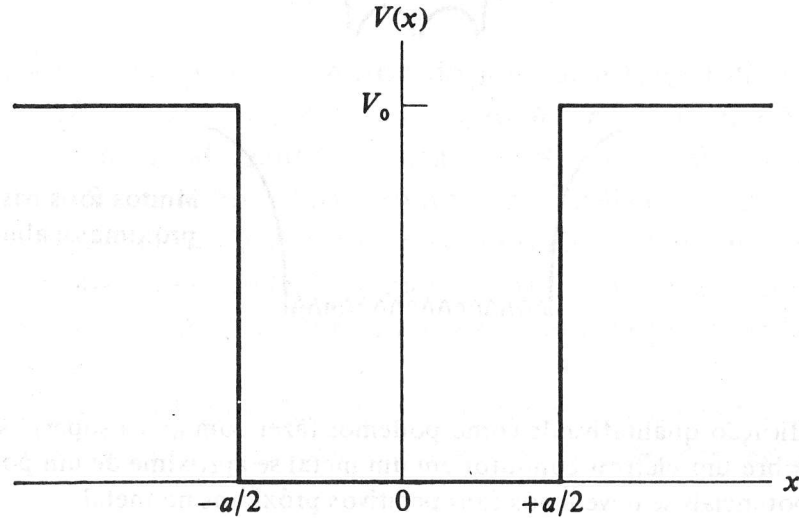


## Poços de potencial: $E < V_0$



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.

Elas se combinam formando uma onda estacionária. Então podemos fazer  $A = B$ :

$$\psi(x) = B(e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}) = B' \frac{e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}}{2}$$

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

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

Mas essa não é a única maneira de igualar as amplitudes: fazer  $A = -B$  é tão bom quanto. Assim:

$$\psi(x) = A(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}) = A' \frac{e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}}{2i}$$

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

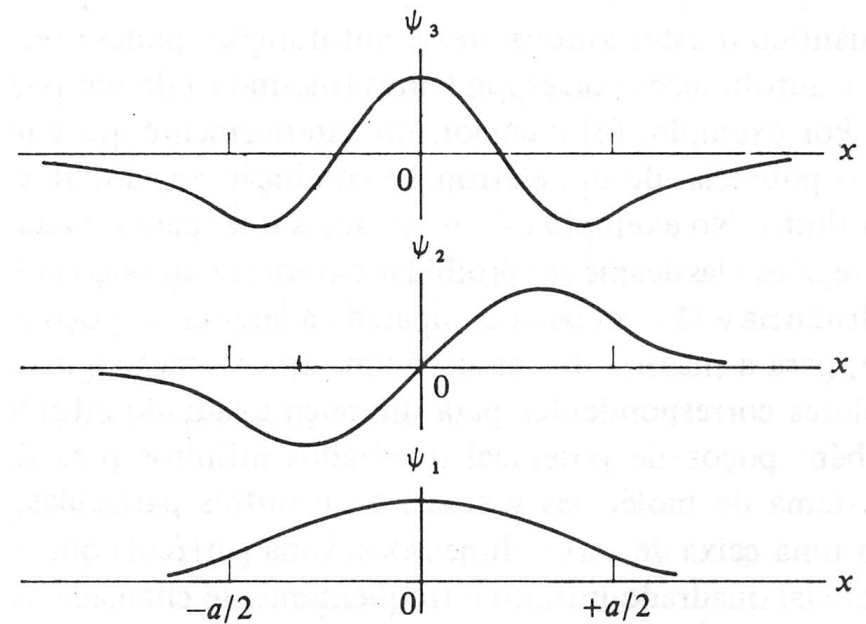
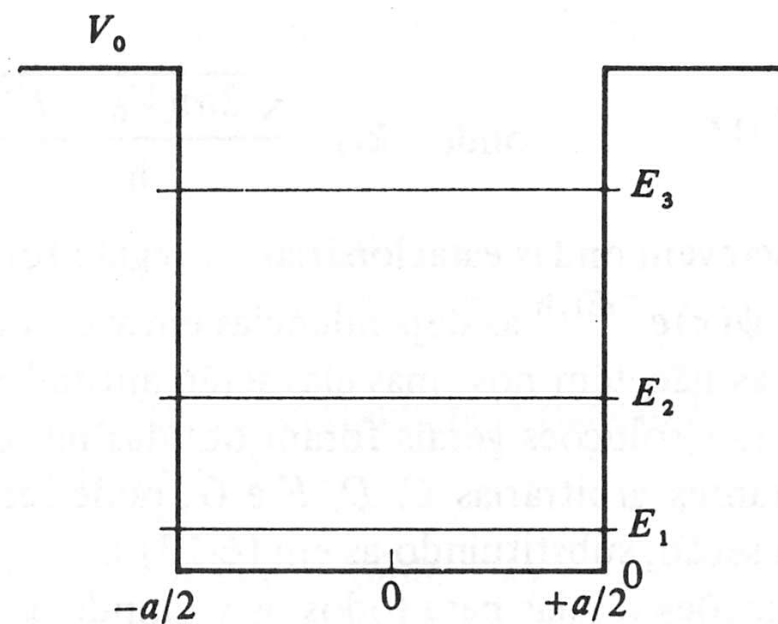
Se ambas são soluções  $\Rightarrow$  solução geral será uma combinação linear:  $\psi(x) = A' \sin k_1x + B' \cos k_1x$

Tem 2 constantes arbitrárias e é equivalente à solução com exponenciais complexas.

Regiões fora do poço:

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

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



A solução (das equações transcendentais\*) é apresentada no apêndice G, pág. 879 (Eisberg).

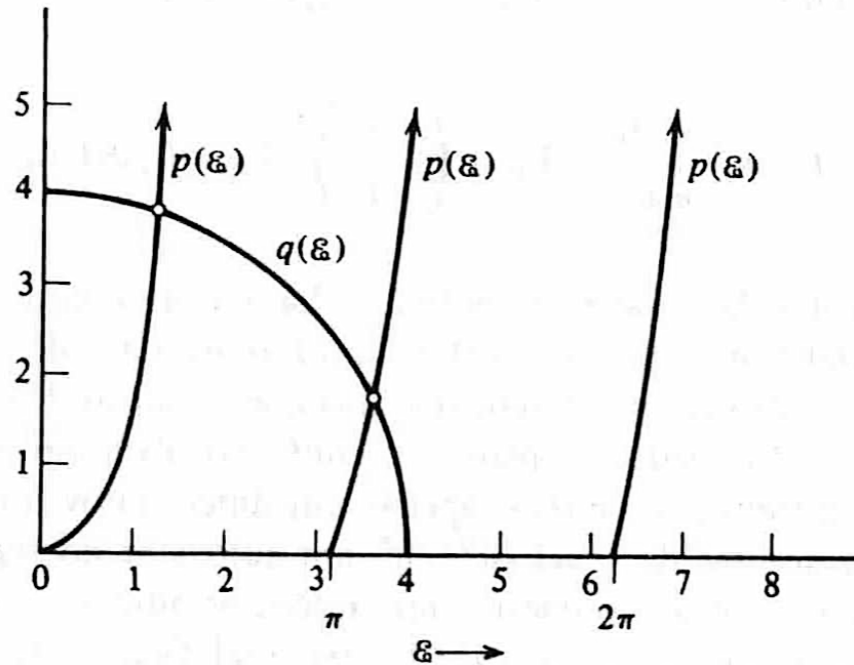
Curvatura aumenta com  $E$ . Mais oscilações  $\Rightarrow > k$ .

Notar que não existe um 4º estado ligado, pois  $E_4 > V_0$ .

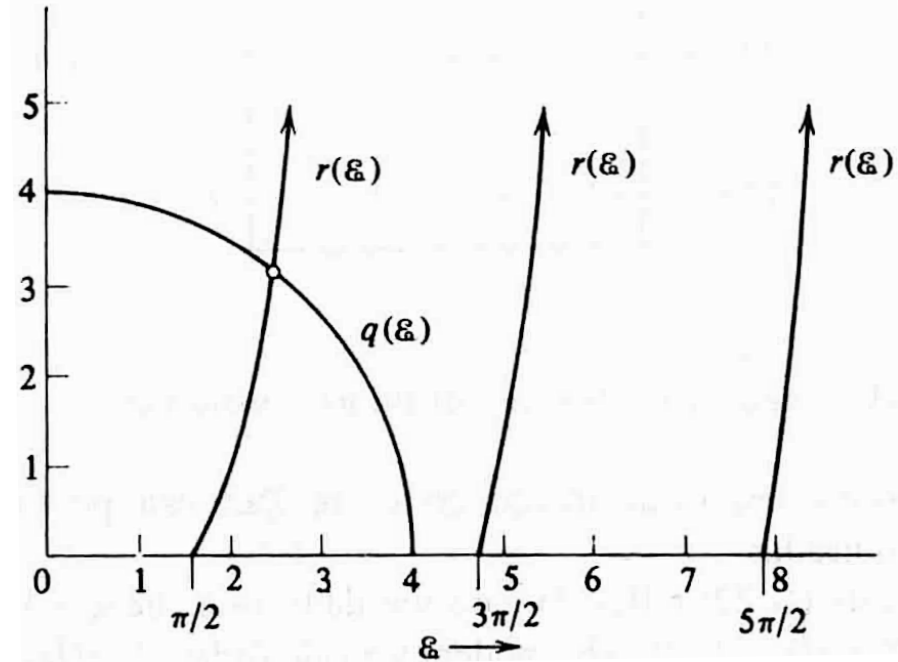
$$* \begin{cases} \varepsilon \tan \varepsilon = \sqrt{\left(mV_0 a^2 / 2\hbar^2\right) - \varepsilon^2}; \text{ e} \\ -\varepsilon \cot \varepsilon = \sqrt{\left(mV_0 a^2 / 2\hbar^2\right) - \varepsilon^2} \end{cases}$$

$$\text{com: } \varepsilon = \sqrt{mEa^2 / 2\hbar^2}$$

$$E = \xi^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0 a^2} V_0 \simeq \left(\frac{3,60}{4}\right)^2 V_0 \simeq 0,808 V_0$$



$$-\xi \cot \xi = \sqrt{mV_0 a^2 / 2\hbar^2 - \xi^2}$$



$$* \begin{cases} \varepsilon \tan \varepsilon = \sqrt{(mV_0 a^2 / 2\hbar^2) - \varepsilon^2}; \text{ e} \\ -\varepsilon \cot \varepsilon = \sqrt{(mV_0 a^2 / 2\hbar^2) - \varepsilon^2} \end{cases}$$

$$\text{com: } \varepsilon = \sqrt{mEa^2 / 2\hbar^2}$$

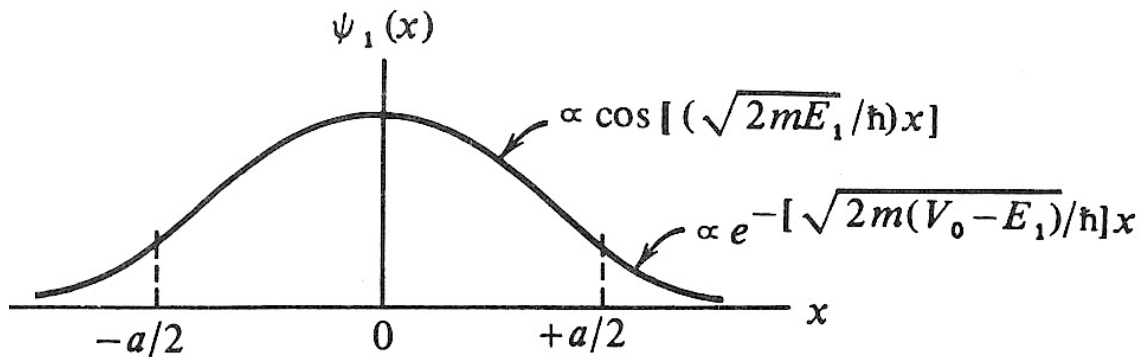
**Questão 13, Lista 3:** Se uma partícula não está ligada em um potencial, sua energia total não é quantizada. Isto significa que o potencial *não* tem efeito sobre o comportamento da partícula? Que efeito você esperaria que ele tivesse?

A equação de Schrödinger independente do tempo:

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

Se  $E > V \Rightarrow$  que a solução é oscilatória, com  $k = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}$

# Transição para poço infinito.

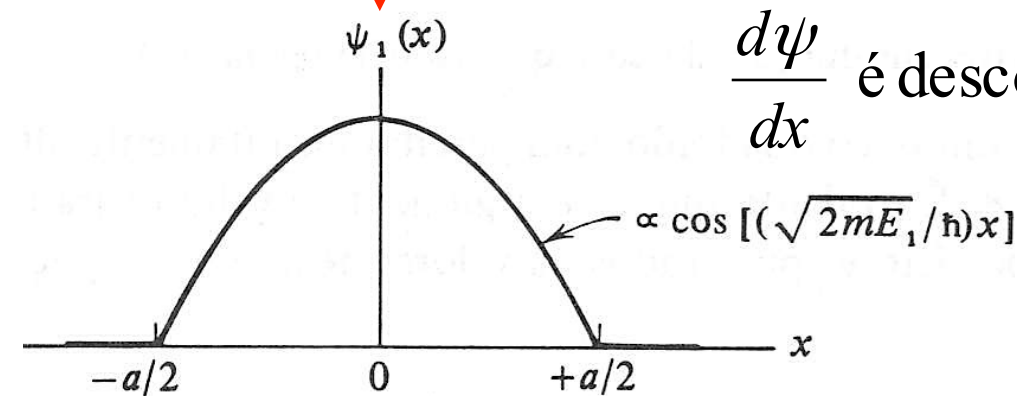


$$V_0 \rightarrow \infty \Rightarrow$$

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

$$\Rightarrow \psi(x) \rightarrow 0 \text{ fora do poço}$$

$\frac{d\psi}{dx}$  é descontínua, mas OK, pois  $V_0$  é infinito.



$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > a/2 \\ 0, & -a/2 < x < a/2 \end{cases}$$

Potencial capaz de manter ligada qualquer partícula com energia finita. Classicamente, qualquer  $E$ . Quanticamente, só determinados valores discretos,  $E_n$ .

Solução mais simples que o finito. Boa aproximação para  $n$  pequeno.

Solução geral (só temos 1 região):  $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$

com:  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}$

Condições de contorno  $\Rightarrow$  nós nas paredes da caixa:

$$A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0, \text{ em } x = a/2$$

$$A \sin \left( -\frac{ka}{2} \right) + B \cos \left( -\frac{ka}{2} \right) = 0 = -A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2}, \text{ em } x = -a/2$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Somando: } 2B \cos \frac{ka}{2} = 0 \\ \text{Subtraindo: } 2A \sin \frac{ka}{2} = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$\Rightarrow \nexists$  valores de  $k$  que satisfaçam ambas simultaneamente.

$A = B = 0$  também não resolve. Temos que fazer:

$$A = 0 \text{ e } \cos \frac{ka}{2} = 0 \text{ ou } B = 0 \text{ e } \sin \frac{ka}{2} = 0$$

Teremos então 2 tipos de autofunções:

$$1^\circ \text{ tipo: } \psi(x) = B \cos kx, \text{ com } \cos \frac{ka}{2} = 0$$

$$2^\circ \text{ tipo: } \psi(x) = A \sin kx, \text{ com } \sin \frac{ka}{2} = 0$$

$$1^\circ \text{ tipo: } \frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}; \frac{3\pi}{2}; \frac{5\pi}{2}; \dots \text{ ou } k_n = \frac{n\pi}{a}, \text{ com } n = 1; 3; 5; \dots$$

$$2^\circ \text{ tipo: } \frac{ka}{2} = \pi; 2\pi; 3\pi; \dots \text{ ou } k_n = \frac{n\pi}{a}, \text{ com } n = 2; 4; 6; \dots$$

$$\text{Solução: } \begin{cases} \psi_n(x) = B_n \cos k_n x, \text{ com } k_n = \frac{n\pi}{a}, n = 1, 3, 5, \dots \\ \psi_n(x) = A_n \sin k_n x, \text{ com } k_n = \frac{n\pi}{a}, n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

$$n = 0 \Rightarrow \psi_0(x) = A_0 \sin 0 = 0 \Rightarrow \nexists \text{ solução.}$$

As constantes  $A_n$  e  $B_n$  são determinadas pela normalização.

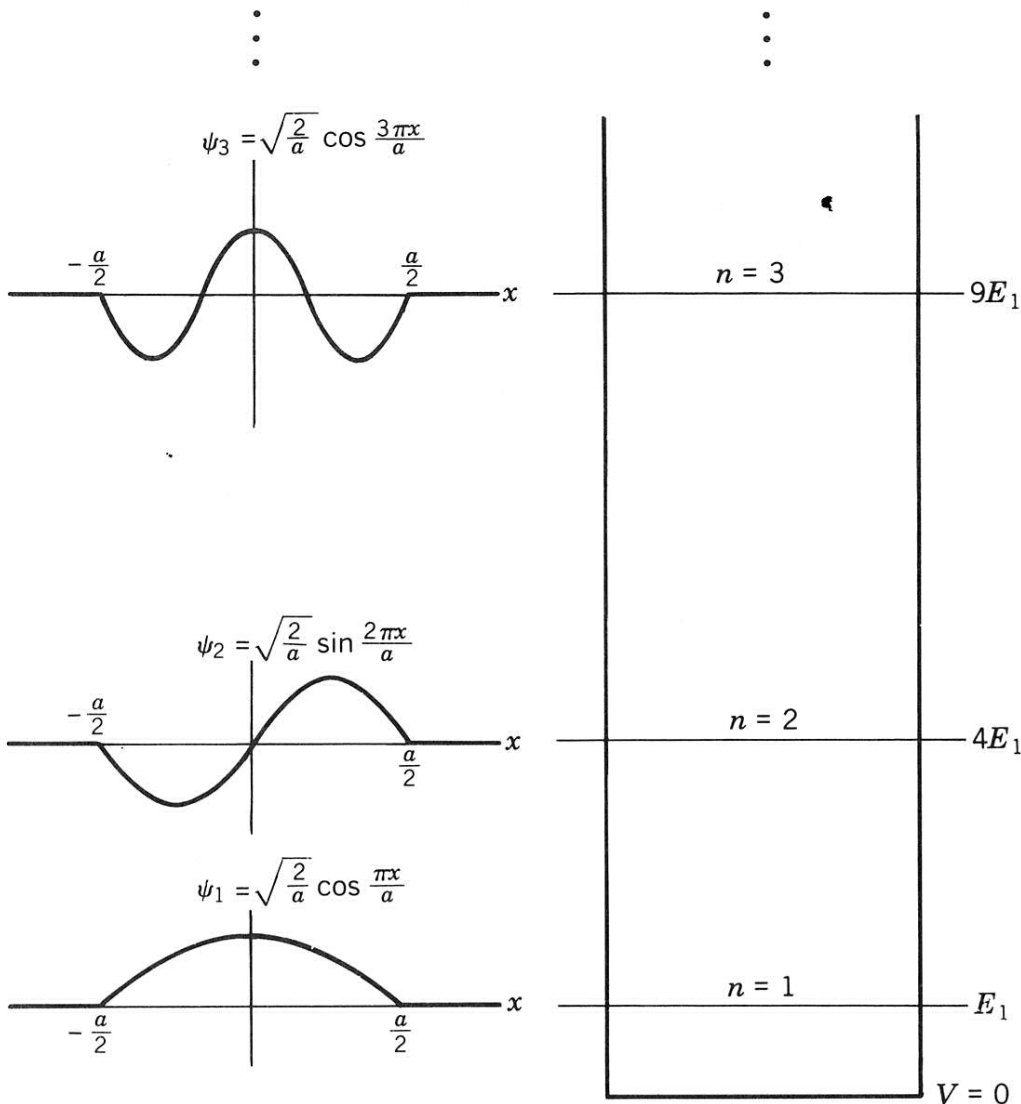
Como  $k_n = \frac{n\pi}{a}$ , mas também

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$$

O inteiro  $n$  atua como um número quântico, que indexa as autofunções permitidas e os números de onda ( $k$ ) e, portanto, as energias permitidas.

$$E_n = n^2 E_1.$$



Características importantes:

1) energia quantizada;

2) energia de ponto zero (não existe partícula com  $E = 0$ );

3) paridade bem definida:

$n$  ímpar  $\Rightarrow$  funções pares:  $\psi(-x) = \psi(x)$

$n$  par  $\Rightarrow$  funções ímpares:  $\psi(-x) = -\psi(x)$

A paridade das autofunções é bem definida, pois o potencial é simétrico.

Característica geral: grandezas mensuráveis de partículas ligadas a potenciais simétricos devem ser simétricas em relação ao eixo de simetria do potencial.

Se a origem é colocada nesse eixo  $\Rightarrow$  função que descreve essa grandeza deve ser par.

Lembrem-se que observável é  $|\Psi|^2$ , não  $\Psi$ .

Caso da densidade de probabilidade:

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x).$$

$$\text{Mas } P(-x) = \psi^*(-x)\psi(-x) = [\pm\psi^*(x)][\pm\psi(x)] = \psi^*(x)\psi(x) = P(x)$$

A autofunção não obedece isso, mas ela não é uma observável.

4) Limite clássico:  $n \rightarrow \infty$

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = [(n+1)^2 - n^2]E_1 = (2n+1)E_1$$

$$\Rightarrow \frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(2n+1)E_1}{n^2 E_1} \rightarrow \frac{2}{n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

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.

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

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

**Exemplo macroscópico:** conta de 5 g num fio de 40 cm.

Energia do estado fundamental:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s})^2 \pi^2}{2(5 \cdot 10^{-3} \text{ kg})(0,4 \text{ m})^2} \approx 7 \cdot 10^{-65} \text{ J}$$

Qual seria o estado se a conta estivesse se movendo com uma velocidade de 2 m/s?

A energia da conta, neste caso, seria:  $E_n = \frac{mv^2}{2} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \Rightarrow$

$$n = \frac{mva}{\pi \hbar} = \frac{2mva}{h} = \frac{2(5 \cdot 10^{-3} \text{ kg})(2 \text{ m/s})(0,4 \text{ m})}{6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}} \approx 10^{31}$$

Bem de acordo com o que esperamos para o limite clássico.