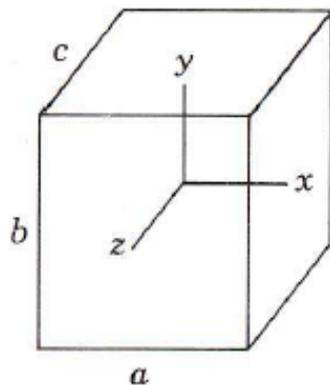
———— 212  
 ———— 122  
 ———— 221

———— 112  
 ———— 211  
 ———— 121

———— 111

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

# Partícula em uma caixa retangular



Porém, se os lados do retângulo forem iguais, isto é, existir uma **simetria** no problema, diferentes combinações de números quânticos  $(n_1, n_2, n_3)$  podem levar ao mesmo valor de energia

———— 222

———— 212

———— 122

———— 221

———— 112

———— 211

———— 121

———— 111

———— 222

———— 221, 212, 122

———— 211, 121, 112

———— 111

**Degenerescência esta ligada a simetria do problema**