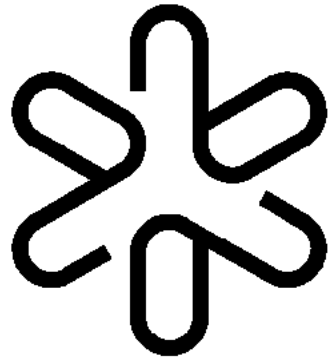




**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

FÍSICA MODERNA I

AULA 17

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 220
rizzutto@if.usp.br**

2o. Semestre de 2017

Página do curso:

<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=53869>

09/10/2017

OPERADORES – OBSERVÁVEIS RESUMIDAMENTE

1- no caso da posição o operador é o próprio valor da posição:

$$\hat{x} \Leftrightarrow x$$

2 - no caso do momento, operador é dado por:

$$\hat{p} \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

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

3 - no caso da energia, operador é dado por:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

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

Equação de Schrödinger

Diferença importante entre a equação de Schrödinger e a equação da onda clássica está no fato de um número imaginário $i = \sqrt{-1}$ aparecer explicitamente na Eq. de Schrödinger.

As funções de onda que satisfazem a Ed. de Schrödinger não são necessariamente reais, como vimos no caso da função de onda da partícula livre



Isto significa que a função de onda $\Psi(x, t)$ que satisfaz a equação de Schrödinger não é uma função diretamente mensurável como a função de onda clássica, já que os resultados de medições são necessariamente número reais. Entretanto estamos interessados em obter as probabilidade (por exemplo: encontrarmos o elétron em uma posição). E esta interpretação probabilística da função de onda foi proposta por Max Born e reconhecida, apesar dos protestos de Einstein e Schrödinger.

Equação de Schrödinger independente do tempo

Geralmente estudaremos os casos que correspondem a situações de onda estacionária:

átomo de hidrogênio,

Partículas em uma caixa

Oscilador harmônico

Nestes casos o potencial V não depende explicitamente do tempo

$V(x,t)=V(x)$ – Utilizaremos neste caso a ideia de **separação de variáveis**:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot \phi(t)$$

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

As derivadas agora são ordinárias e não mais parciais

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cancel{\phi(t)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \cancel{\psi(x)} \cancel{\phi(t)} = i\hbar \cancel{\psi(x)} \frac{d\phi(t)}{dt} \quad \times \frac{1}{\psi(x) \cdot \phi(t)}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cancel{\phi(t)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \cancel{\psi(x)} \cancel{\phi(t)} = i\hbar \cancel{\psi(x)} \frac{d\phi(t)}{dt} \quad \times \frac{1}{\psi(x) \cdot \phi(t)}$$

Só depende de x

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \right) = i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt}$$

Só depende de t

São iguais uma constante C (constante de separação)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) = C$$

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = C$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{C}{i\hbar} \phi(t) = -\frac{iC}{\hbar} \phi(t)$$

$$\phi(t) = e^{-\frac{iCt}{\hbar}}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Temos:

$$\phi(t) = e^{-\frac{iCt}{\hbar}}$$

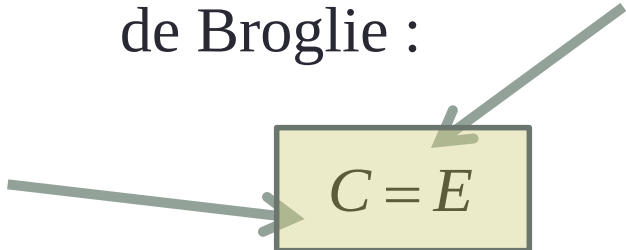
$$\phi(t) = \cos\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) - i \sin\left(\frac{Ct}{\hbar}\right)$$

$$\phi(t) = \cos\left(2\pi \frac{Ct}{h}\right) - i \sin\left(2\pi \frac{Ct}{h}\right)$$

Temos uma função oscilatória de frequência $f=C/h$, mas segundo

$E = h\nu$ de Broglie :

$$\nu = \frac{E}{h}$$



$$C = E$$

$$\phi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) = C$$

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

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = C$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Equação de Schrödinger independente do tempo

A densidade de probabilidade neste caso :

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$P(x, t)dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx$$

$$P(x, t)dx = \psi^*(x)e^{+\frac{i}{\hbar}Et} \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} dx$$

$$P(x, t)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$$

Ou seja não depende do tempo. Essas soluções são chamadas de estados estacionários

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Para ter sentido físico, devemos impor algumas condições

- As funções de onda e sua primeira derivada, para serem soluções aceitáveis precisam:
 - **Ser finita (não podemos aceitar que $\psi(x) = \infty; x \rightarrow 0$ partícula tem que ter movimento em uma região do espaço)**
 - **Ser unívoca (a função de onda não pode ter múltiplos valores)**
 - **Se contínua (pois se temos funções descontínuas as derivadas serão infinitas nos pontos de descontinuidade)**
- Essas condições são necessárias para que as funções de onda representem os observáveis de maneira adequada

Agora vamos ver alguns casos e aplicações

Partícula sujeita a $V(x) = V_0$

Postular a equação de Schrödinger para uma partícula de massa m livre
 $V(x,t) = V_0$

Primeiro podemos pensar em uma função de onda do tipo $\cos(kx - \omega t)$, no entanto esta não satisfaz a solução da Eq. De Schrödinger (primeira derivada é seno e segunda derivada é cosseno). O mesmo acontece para uma função de onda do tipo $\sin(kx - \omega t)$. Entretanto a combinação linear destas soluções é uma forma exponencial da função harmônica que satisfaz a equação de Schrödinger

$$p = \frac{h}{\lambda}, v = \frac{E}{h}$$

$$\Psi(x, t) = A \left[\underbrace{\cos(kx - \omega t)}_{\text{real}} + i \underbrace{\sin(kx - \omega t)}_{\text{imaginária}} \right]$$

Usando a fórmula de Euler

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta$$

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} = A e^{ikx} e^{-i\omega t}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = Ae^{ikx} e^{-i\omega t}$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -i\omega Ae^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \Psi(x, t)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = (ik)^2 Ae^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \Psi(x, t)$$

Substituindo na equação de Schrödinger e fazendo $V(x, t) = V_0$ temos:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-k^2 \Psi) + V_0 \Psi = i\hbar (-i\omega) \Psi$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi + V_0 \Psi = \hbar \omega \Psi$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} \right) + V_0 = E$$

Energia total da partícula se conserva

Diagram showing the derivation of energy conservation:

- $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \hbar k$ (points to $\hbar^2 k^2$)
- $\frac{p^2}{2m} = E_c$ (points to $\frac{p^2}{2m}$)
- $E = \hbar \omega$ (points to $\hbar \omega \Psi$)

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Estudar a partícula livre que não age nenhuma força é aplicada

$$V(x,t) = 0$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Vemos que a função de onda realmente apresenta um estado estacionário com energia

$$E = \hbar\omega$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) &= E\psi(x) & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2(Ae^{ikx})}{dx^2} + 0(Ae^{ikx}) &= E\psi(x) \\
 & & -\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2 Ae^{ikx} &= E\psi(x) \\
 p = \frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \hbar k & & & \\
 \frac{p^2}{2m} = E & \longleftarrow & = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} Ae^{ikx} = \frac{p^2}{2m} \psi(x) = E\psi(x) &
 \end{aligned}$$

Equação de Schrödinger

Assim para a partícula livre, não há restrições sobre o valor de p e, assim não há restrições para o valor de energia

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Se $V(x)$ não for constante, então as soluções de uma equação de Schrödinger são possíveis apenas para certos valores de E . Esses valores representam os níveis de energia permitidos descritos por $V(x)$



Esta descoberta é muito importante pois antes deste desenvolvimento não havia forma de prever os níveis de energia a partir de qualquer teoria fundamental, a não ser pelo método de Bohr, cuja eficiência era bastante limitada.

A dependência da função de onda com o tempo é essencial para estudar os detalhes das transições entre estados, a emissão e absorção de fótons e a vida média dos estados.

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Vimos que a função de onda da partícula livre apresenta um momento linear bem definido o que segundo o princípio de incerteza, não temos a menor ideia onde a partícula está.

$$P(x,t)dx = |\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

$$(A^* e^{-ikx} e^{i\omega t}).(A e^{ikx} e^{-i\omega t}) = A^* A e^0 = |A|^2$$

A função densidade de probabilidade não depende do tempo (estado estacionário de energia bem definida), e ela também não depende da posição, o que indica que a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer lugar no espaço é igual.

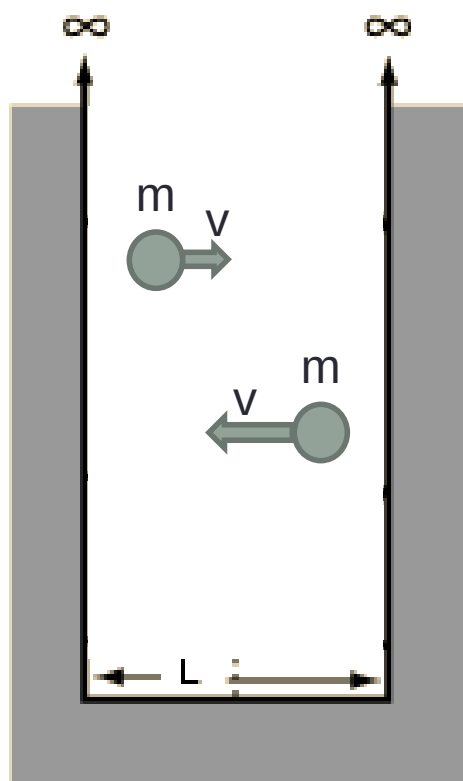
Logo para a partícula
livre temos:

$$\psi(x) = A e^{ikx}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Função de onda de uma partícula em uma caixa



Uma partícula de massa m desloca-se nesse sistema
Condições para a função de onda:

- Dentro da caixa $V(x) = 0$, fora $V(x)=\text{infinito}$
- Como a partícula está confinada dentro da caixa $0 \leq x \leq L$ esperamos que a $\psi(x) = 0$ fora da caixa
- Estão de acordo com a Eq. de Schroedinger que diz que a função deve ser **finita** dentro da caixa e a função deve ser zero quando $V(x)$ é infinito.
- A função de onda deve ser **contínua** para ser uma solução matemática da Eq. De Schrodinger. Então $\psi(x) = 0$ nas fronteiras das regiões $x=0$ e $x=L$

- Finalmente a derivada da função de onda deve ser também contínua – somente teremos nós nas paredes dada a descontinuidade da primeira derivada.

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Partícula dentro da caixa $0 \leq x \leq L$

Dentro da caixa $V(x) = 0$, fora $V(x) = \text{infinito}$

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

A equação de onda que satisfaz esta a eq. De Schrödinger poderia ser:

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

- 1) É contínua e possui derivada primeira contínua $\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx}$
- 2) **Problema:** essa função de onda não satisfaz as condições de contorno em que a função deve ser zero em $x=0$ e $x=L$

$$x = 0 \Rightarrow \psi(0) = Ae^0 = A$$

$$x = L \Rightarrow \psi(L) = Ae^{ikL}$$

Só será zero se $A=0$, aí a função de onda seria zero e não existiria nenhuma partícula

Para sair disto precisamos lembrar que para um estado estacionário podemos ter uma superposição de ondas :

$$\psi(x) = A_1e^{ikx} + A_2e^{-ikx}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Partícula dentro da caixa $0 \leq x \leq L$ $\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$

$$\psi(x) = A_1 [\cos(kx + i \operatorname{sen} kx)] + A_2 [\cos(-kx) + i \operatorname{sen}(-kx)]$$

$$\psi(x) = A_1 [\cos(kx + i \operatorname{sen} kx)] + A_2 [\cos(kx) - i \operatorname{sen}(kx)]$$

$$\psi(x) = (A_1 + A_2) \cos kx + i(A_1 - A_2) \operatorname{sen} kx$$

$$x = 0 \Rightarrow \psi(0) = A_1 + A_2 = 0$$

$$A_1 = -A_2$$

$$\psi(x) = 2iA_1 \operatorname{sen} kx = C \operatorname{sen} kx$$

$$\psi(0) = 0$$

$$x = L \quad kL = n\pi$$

A função de onda de estados estacionários para a partícula dentro da caixa

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{n}, n = 1, 2, 3, \dots$$

Os níveis de energia:

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em uma caixa $V(x) = 0$ (poço infinito)”

Exemplo seria uma molécula

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

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

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

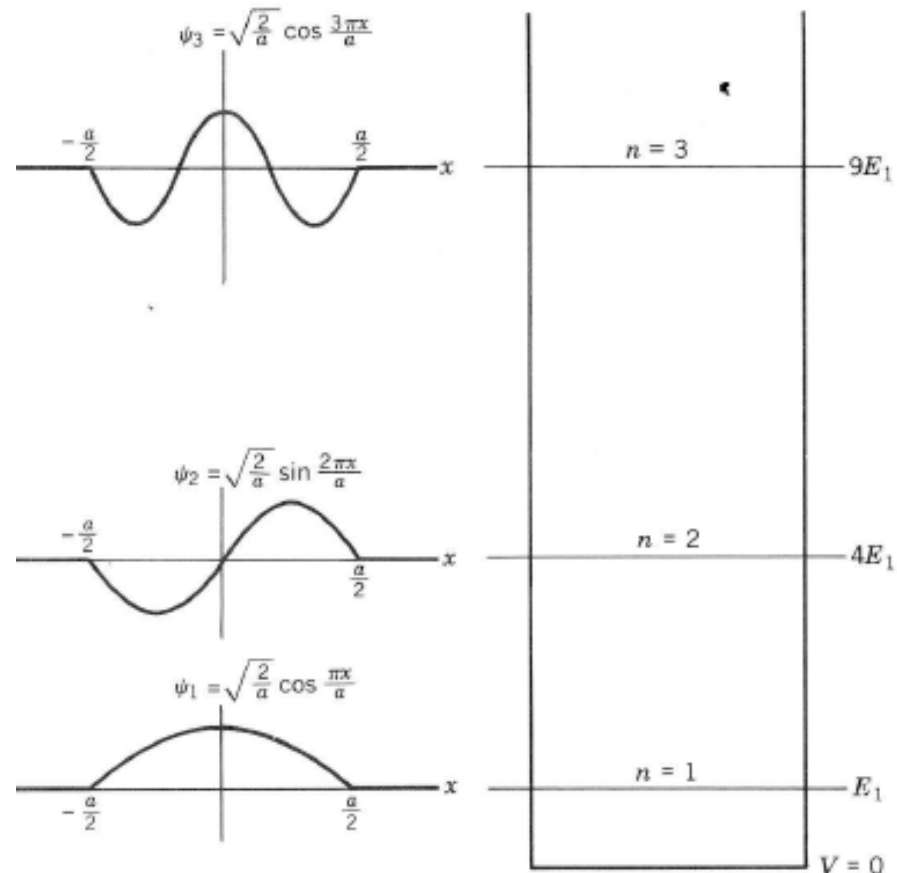
$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

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

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

para $n=1,2,3,4,\dots$

$$E = \frac{\hbar^2}{8ma^2} n^2$$



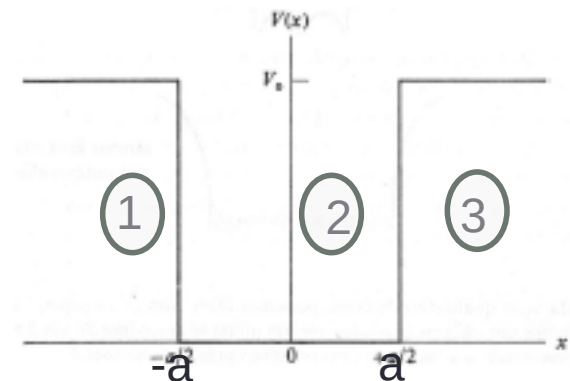
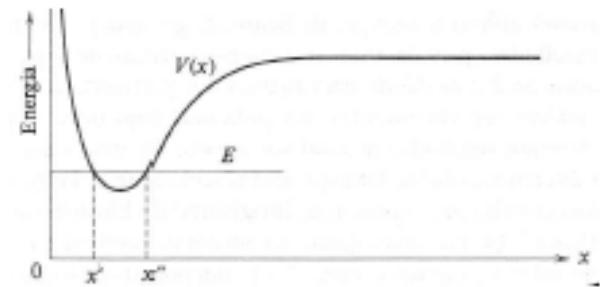
A menor energia possível não é zero!

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado”

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

- Uma situação mais realista do que o poço infinito
- Potencial representaria uma partícula presa (chamado estado ligado):
 - nêutron em um estado ligado no núcleo
 - Elétron em um átomo e que pode se desprender (átomo ionizado)



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a & \text{região 1} \\ 0 & -a < x < a & \text{região 2} \\ V_0 & x > a & \text{região 3} \end{cases}$$

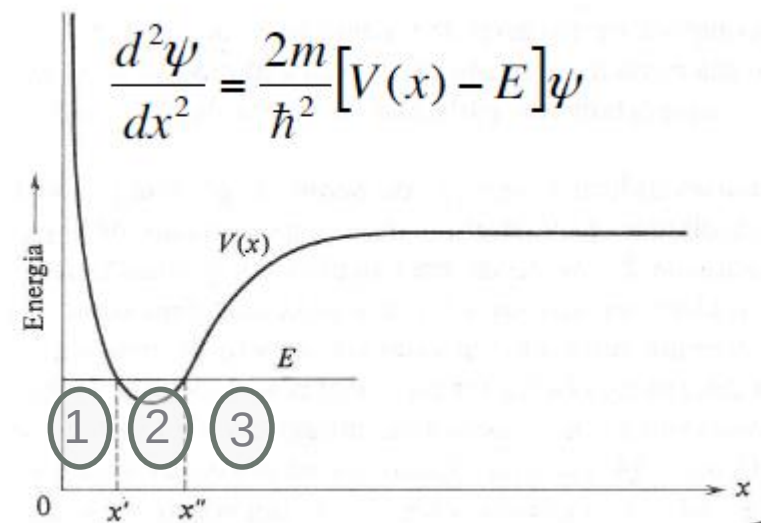
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Análise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

Permite obter características das funções de onde que são soluções de um dado problema

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

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

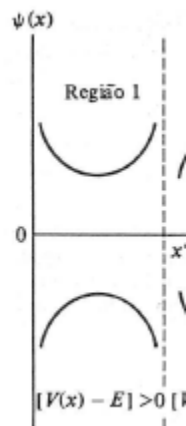


Região 1

$V(x) > E$: temos que $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ tem mesmo sinal de $\psi(x)$

Se $\psi(x) > 0$ concavidade é voltada para cima (côncava)

Se $\psi(x) < 0$ concavidade é voltada para baixo (convexa)



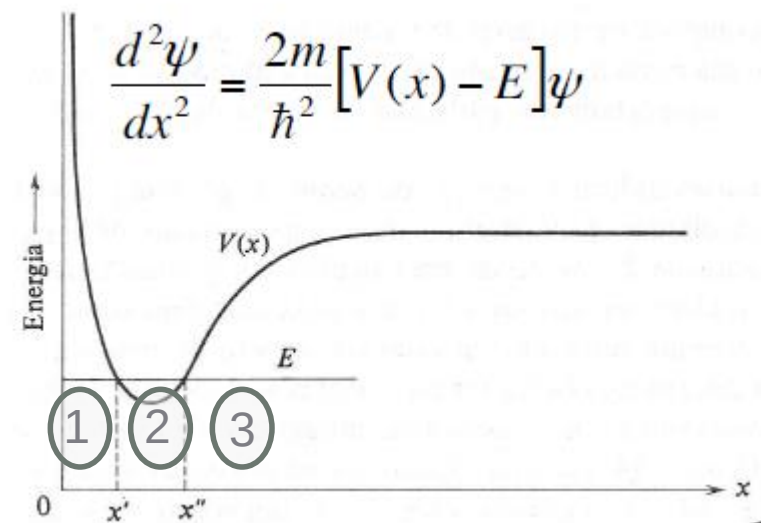
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Análise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

Permite obter características das funções de onde que são soluções de um dado problema

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

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

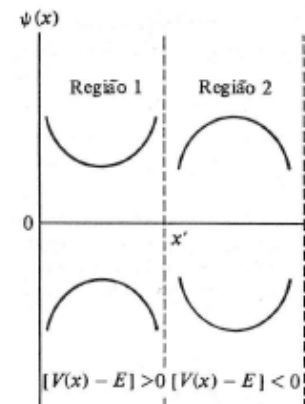


Região 2

$V(x) < E$: temos que $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ tem sinal contrário $\psi(x)$

Se $\psi(x) < 0$ concavidade é voltada para baixo

Se $\psi(x) > 0$ concavidade é voltada para cima



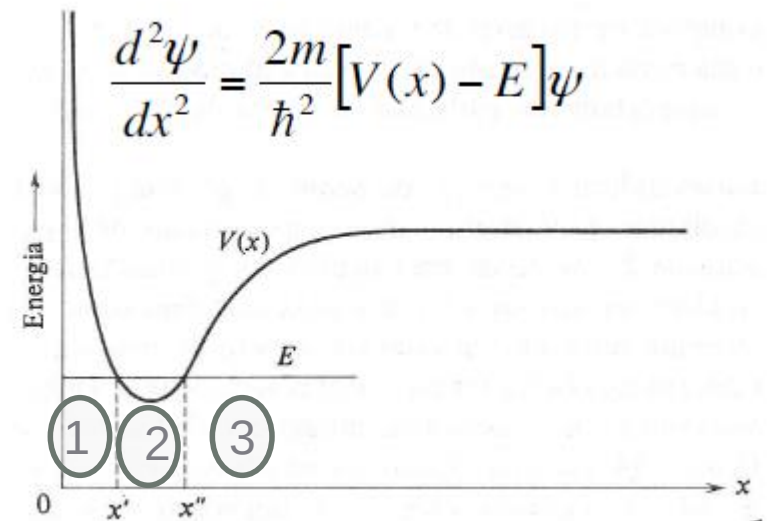
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Análise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

Permite obter características das funções de onde que são soluções de um dado problema

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

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

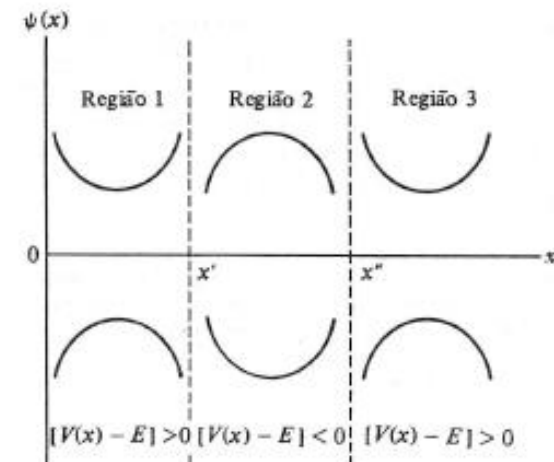


Região 3

$V(x) > E$: temos que $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$

tem mesmo sinal $\psi(x)$

Temos certos valores de energia como solução para essa equação



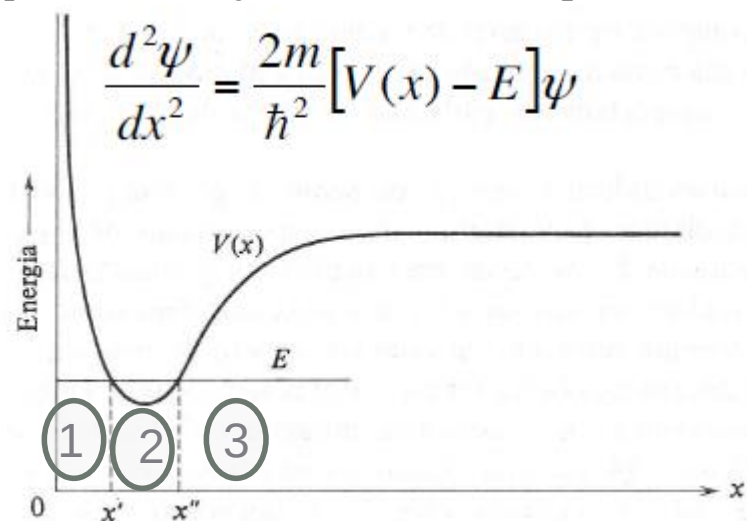
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Análise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

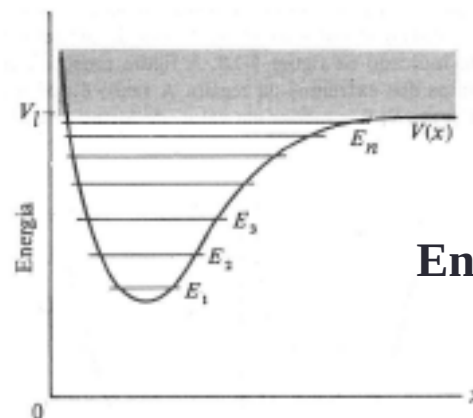
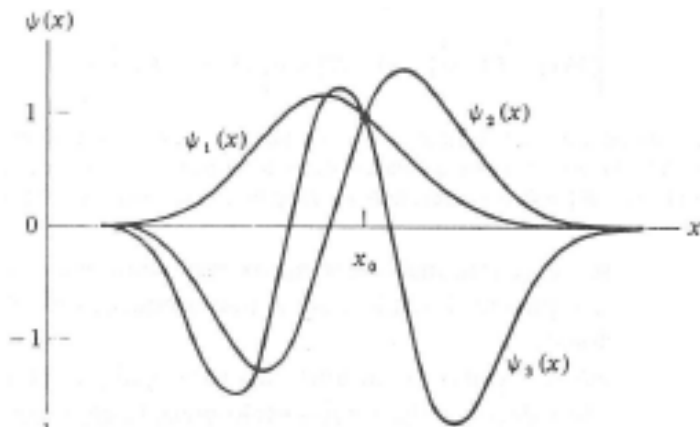
Permite obter características das funções de onda que são soluções de um dado problema

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

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



Temos certos valores de energia como solução para essa equação



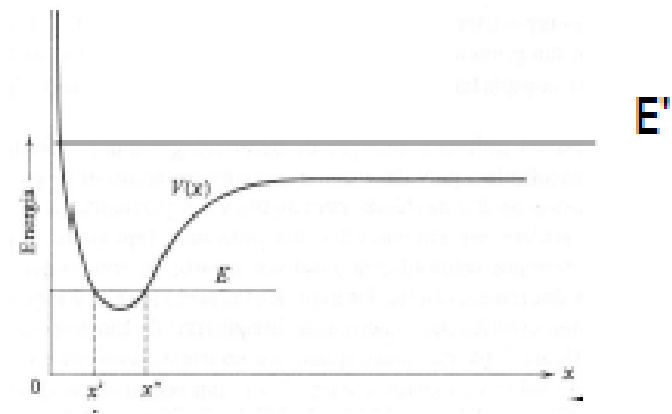
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Análise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

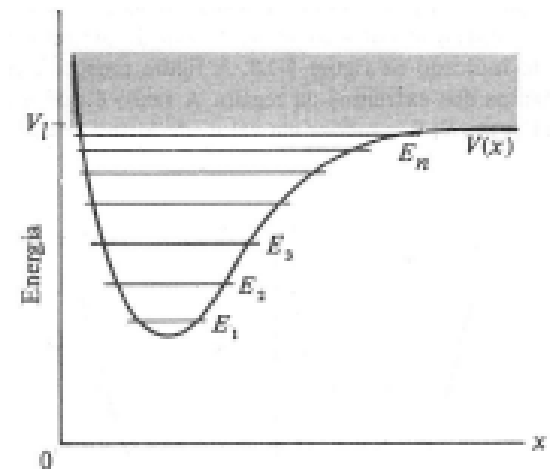
Permite obter características das funções de onda que são soluções de um dado problema

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

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



Quando $E > V(x)$ para qualquer valor de $x > x'$ é possível encontrar uma solução para $\psi(x)$ para qualquer valor de energia, formando uma distribuição contínua de valores de energia do sistema

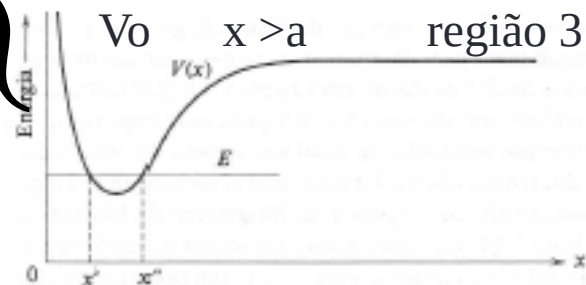


Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

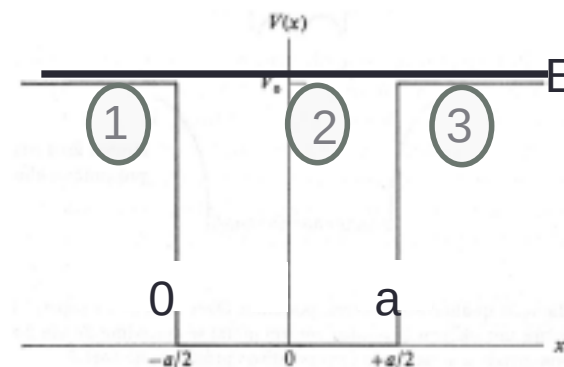
“Partícula presa em um poço finito quadrado

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

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0 & \text{região 1} \\ 0 & 0 < x < a & \text{região 2} \\ V_0 & x > a & \text{região 3} \end{cases}$$



- Uma situação mais realista do que o poço infinito
- Potencial representaria uma partícula presa (chamado estado ligado:
 - nêutron em um estado ligado no núcleo
 - Elétron em um átomo e que pode se desprender (átomo ionizado)



Região 1 e 3

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = k_1^2 \psi(x)$$

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

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} + Be^{-k_1x}$$

$$\psi_3(x) = Fe^{k_1x} + Ge^{-k_1x}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

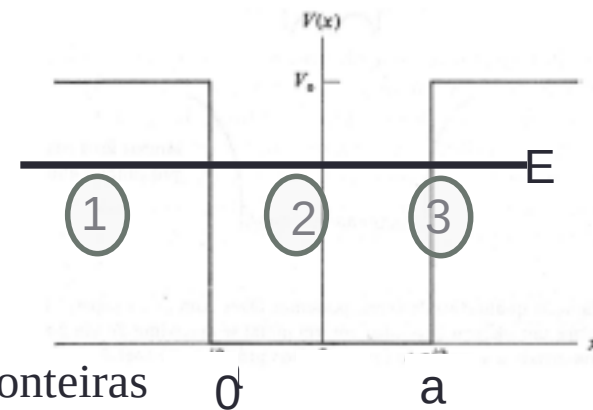
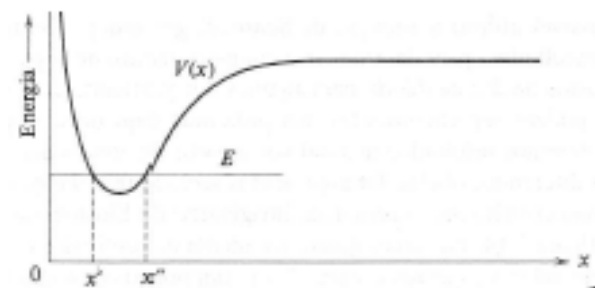
“Partícula presa em um poço finito quadrado”

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0 & \text{região 1} \\ 0 & 0 < x < a & \text{região 2} \\ V_0 & x > a & \text{região 3} \end{cases}$$

Região 2 – dentro do poço

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = C \sin k_2 x + D \cos k_2 x$$



Aqui não conseguimos exigir que a função de onda se anule nas fronteiras

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} + Be^{-k_1 x} \quad \psi_3(x) = Fe^{k_1 x} + Ge^{-k_1 x}$$

1) **Condição de finitude**

$$x \rightarrow \infty, \psi(x) \rightarrow 0$$

$$x \rightarrow -\infty, \psi(x) \rightarrow 0$$

$$F=0$$

$$B=0$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

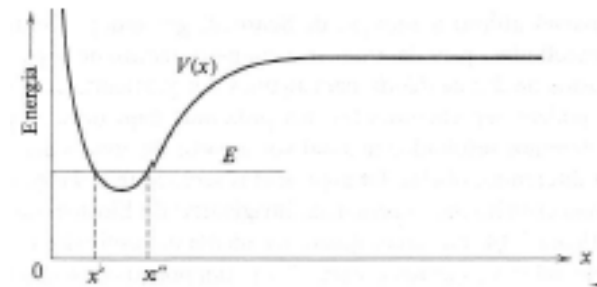
“Partícula presa em um poço finito quadrado”

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad \text{Região 3}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = C\sin k_2x + D\cos k_2x \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



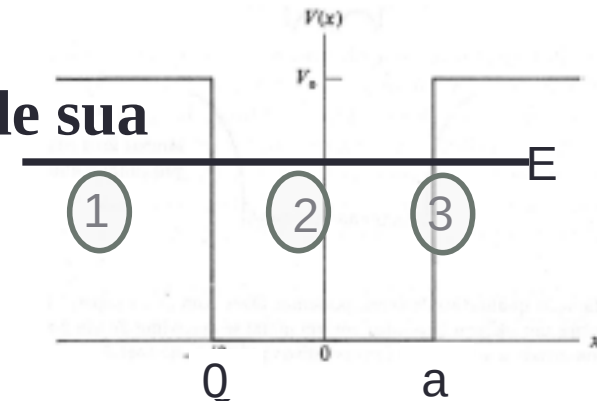
2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$\psi_{1(x=0)} = \psi_{2(x=0)}$$

$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_{2(x=a)} = \frac{d}{dx}\psi_{3(x=a)}$$



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

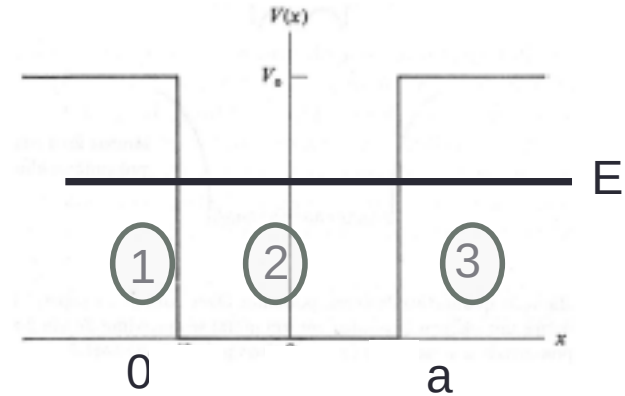
“Partícula presa em um poço finito quadrado

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad \text{Região 3}$$

$$\psi_2(x) = C\sin k_2x + D\cos k_2x \quad \text{Região 2} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



2) Condição de continuidade a função

$$\psi_{1(x=0)} = \psi_{2(x=0)}$$

$$Ae^0 = C\sin 0 + D\cos 0$$

$$A = D$$

$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

$$C\sin k_2a + D\cos k_2a = Ge^{-k_1a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

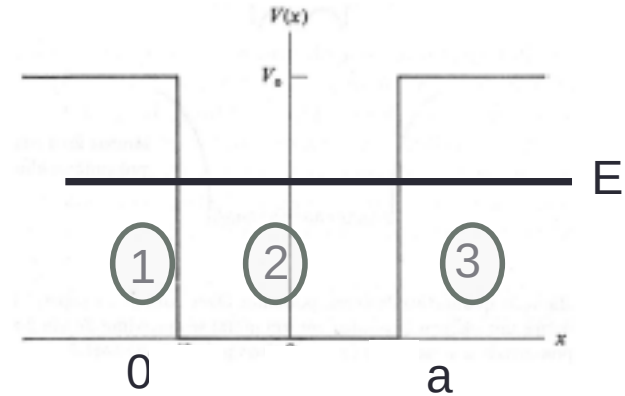
“Partícula presa em um poço finito quadrado

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad \text{Região 3}$$

$$\psi_2(x) = C\sin k_2x + D\cos k_2x \quad \text{Região 2} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



2) Condição de continuidade da derivada da função

$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

$$k_1A = Ck_2 \cos 0 - Dk_2 \sin 0$$

$$k_1A = Ck_2$$

$$\frac{d}{dx}\psi_{2(x=a)} = \frac{d}{dx}\psi_{3(x=a)}$$

$$Ck_2 \cos k_2a - Dk_2 \sin k_2a = -k_1Ge^{-k_1a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

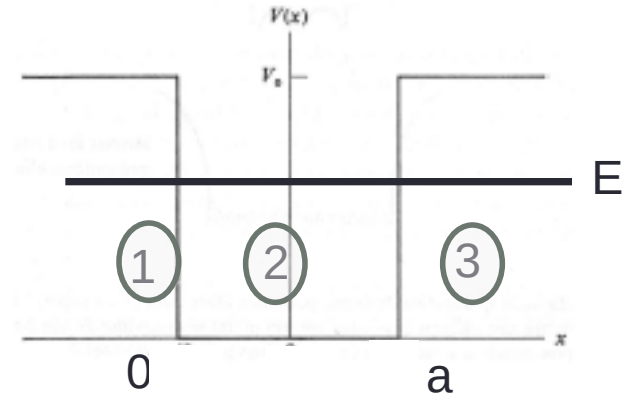
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad \text{Região 3}$$

$$\psi_2(x) = C\sin k_2x + D\cos k_2x \quad \text{Região 2}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



$$A = D$$

$$k_1 A = C k_2$$

$$\textcircled{1} C\sin k_2a + D\cos k_2a = Ge^{-k_1a}$$

$$\textcircled{2} Ck_2 \cos k_2a - Dk_2 \sin k_2a = -k_1 Ge^{-k_1a}$$

○ ○ Dividindo 2 por 1

$$\frac{Ck_2 \cos k_2a - Dk_2 \sin k_2a}{C\sin k_2a + D\cos k_2a} = \frac{-k_1 \cancel{Ge^{-k_1a}}}{\cancel{Ge^{-k_1a}}} = \frac{\cancel{D} \frac{k_1}{k_2} \cos k_2a - \cancel{D} k_2 \sin k_2a}{\cancel{D} \frac{k_1}{k_2} \sin k_2a + \cancel{D} \cos k_2a} = -k_1$$

$$x\left(\frac{1}{k_2}\right) \frac{\frac{k_1}{k_2} \cancel{D} \cos k_2 a - \cancel{D} k_2 \operatorname{sen} k_2 a}{\frac{k_1}{k_2} \cancel{D} \operatorname{sen} k_2 a + \cancel{D} \cos k_2 a} = -k_1$$

$$\frac{\frac{k_1}{k_2} \cos k_2 a - \operatorname{sen} k_2 a}{\frac{k_1}{k_2} \operatorname{sen} k_2 a + \cos k_2 a} = -\frac{k_1}{k_2}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$-\frac{k_1}{k_2} = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

Isto está relacionado à profundidade do poço (V_0) e com a largura do poço (a)

E esta relação só pode ser satisfeita para certos valores de E .

A solução não pode ser resolvida explicitamente para E .

Deve ser obtida pelo método geométrico.