Universidade de São Paulo
Instituto de Física

FÍSICA MODERNA I
AULA 18

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

1o. Semestre de 2015
Monitor: Gabriel M. de Souza Santos

Página do curso:
http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=5215

22/05/2015

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** $\psi(x) = \infty; x \to 0$ **partícula tem que ter ser 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

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:**

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

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

As derivadas agora são ordinárias e não mais parciais

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

Equação de Schrödinger independente do tempo

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

Só depende de x

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

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:

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

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

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

Temos uma função oscilatória de frequência f=C/h, mas segundo de Broglie : $E = h\nu$

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

$$\boxed{C = E}$$

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

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

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

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

Equação de Schrödinger independente do tempo

Partícula sujeita a V(x) = Vo

Postular a equação de Schrödinger para uma partícula de massa m livre

V(x,t)=Vo

Primeiro podemos pensar em uma função de onda do tipo cos(kx-wt), 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 sen(kx-wt). Entretanto a combinação linear destas soluções é uma forma exponencial da função harmônica que satisfaz a equação de Schrödinger

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

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

Usando a fórmula de Euler

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

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

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

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

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

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

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

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

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

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

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

$$E = \hbar\omega$$

Energia total da partícula se conserva

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Estudar a partícula livre que não age nenhuma força é aplicada

V(x,t) = 0

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

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

$$E = \hbar\omega$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2(Ae^{ikx})}{dx^2} + 0(Ae^{ikx}) = E\psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2 Ae^{ikx} = E\psi(x)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} Ae^{ikx} = \frac{p^2}{2m}\psi(x) = E\psi(x)$$

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

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 principio de incerteza, não temos a menor ideia onde a partícula está.

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

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

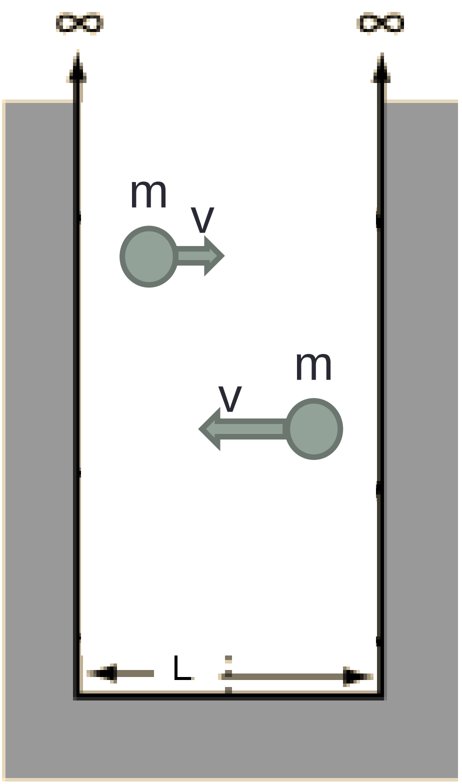
A função densidade de probabilidade não depende do tempo (estado estacionário de energia bem definida), e ela também não depende da posição, o que indica que a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer lugar no espaço é igual.

Logo para a partícula livre temos:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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)=infinito
- Como a partícula esta confinada dentro da caixa $0 \le x \le L$ esperamos que a $\psi(x) = 0$ fora da caixa
- Estão de acordo com a Eq. de Scrödinger 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 Scrödinger. 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)=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, ai 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 $0 \le x \le L$ $\quad \psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$

$$\psi(x) = A_1[\cos(kx + isenkx)] + A_2[\cos(-kx) + isen(-kx)]$$

$$\psi(x) = A_1[\cos(kx + isenkx)] + A_2[\cos(kx) - isen(kx)]$$

$$\psi(x) = (A_1 + A_2)\cos kx + i(A_1 - A_2)senkx$$

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

$$A_1 = -A_2$$

$$\psi(x) = 2iA_1 senkx = Csenkx$$

$$\psi(0) = 0$$

$$x = L$$

$$kL = n\pi$$

A função de onda de estados estacionári **para a partícula dentro da caixa**

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

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

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

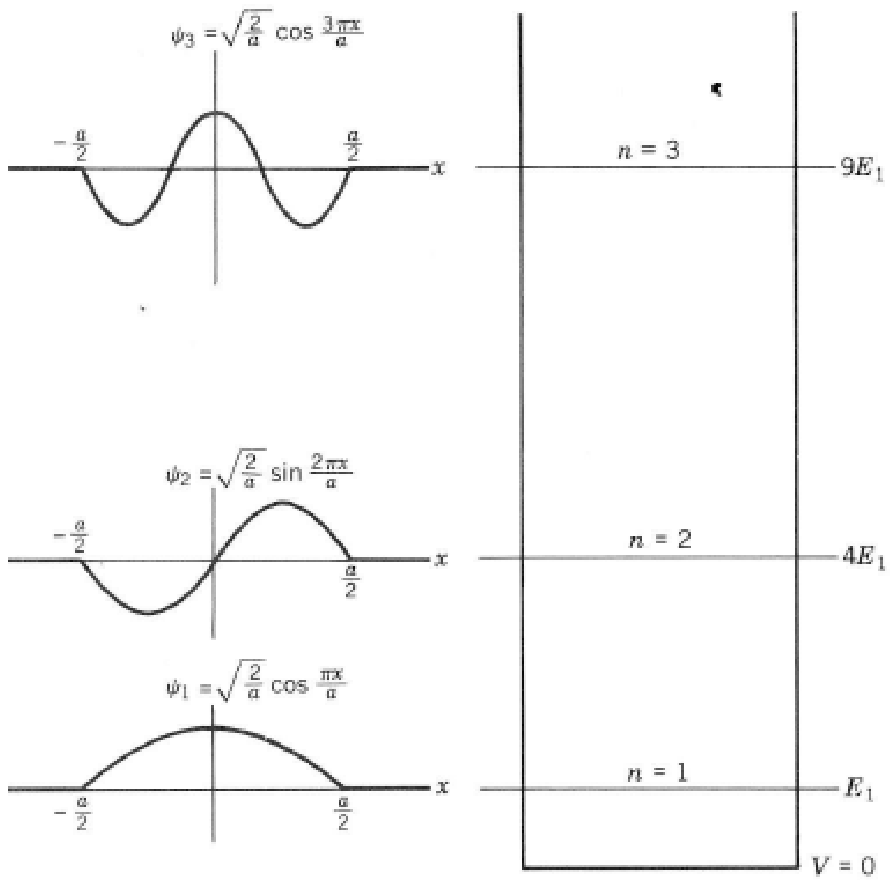
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)$$

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

para n=1,3,5,...

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

para n=2,4,6,...



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

para n=1,2,3,4,...

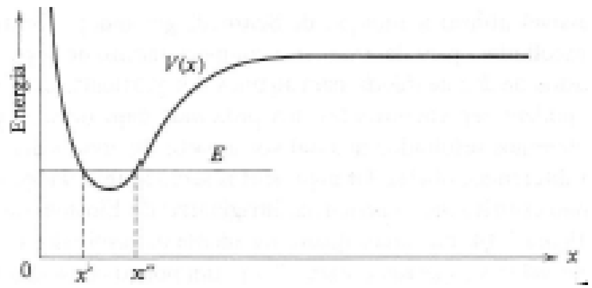
$$E = \frac{h^2}{8ma^2}n^2$$

A menor energia possível não é zero!

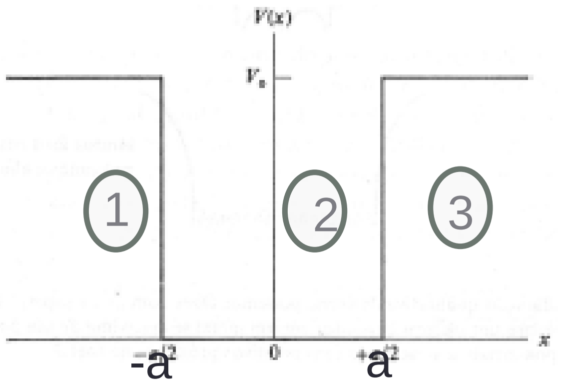
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“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)



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

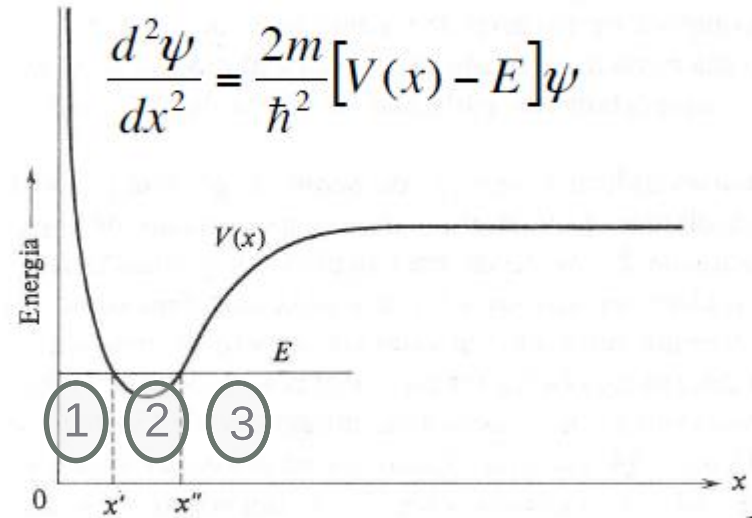
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger"

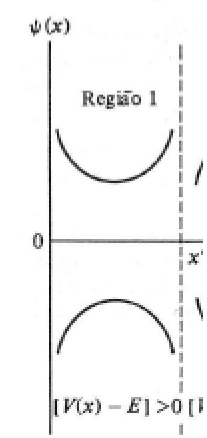
Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

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

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



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)**

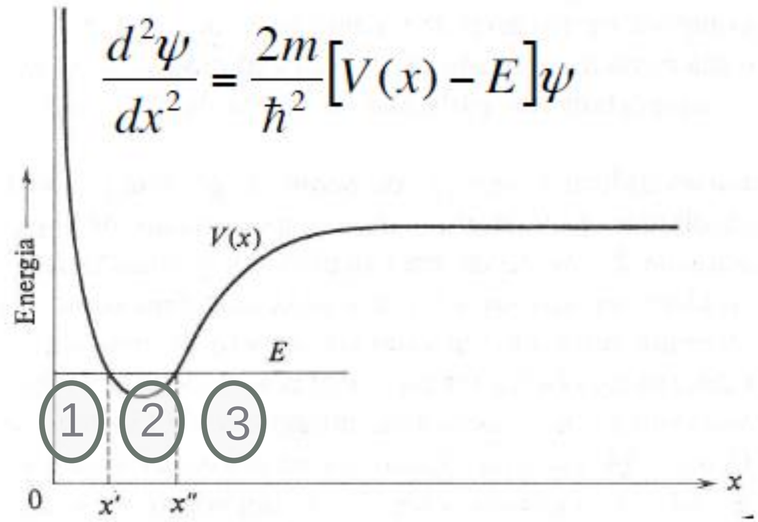
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger"

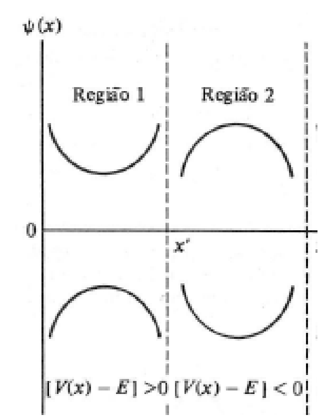
Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

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

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



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

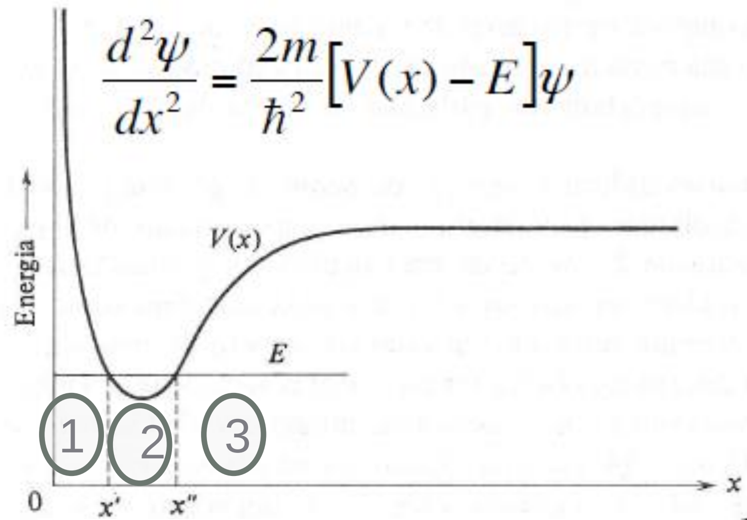
"Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger"

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

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

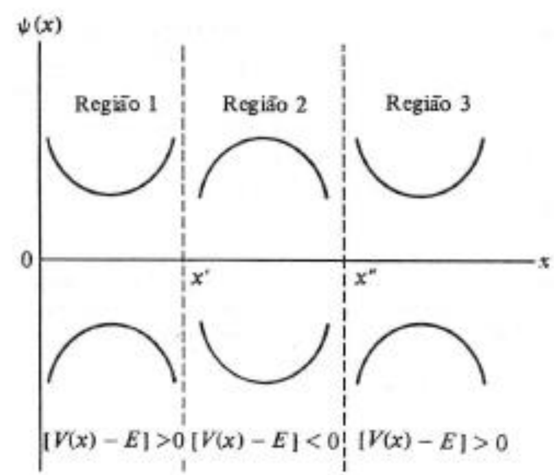
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\psi(x)$$

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



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

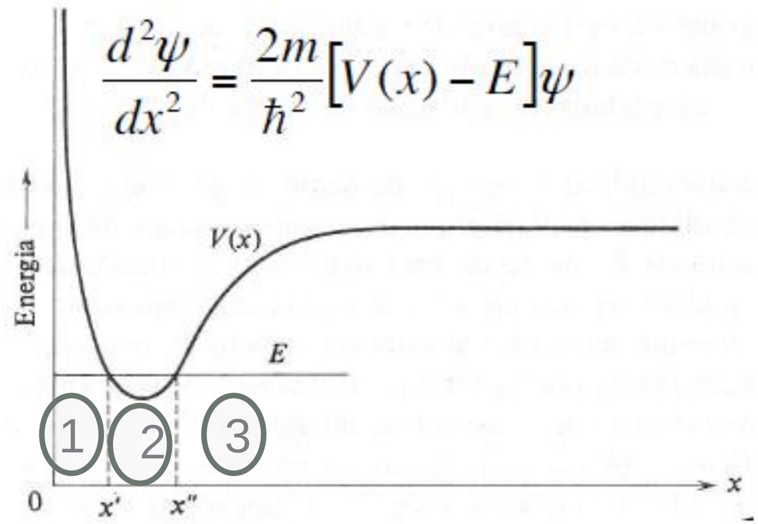
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger"

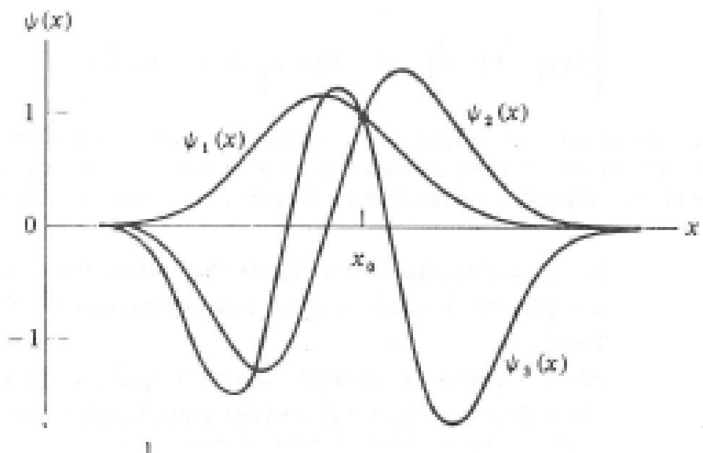
Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

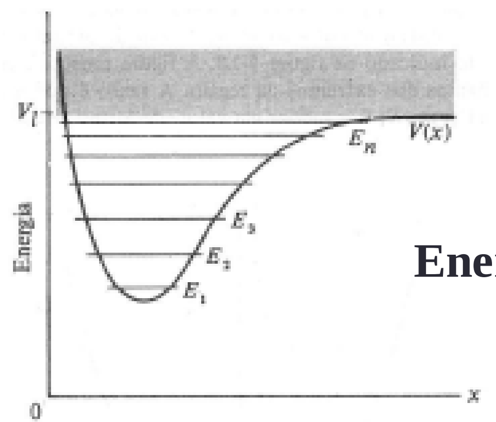
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

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



Temos certos valores de energia como solução para essa equação





Energia quantizada

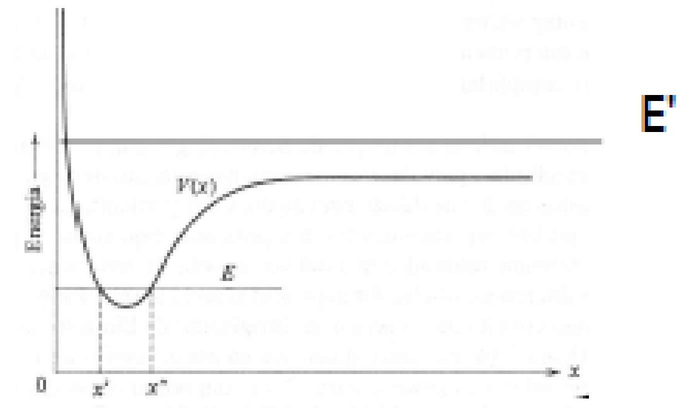
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Analise Qualitativa das soluções da Equação de Schrödinger”

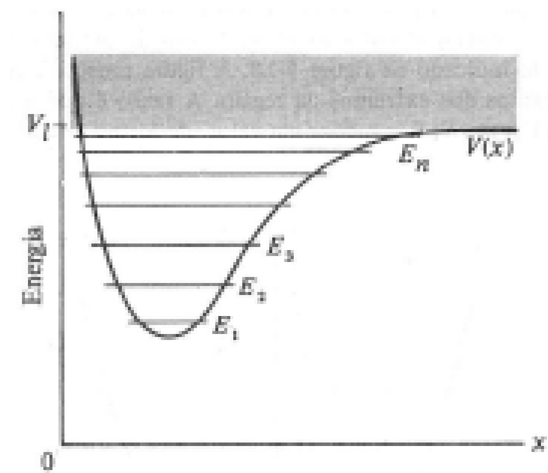
Permite obter características das funções de onde que são soluções da um dado problema

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

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



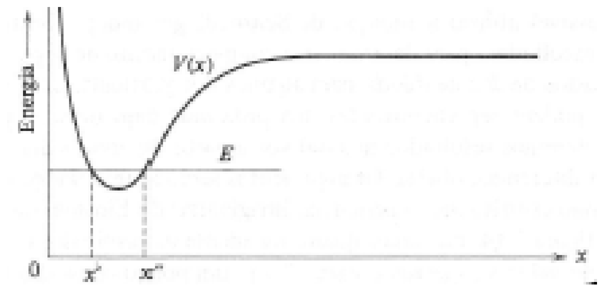
Quando E > V(x) para qualquer valor de x> x´ é possível encontra uma solução para $\psi(x)$ **para qualquer valor de energia, formando uma distribuição continua de valores de energia do sistema**



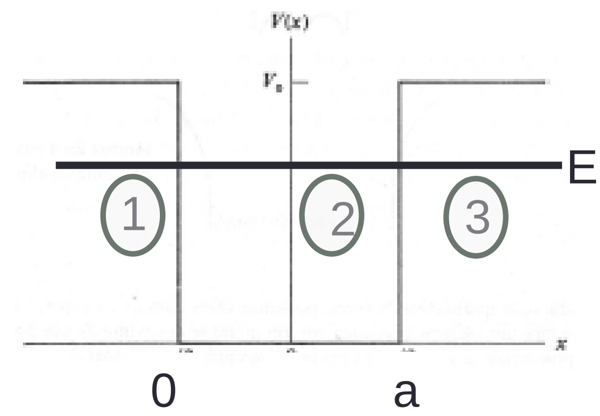
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

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



- 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)



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

Região 1 e 3

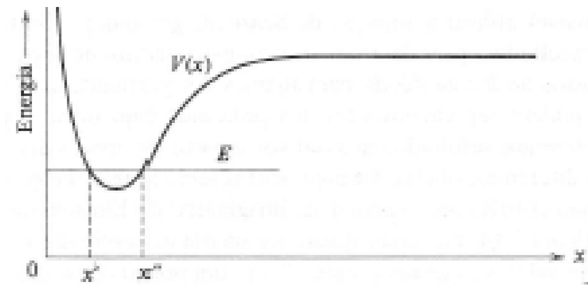
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi(x) \qquad k_1=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

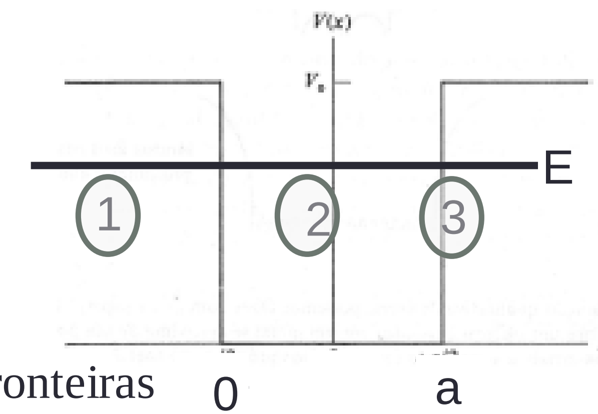
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=k_1^{\,2}\psi(x) \qquad \psi_1(x)=Ae^{k_1x}+Be^{-k_1x} \qquad \psi_3(x)=Fe^{k_1x}+Ge^{-k_1x}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

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





Região 2 – dentro do poço

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

$$\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}\,k_2x + D\cos k_2x$$

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

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} + Be^{-k_1x} \qquad \psi_3(x) = Fe^{k_1x} + Ge^{-k_1x}$$

1) Condição de finitude

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

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

F=0

B=0

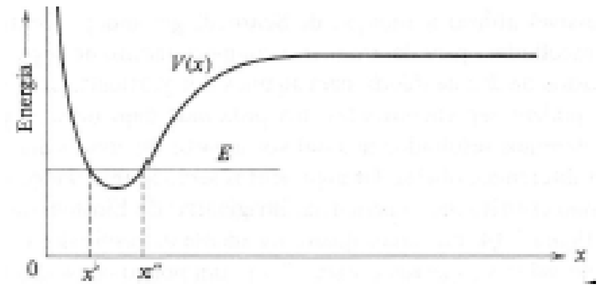
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} \quad \text{Região 1}$$

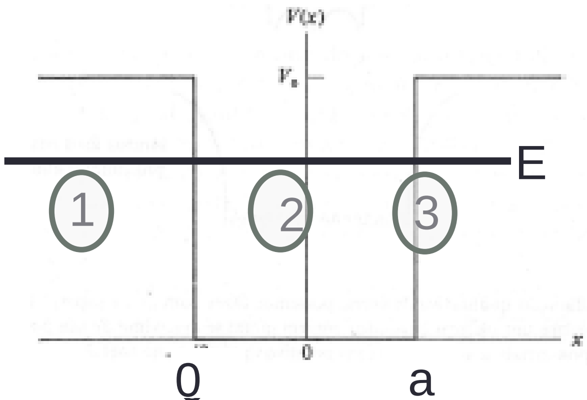
$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x} \quad \text{Região 3}$$

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



$$\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}\,k_2 x + D\cos k_2 x \quad \text{Região 2}$$

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



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

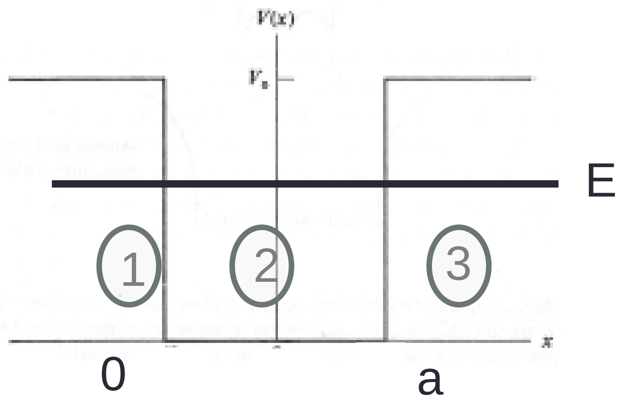
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ Região 3

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

$$\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}\,k_2 x + D\cos k_2 x$$ Região 2

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



2) Condição de continuidade a função

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

$$Ae^0 = C\,\mathrm{sen}0 + D\cos 0$$

$$\boxed{A = D}$$

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

$$C\,\mathrm{sen}\,k_2 a + D\cos k_2 a = Ge^{-k_1 a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

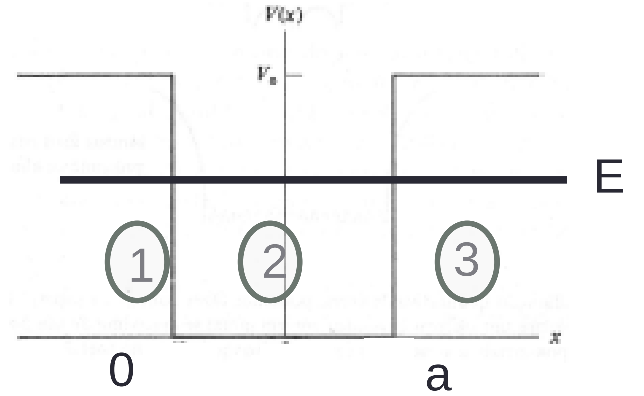
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ Região 3

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

$$\psi_2(x) = C\,sen\,k_2 x + D\cos k_2 x$$ Região 2

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



2) Condição de continuidade da derivada da função

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

$$k_1 A = Ck_2 \cos 0 - Dk_2 sen 0$$

$$\boxed{k_1 A = Ck_2}$$

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

$$Ck_2 \cos k_2 a - Dk_2 sen k_2 a = -k_1 G e^{-k_1 a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

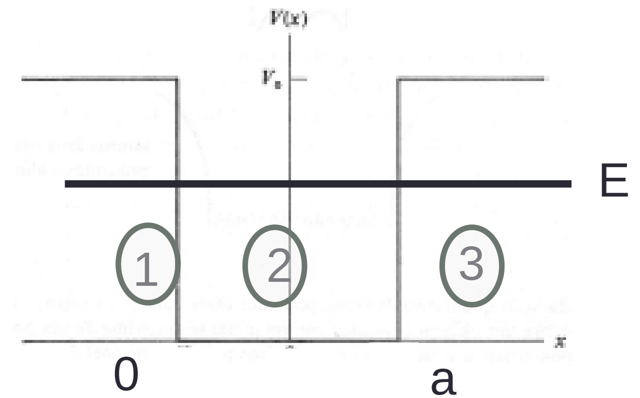
$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$ Região 1

$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$ Região 3

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

$\psi_2(x) = Csenk_2 x + D\cos k_2 x$ Região 2

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



$\boxed{A = D}$ $\boxed{k_1 A = Ck_2}$

1 $Csenk_2 a + D\cos k_2 a = Ge^{-k_1 a}$

$\boxed{\dfrac{k_1}{k_2} = \dfrac{C}{D}}$

2 $Ck_2 \cos k_2 a - Dk_2 senk_2 a = -k_1 Ge^{-k_1 a}$

Dividindo 2 por 1

$$\frac{Ck_2 \cos k_2 a - Dk_2 senk_2 a}{Csenk_2 a + D\cos k_2 a} = \frac{-k_1 \cancel{Ge^{-k_1 a}}}{\cancel{Ge^{-k_1 a}}}$$

$$\frac{\cancel{D}\dfrac{k_1}{\cancel{k_2}}\cancel{k_2}\cos k_2 a - \cancel{D}k_2 senk_2 a}{\cancel{D}\dfrac{k_1}{k_2} senk_2 a + \cancel{D}\cos k_2 a} = -k_1$$

$$x\left(\frac{1}{k_2}\right)\frac{\frac{k_1}{\cancel{k_2}}\cancel{D}\cancel{k_2}\cos k_2 a - \cancel{D}k_2 senk_2 a}{\frac{k_1}{k_2}\cancel{D}senk_2 a + \cancel{D}\cos k_2 a} = -k_1$$

$$\frac{\frac{k_1}{k_2}\cos k_2 a - senk_2 a}{\frac{k_1}{k_2}senk_2 a + \cos k_2 a} = \boxed{-\frac{k_1}{k_2}}$$

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

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

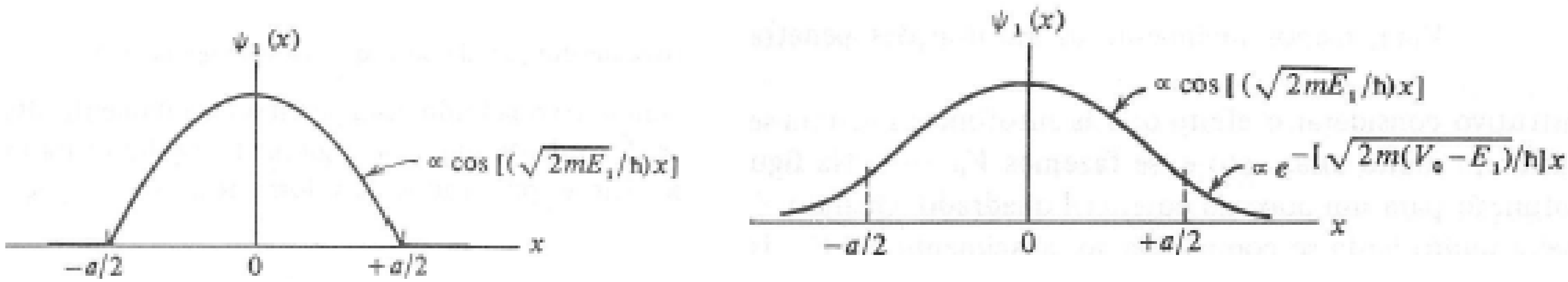
$$-\frac{k_1}{k_2} = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

Isto esta relacionado a profundidade do poço (Vo) 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.

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado”

Comparando o primeiro estado do sistema do poço infinito com o poço finito



O fato da função de onda não ser zero nas paredes aumenta o comprimento de onda de de Broglie na parede (em comparação com o poço infinito), e isto torna menor a energia e o momento da partícula. Esta observação pode ser usada para aproximar as energias permitidas para a partícula ligada. A função de onda penetra na região exterior, numa escala de comprimento definido peça profundidade de penetração δ dado por:

$$\delta = \frac{1}{k_1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

A função de e onda no exterior é essencialmente zero além da distância δ, em ambos os lados do poço de potencial

$$E_n \approx \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(L+2\delta)^2}$$

Energia da partícula ligada no poço finito