

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

7.1 Partícula Livre

A equação de Schroedinger para uma partícula livre é obtida fazendo-se $V(x) = 0$ para todo o espaço:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x) \text{ ou } \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = -k^2\Psi(x), k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Soluções para esta equação são bem conhecidas:

$$\Psi(x) = \cos kx, \sin kx, \text{ ou } e^{\pm ikx}$$

A solução geral corresponde a uma combinação linear de duas soluções, por exemplo:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

A solução da equação de Schroedinger dependente do tempo será portanto:

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

O termo $e^{i(kx-\omega t)}$ descreve uma onda viajando no sentido de x positivo e $e^{-i(kx+\omega t)}$ no sentido oposto. Ondas desse tipo são chamadas *ondas planas*. Portanto uma partícula livre com momento linear positivo será representada pela função acima fazendo-se $B=0$. O valor esperado para a medida do momento dessa partícula é dado por:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{p} \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^* e^{-i(kx-\omega t)} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) A e^{i(kx-\omega t)} dx = \hbar k \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = \hbar k$$

pois sendo a função de onda normalizada, a última integral acima deve ser igual a 1. Portanto:

$$\langle p \rangle = \hbar k = \hbar \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \sqrt{2mE}$$

como esperado. Fazendo-se cálculo análogo para a função correspondente à partícula caminhando no sentido de x negativos ($A=0$), obtém-se $\langle p \rangle = -\sqrt{2mE}$. Com relação ao

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

valor esperado para a posição da partícula, note que $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = A^*A = cte..$ Portanto a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer intervalo $x, x+dx$ é a mesma, conforme previsto pelo princípio de incerteza. A normalização da função de onda de uma partícula livre traz alguma dificuldade formal, uma vez que $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\Psi dx = \infty$. Do ponto de vista operacional, isso pode ser contornado, pois todo cálculo pode sempre ser realizado com a normalização explícita, fazendo-se uma razão de integrais, onde a constante de normalização A é cancelada. No caso do momento linear que vimos acima, teríamos, por exemplo:

$$\langle p \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{p} \Psi dx}{\int \Psi^* \Psi dx} = \hbar k \frac{\int \Psi^* \Psi dx}{\int \Psi^* \Psi dx} = \hbar k$$

Partícula livre no espaço todo é uma situação idealizada que nunca ocorre. Um próton acelerado pelo Pelletron, por exemplo, corresponde a uma partícula livre desde a saída do acelerador, até o coletor de feixe (copo de Faraday) na câmara, no final da canalização em alto vácuo, ou seja, uma distância da ordem de 30 m. Para distâncias dessa ordem, a incerteza no momento do próton devido às limitações do princípio de incerteza é desprezível e a função de onda da partícula pode ser aproximada por uma onda plana.

Uma partícula livre para qual a incerteza na posição não é muito grande pode ser descrita por um “pacote de ondas” (superposição de muitas ondas planas). Entretanto, as dificuldades matemáticas para se tratar funções desse tipo são muito grandes e além disso, como já vimos, à medida que o tempo passa, aumenta a incerteza na posição da partícula devido à incerteza em sua velocidade e o pacote continuamente se alarga.

7.2 Potencial Degrau

Vejamos agora outra situação bastante simples, como a de uma bola de bilhar em uma mesa. Em toda a extensão da mesa, a bola está sujeita a um potencial constante (nulo), mas na borda ela encontra repentinamente um potencial maior. Imaginando que a bola consiga subir a barreira (uma rampa, como na figura 7.1b), ela precisa ter uma energia cinética maior que mgh , onde m é a massa da bola e h a altura da rampa, para passar a se mover no nível mais alto. Esquemáticamente, isso pode ser representado pelo potencial degrau (imaginando que o nível mais alto continue indefinidamente):

Vamos chamar de I a região onde o potencial é nulo ($x < 0$ “na mesa”) e de II a região em que o potencial é maior ($x > 0$ “sobre a rampa”).

7.2.1 Caso $E < V_0$:

$$x < 0 : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} = E\Phi \text{ ou } \frac{d^2\Phi}{dx^2} = -k_1^2\Phi; k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$x > 0 : -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} + V_0\Phi = E\Phi \text{ ou } \frac{d^2\Phi}{dx^2} = k_2^2\Phi; k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

7.2 Potencial Degrau

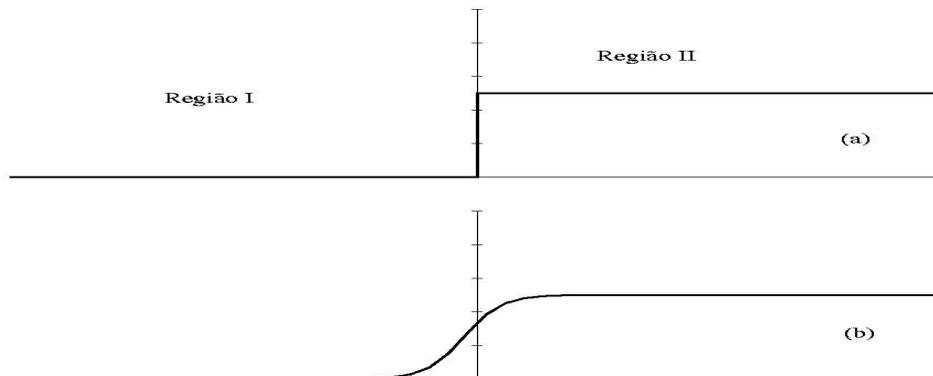


Figura 7.1: Potencial degrau e o equivalente físico gravitacional (rampa)

solução:

$$x < 0 : \Phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$x > 0 : \Phi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

Impondo agora as condições para que a solução da equação de Schroedinger tenha significado físico:

$$\begin{aligned} \Phi(x), \frac{d\Phi}{dx} & \text{ devem ser finitas} \\ \Phi(x), \frac{d\Phi}{dx} & \text{ devem ser contínuas} \\ \Phi(x), \frac{d\Phi}{dx} & \text{ devem ser unívocas} \end{aligned}$$

com isso devemos impor $D=0$ para que a função seja bem comportada no infinito. Para a continuidade da função devemos impor, em $x=0$:

$$\Phi_1(0) = \Phi_2(0) \Rightarrow A + B = C$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\Phi_1}{dx} \right|_{x=0} &= Aik_1e^{ik_1x} - Bik_1e^{-ik_1x} \Big|_{x=0} = ik_1(A - B) \\ \left. \frac{d\Phi_2}{dx} \right|_{x=0} &= -Ck_2e^{-k_2x} \Big|_{x=0} = -Ck_2 \end{aligned}$$

$$\begin{cases} A + B = C \\ A - B = iC \frac{k_2}{k_1} \end{cases}$$

$$(+): C\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right) = 2A \Rightarrow A = \frac{C}{2}\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)$$

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

$$(-) : C(1 - i\frac{k_2}{k_1}) = 2B \Rightarrow B = \frac{C}{2}(1 - i\frac{k_2}{k_1})$$

$$\Phi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2} \left[(1 + i\frac{k_2}{k_1})e^{ik_1x} + (1 - i\frac{k_2}{k_1})e^{-ik_1x} \right] & x \leq 0 \\ Ce^{-k_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Na região $x < 0$, a solução da equação de Schroedinger dependente do tempo pode ser escrita como:

$$\Psi(x,t) = \Phi(x)e^{-i\omega t} = Ae^{i(k_1x - \omega t)} + Be^{-i(k_1x + \omega t)}$$

onde o primeiro termo corresponde à onda incidente (caminhando da esquerda para a direita) e o segundo à onda refletida (direita para a esquerda). No caso de partículas livres como este, a interpretação do módulo quadrado da função de onda é mais claramente associado a um feixe paralelo e de densidade uniforme de partículas de mesma energia. $\Psi^*\Psi dx$ corresponde neste caso ao número de partículas (ou à fração das partículas) entre x e $x+dx$. O fluxo de partículas na direção da onda, ou seja o número de partículas que atravessa uma certa posição por unidade de tempo é dado pelo produto de $\Psi^*\Psi$ pela velocidade das partículas. O Coeficiente de reflexão é portanto dado por:

$$R = \frac{v_r \Psi_r^* \Psi_r}{v_i \Psi_i^* \Psi_i} = \frac{B^* B}{A^* A}$$

uma vez que $v_r = v_i$. Substituindo-se os valores de A e B em termos de C, k_1 e k_2 , encontra-se $R=1$, em pleno acordo com a previsão da mecânica clássica. Para $x > 0$, $\Psi^*\Psi = C^* C e^{-2k_2x}$. Nesta região, temos $E < V$ e portanto a energia cinética seria negativa. Classicamente esta é uma região proibida para as partículas. Do ponto de vista quântico, pode-se encontrar a partícula nesta região, sendo cada vez menos provável encontrar a partícula quanto maior o valor de x . A penetração da partícula na região proibida (por intervalos de tempo muito pequenos) é possível devido o princípio de incerteza. Durante um pequeno intervalo de tempo, a energia pode não se conservar. A profundidade da penetração também é muito pequena e pode ser caracterizada pela distância em que a probabilidade cai para cerca da metade de seu valor em $x=0$, correspondendo a uma penetração da ordem de $1/k_2 = \hbar/\sqrt{2m(V_o - E)}$.

É fácil verificar que a solução geral (incluindo a parte temporal da função de onda), corresponde a uma onda estacionária. Para isso, vamos escrever a solução para $x \leq 0$ em termos de senos e cossenos, substituindo $e^{ik_1x} = \cos k_1x + i \sin k_1x$ e chamando $\alpha = (1 + i\frac{k_2}{k_1})$:

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \frac{C}{2} [\alpha(\cos k_1x + i \sin k_1x) + \alpha^*(\cos k_1x - i \sin k_1x)] = \\ &= C \cos k_1x - C \frac{k_2}{k_1} \sin k_1x \end{aligned}$$

A função de onda completa é obtida multiplicando-se a função acima pela parte temporal $e^{-i\omega t}$, com $\omega = E/\hbar$:

7.2 Potencial Degrau

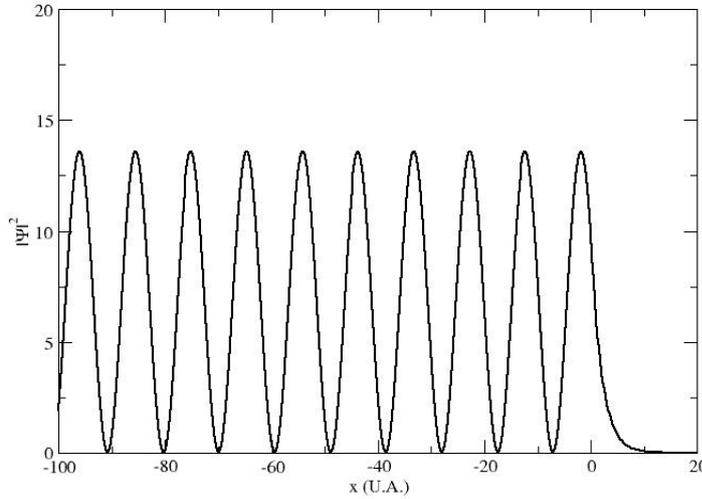


Figura 7.2:

$$\Psi(x,t) = C \left[\cos k_1 x - \frac{k_2}{k_1} \sin k_1 x \right] e^{-i\omega t}$$

Note que temos o produto de uma função que depende somente do tempo por outra que depende somente da posição, correspondendo portanto a uma onda estacionária. A densidade de probabilidade de encontrar a partícula no espaço ($|\Psi(x,t)|^2$) não depende do tempo:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\Phi(x)|^2 = C^* C \left(\cos k_1 x - \frac{k_2}{k_1} \sin k_1 x \right)^2$$

O gráfico da densidade de probabilidade, incluindo a região $x > 0$ é visto na figura 7.2.

7.2.2 Caso $E > V_0$

$$x < 0 : \Phi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$x > 0 : \Phi_2(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Considerando a situação inicial de uma partícula (ou feixe de partículas) vindo da esquerda ($-\infty$) para a direita, temos $D = 0$, pois não há partículas vindo de $+\infty$. Aplicando as condições de continuidade de Φ e sua derivada em $x=0$, temos:

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

$$\begin{aligned} \Phi_1(0) &= \Phi_2(0) \Rightarrow A + B = C \\ \frac{d\Phi_1}{dx} \Big|_{x=0} &= \frac{d\Phi_2}{dx} \Big|_{x=0} \Rightarrow (A - B) = C \frac{k_2}{k_1} \\ (+) : A &= \frac{C}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \quad (-) B = \frac{C}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \end{aligned}$$

As funções de onda são:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) e^{ik_1x} + \frac{C}{2} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) e^{-ik_1x} & \text{para } x < 0 \\ C e^{ik_2x} & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

Fazendo $C = F \frac{2k_1}{k_1+k_2}$ onde F é uma constante arbitrária e incluindo a parte temporal da função de onda, temos:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} F e^{i(k_1x-\omega t)} + F \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} e^{-i(k_1x+\omega t)} & \text{para } x < 0 \\ F \frac{2k_1}{k_1+k_2} e^{i(k_2x-\omega t)} & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

O primeiro termo da função para $x < 0$ corresponde portanto à onda (fluxo) incidente e o segundo à onda refletida, este sem equivalente clássico. O coeficiente de reflexão é dado por:

$$R = \frac{vB^*B}{vA^*A} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Para $x > 0$ só há, obviamente a onda transmitida, pois não há nada que possa refletir as partículas transmitidas. O coeficiente de transmissão é definido como:

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

sendo v_1 a velocidade das partículas incidentes e v_2 a das partículas transmitidas:

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}; \quad v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

portanto

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Note que:

$$T + R = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = 1$$

Os coeficientes de reflexão e transmissão podem ainda ser escritos em termos de E e V_o :

$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_o}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_o}{E}}} \right)^2 \quad \text{para } \frac{E}{V_o} > 1$$

7.3 Barreira de Potencial

e

$$R = 1 - T = 1 \text{ para } \frac{E}{V_o} \leq 1$$

Note também que a reflexão ocorre da mesma maneira quando a partícula vem de uma região com potencial constante e “cai” numa região de potencial menor (ou nulo). O fenômeno de reflexão descrito acima é devido basicamente à passagem abrupta da partícula de um potencial para outro. Este tipo de reflexão já era conhecido na óptica, quando a luz passa, perpendicularmente entre dois meios com diferentes índices de refração.

7.3 Barreira de Potencial

Este é um dos problemas simples para o qual podemos resolver analiticamente e cuja solução traz em evidência fenômenos muito interessantes, com aplicações em muitos problemas físicos, como o tunelamento quântico, também conhecido como penetração de barreira. Consideremos uma partícula, vindo de $x = -\infty$ em direção à barreira de potencial vista na figura 7.3, definida por:

$$V(x) = \begin{cases} V_o & \text{para } 0 < x < a \\ 0 & \text{para } x \text{ fora deste intervalo} \end{cases}$$

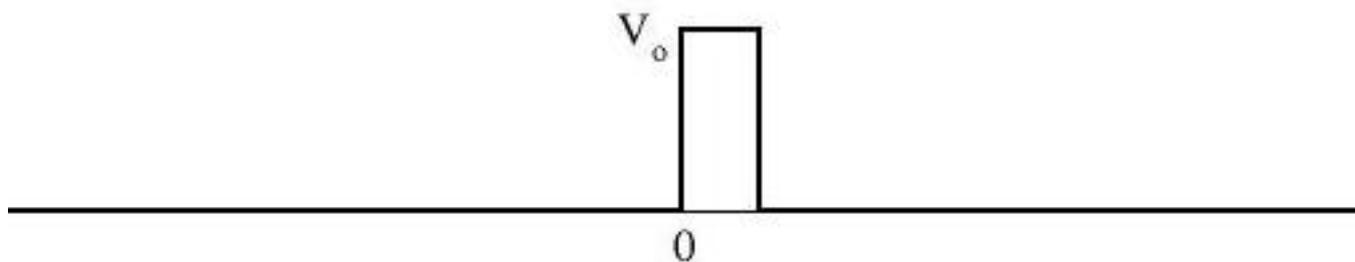


Figura 7.3: Barreira de potencial de altura V_o

7.3.1 Caso $E > V_o$

Consideremos agora o caso de uma barreira de potencial, ou seja a partícula se move sob ação de um potencial nulo, exceto numa pequena região, entre $x=0$ e $x=a$, onde o potencial é constante e igual a V_o . Definindo como I, II e III as regiões $x < 0$, $0 \leq x \leq a$ e $x > a$,

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

respectivamente, as soluções da equação de Schroedinger independente do tempo nessas regiões são:

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & (x < 0) \\ \Phi_3(x) = Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} & (x > a) \\ \Phi_2(x) = Fe^{ik_2x} + Ge^{-ik_2x} & (0 < x < a) \end{cases}$$

Não há ondas vindo de $+\infty \rightarrow 0$ e portanto $D = 0$

$$\begin{cases} A + B = F + G & (\Phi_1(0) = \Phi_2(0)) \\ k_1(A - B) = k_2(F - G) & \left(\frac{d\Phi_1}{dx}\Big|_0 = \frac{d\Phi_2}{dx}\Big|_0\right) \end{cases} \quad (a)$$

$$\begin{cases} Fe^{ik_2a} + Ge^{-ik_2a} = Ce^{ik_1a} \\ k_2(Fe^{ik_2a} - Ge^{-ik_2a}) = k_1Ce^{ik_1a} \end{cases} \quad (b)$$

de (a):

$$2A = F\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) + G\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)$$

$$2B = F\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) + G\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)$$

de (b):

$$2Fe^{ik_2a} = Ce^{ik_1a}\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \text{ ou } 2F = Ce^{i(k_1-k_2)a}\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)$$

$$2Ge^{-ik_2a} = Ce^{ik_1a}\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \quad 2G = Ce^{i(k_1+k_2)a}\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)$$

$$2A = \frac{C}{2}e^{i(k_1-k_2)a}\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) + \frac{C}{2}e^{i(k_1+k_2)a}\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)$$

$$= \frac{C}{2k_1k_2} \left(e^{i(k_1-k_2)a}(k_1+k_2)^2 - e^{i(k_1+k_2)a}(k_1-k_2)^2 \right) =$$

$$= \frac{Ce^{ik_1a}}{2k_1k_2} \left(e^{-ik_2a}(k_1+k_2)^2 - e^{ik_2a}(k_1-k_2)^2 \right)$$

$$\frac{A}{C} = \frac{e^{ik_1a}e^{-ik_2a}}{4k_1k_2} \left((k_1+k_2)^2 - e^{2ik_2a}(k_1-k_2)^2 \right) = \frac{\left((k_1+k_2)^2 - e^{2ik_2a}(k_1-k_2)^2 \right)}{4k_1k_2e^{-ik_1a}e^{-ik_2a}}$$

Coefficiente de Transmissão (velocidades são as mesmas antes e depois da barreira):

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

$$\frac{A^*A}{C^*C} = \frac{[(k_1+k_2)^2 - (k_1-k_2)^2e^{2ik_2a}][(k_1+k_2)^2 - (k_1-k_2)^2e^{-2ik_2a}]}{16k_1^2k_2^2} =$$

7.3 Barreira de Potencial

$$\begin{aligned}
 &= \frac{(k_1 + k_2)^4 - (k_1 + k_2)^2(k_1 - k_2)^2(e^{2ik_2a} + e^{-2ik_2a}) + (k_1 - k_2)^4}{16k_1^2k_2^2} = \\
 &= \frac{(k_1 + k_2)^4 + 4(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2a - 2(k_1^2 - k_2^2)^2 + (k_1 - k_2)^4}{16k_1^2k_2^2} =
 \end{aligned}$$

fazendo $k_s = k_1 + k_2$ e $k_d = k_1 - k_2$, temos:

$$\begin{aligned}
 \frac{A^*A}{C^*C} &= \frac{k_s^4 - 2k_s^2k_d^2 + k_d^4 + 4(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2a}{16k_1^2k_2^2} = \frac{(k_s^2 - k_d^2)^2 + 4(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2a}{16k_1^2k_2^2} = \\
 &= \frac{16k_1^2k_2^2 + 4\left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2mV_o}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2 k_2a}{16k_1^2k_2^2} = \\
 &= 1 + \frac{\left(\frac{2mV_o}{\hbar^2}\right)^2 \sin^2 k_2a}{4\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{2m(E-V_o)}{\hbar^2}} = 1 + \frac{\sin^2 k_2a}{4\frac{E}{V_o}\left(\frac{E}{V_o} - 1\right)}
 \end{aligned}$$

Portanto,

$$T = \frac{C^*C}{A^*A} = \left[1 + \frac{\sin^2 k_2a}{4\frac{E}{V_o}\left(\frac{E}{V_o} - 1\right)} \right]^{-1}$$

7.3.2 Caso $E < V_o$

Neste caso, classicamente toda partícula será refletida ao bater na barreira. As funções de onda para as regiões I e III são idênticas às do caso anterior, sendo que na região II a solução da equação de Schroedinger será:

$$\Psi_2(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x}, \quad k_2 = \sqrt{2m(V_o - E)}/\hbar$$

Novamente, como não há inicialmente onda vindo de $+\infty$, temos $D=0$. O procedimento algébrico para a obtenção dos coeficientes das funções de onda é análogo ao do caso anterior, trocando-se ik_2 do primeiro caso por k_2 . O coeficiente de transmissão será dado por:

$$T = \frac{C^*Cv_3}{A^*Av_1} = \left[1 + \frac{(e^{k_2a} - e^{-k_2a})^2}{16\frac{E}{V_o}\left(1 - \frac{E}{V_o}\right)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{\sinh^2 k_2a}{4\frac{E}{V_o}\left(1 - \frac{E}{V_o}\right)} \right]^{-1}$$

se $k_2a \gg 1$, a expressão acima pode ser aproximada por:

$$T \simeq 16\frac{E}{V_o}\left(1 - \frac{E}{V_o}\right)e^{-2k_2a}$$

A figura 7.4 mostra a densidade de probabilidade $\Psi^*\Psi$ para as três regiões. Na região I, a superposição da onda incidente com a refletida, de mesmo comprimento de onda,

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

resulta num padrão de onda estacionária. Na região II temos uma exponencial decrescente e finalmente a onda transmitida, sendo uma onda plana, corresponderá a uma densidade de probabilidade constante nesta região. Este resultado mostra que uma pequena parcela das partículas incidentes, consegue atravessar a barreira. Novamente isso é uma consequência do princípio de incerteza, que permite que a conservação de energia seja violada por um intervalo de tempo muito pequeno, enquanto a partícula atravessa a barreira.

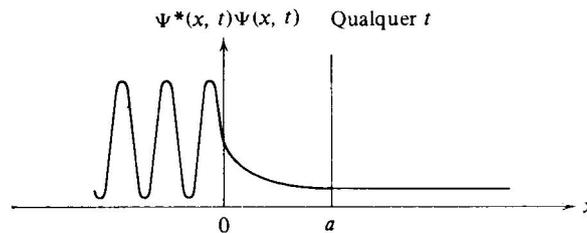


Figura 7.4: Densidade de probabilidade - barreira de potencial, $E < V_0$

Como a partícula não tem energia para ultrapassar a barreira “por cima”, este processo é chamado de tunelamento. Vários processos que ocorrem na natureza dependem deste fenômeno. Um dos mais importantes é o da fusão de dois prótons no interior do Sol, o mecanismo básico de produção de energia nesse tipo de estrela. A energia cinética decorrente da temperatura do Sol é insuficiente para vencer a barreira de repulsão coulombiana entre dois prótons. Somente uma pequena fração dos prótons teriam energia acima deste valor e a taxa de fusão e portanto de produção de energia, seria cerca de 1000 vezes menor que a realizada pelo Sol. O processo de fusão de dois prótons é dominado pelo tunelamento dessas partículas pela barreira coulombiana. O diodo de efeito tunel é um dispositivo eletrônico disponível comercialmente, baseado neste efeito quântico. Com técnicas especiais de construção, pode-se fazer um diodo semiconductor cuja barreira de potencial é extremamente fina, propiciando que partículas a atravessem por tunelamento. As consequências são uma inversão na curva característica corrente x tensão desses dispositivos, como mostrado na figura 7.5. Numa pequena região, há uma reversão da curva e neste trecho, a derivada dV/dI é negativa, correspondendo a uma resistência negativa. Dispositivos como esse podem ser utilizado em circuitos osciladores ou de chaveamento de altíssimas frequências.

O decaimento radiativo por emissão de partículas alfa, que ocorre em vários elementos pesados próximos ao urânio também depende do tunelamento. Nesse decaimento, as partículas alfa são emitidas com energia cinética de cerca de 5 MeV. Como essa energia é medida longe do núcleo, onde o potencial é nulo, podemos supor que este é o valor da energia total da partícula alfa dentro do núcleo. Se tomarmos uma partícula alfa com essa energia se aproximando de um núcleo, por exemplo de Tório (Th), a distância de maior aproximação, quando toda a energia está na forma de energia potencial, teremos algo da ordem de 50 Fm ($5,0 \cdot 10^{-14}$ m). Se considerarmos o raio do núcleo de Th da ordem de 10Fm, o valor da barreira coulombiana nessa distância será:

7.3 Barreira de Potencial

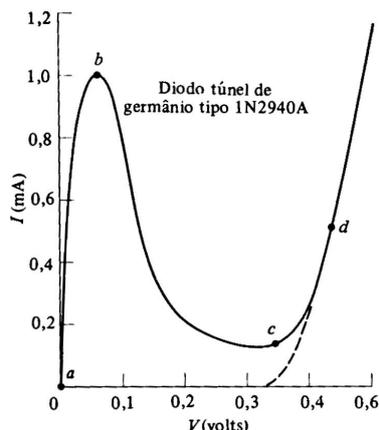


Figura 7.5: Curva característica de um diodo túnel.

$$V(r = 10^{-14}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zze^2}{r} \simeq 25 \cdot 10^6 \text{ eV}$$

Como para distâncias menores que o raio nuclear esta partícula alfa está ligada ao núcleo, e sabendo-se que sua energia total é 5 MeV, para escapar, ela deve tunelar a barreira de altura máxima de cerca de 25 MeV. Embora não seja uma barreira de altura constante como a que estudamos, o problema pode ser resolvido de maneira análoga, substituindo-se a barreira coulombiana por uma série de barreiras de pequena largura e alturas decrescentes. Um cálculo aproximado pode ser feito trocando-se a barreira original por uma barreira média equivalente. Por simplicidade, vamos tomar uma barreira de altura 20 MeV e largura $a = 20 \text{ Fm}$. Neste caso, temos o produto $k_2a = \sqrt{2mc^2V_0a^2(1 - E/V_0)}/\hbar c \simeq 34$ e podemos usar a expressão aproximada para T:

$$T \simeq 10^{-29}$$

Para encontrarmos o tempo médio para a partícula alfa escapar, devemos estimar qual a frequência com que ela colide com as paredes do núcleo. Supondo o potencial constante no interior do núcleo (esta aproximação é utilizada em muitos problemas de física nuclear), a energia cinética da partícula alfa no interior do núcleo será constante e dada por $E_c = 5 - V \text{ MeV}$, onde $V < 0$ é o potencial nuclear. sabemos que V corresponde a algumas dezenas de MeV. Tomando $V = -35 \text{ MeV}$, temos $E_c = 40 \text{ MeV}$ e portanto o módulo da velocidade da partícula alfa dentro do núcleo será:

$$\frac{v}{c} = \sqrt{\frac{2E_c}{mc^2}} \simeq 0.2$$

Com o diâmetro nuclear da ordem de 20 Fm, a partícula alfa colide cerca de 10^{21} vezes por segundo com as paredes. Tendo uma chance de escapar a cada 10^{-29} colisões, em média ela levará $10^{29}/10^{21} = 10^8 \text{ s}$, cerca de três anos para escapar. As vidas médias para

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

decaimento alfa de núcleos nessa região varia muito, mas este valor está dentro da faixa de valores.

7.4 Partícula em Uma Caixa (Poço Quadrado)

Um outro caso simples e interessante corresponde ao de uma partícula dentro de uma caixa unidimensional, ou seja, dentro da caixa o potencial é nulo e nas paredes tem valor V_0 . Este problema é também freqüentemente denominado *poço de potencial quadrado*. Vimos anteriormente esta situação do ponto de vista do princípio de incerteza e determinamos o valor mínimo para a energia da partícula. Vejamos agora a solução completa do problema.

7.4.1 Poço Infinito

A forma mais simples corresponde a fazer as paredes da caixa muito rígidas, ou seja, com $V_0 \rightarrow \infty$:

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

Na região dentro do poço, a solução geral da eq. de Schroedinger independente do tempo é a mesma que a encontrada anteriormente em situações análogas:

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad \text{onde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Para as regiões $x > a/2$ e $x < -a/2$ onde o potencial é infinito, a função de onda deve ser identicamente nula. Aplicando a condição de continuidade da função de onda nos pontos $\pm a/2$, temos:

$$\begin{aligned} A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} &= 0 \quad (\text{em } x = \frac{a}{2}) \\ A \sin -\frac{ka}{2} + B \cos -\frac{ka}{2} &= 0 \quad (\text{em } x = -\frac{a}{2}) \end{aligned}$$

Somando e subtraindo as duas equações acima, obtemos as relações:

$$\begin{aligned} 2B \cos \frac{ka}{2} &= 0 \\ 2A \sin \frac{ka}{2} &= 0 \end{aligned}$$

É fácil notar que não há nenhum valor de k que satisfaça simultaneamente as duas condições acima. No entanto, podemos escolher uma das constantes A ou B iguais a zero, e impor, no termo com a constante não nula, a condição de que o seno ou cosseno se anule:

$$\begin{aligned} A = 0 \text{ e } \cos \frac{ka}{2} = 0 &\Rightarrow \frac{ka}{2} = n\frac{\pi}{2}, n = 1, 3, 5, \dots \\ B = 0 \text{ e } \sin \frac{ka}{2} = 0 &\Rightarrow \frac{ka}{2} = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Portanto temos:

7.4 Partícula em Uma Caixa (Poço Quadrado)

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

Como para ambos os casos temos a relação $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, temos a seguinte expressão para as energias possíveis da partícula na caixa:

$$E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, n = 1,2,3,\dots$$

7.4.2 Poço Finito

Uma situação mais realista corresponde ao poço de potencial de altura finita V_o :

$$V(x) = \begin{cases} V_o \text{ para } x \leq -a/2 \text{ ou } x \geq a/2 \\ 0 \text{ para } -a/2 < x < a/2 \end{cases}$$

Elétrons no metal estão em uma condição semelhante a essa. As partículas no núcleo atômico também podem, em primeira aproximação ser descritas por um conjunto de partículas num poço de potencial quadrado de altura V_o . Vamos considerar aqui somente o caso de partículas “dentro do poço”, ou seja para $E < V_o$ (partículas ligadas). Vamos também numerar as regiões $x \leq -a/2$, $-a/2 < x < a/2$ e $x \geq a/2$ como I, II e III. A solução da equação de Schroedinger na região II é a mesma do caso anterior:

$$\Psi_2(x) = C \sin k_2 x + D \cos k_2 x \text{ com } k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Nas regiões I e III, temos para a equação de Schroedinger:

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

ou

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} \Psi = k^2 \Psi$$

onde $k_1 = k_3 = \sqrt{2m(V_o - E)}/\hbar$. A solução geral dessa equação corresponde a exponenciais reais:

$$\Psi(x) = A'e^{kx} + B'e^{-kx}$$

de modo que nas três regiões, as soluções são:

$$\begin{cases} \Psi_1(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx} \text{ região I} \\ \Psi_2(x) = C \sin k_2 x + D \cos k_2 x \text{ região II} \\ \Psi_3(x) = Ee^{-kx} + Fe^{kx} \text{ região III} \end{cases}$$

Agora, aplicando as condições sobre o comportamento da função de onda para $x \rightarrow \pm\infty$, devemos impor $A=F=0$. Para encontrar os valores das quatro constantes restantes, devemos

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

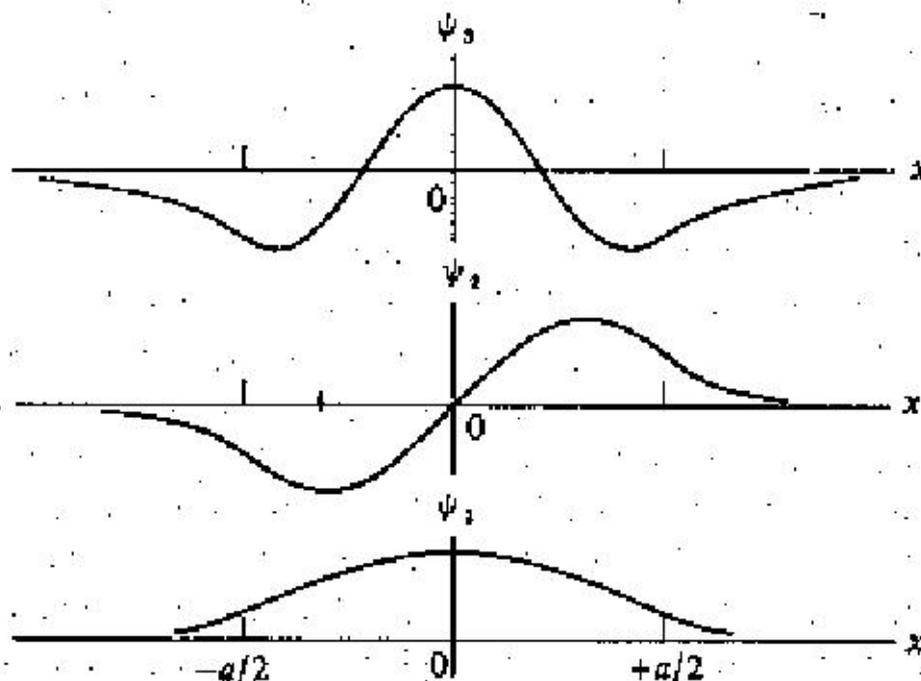


Figura 7.6: Soluções para o poço quadrado finito: $n=1, 2, 3$

então impor as condições de continuidade da função de onda e sua derivada, nos pontos $x = \pm a/2$:

Continuidade de Ψ em $x = \pm a/2$:

$$\begin{cases} Be^{-k_1 a/2} = -C \sin \frac{k_2 a}{2} + D \cos \frac{k_2 a}{2} \\ Ee^{-k_1 a/2} = C \sin \frac{k_2 a}{2} + D \cos \frac{k_2 a}{2} \end{cases} \quad (I)$$

Continuidade das derivadas em $x = \pm a/2$:

$$\begin{cases} Bk_1 e^{-k_1 a/2} = k_2 C \cos \frac{k_2 a}{2} + k_2 D \sin \frac{k_2 a}{2} \\ -k_1 E e^{-k_1 a/2} = k_2 C \cos \frac{k_2 a}{2} - k_2 D \sin \frac{k_2 a}{2} \end{cases} \quad (II)$$

Somando e subtraindo as relações de (I):

$$\begin{aligned} (B + E)e^{-k_1 a/2} &= 2D \cos \frac{k_2 a}{2} \quad (1) \\ (B - E)e^{-k_1 a/2} &= -2C \sin \frac{k_2 a}{2} \quad (2) \end{aligned}$$

Somando e subtraindo as relações de (II):

$$\begin{aligned} (B - E)k_1 e^{-k_1 a/2} &= 2k_2 C \cos \frac{k_2 a}{2} \quad (3) \\ (B + E)k_1 e^{-k_1 a/2} &= 2k_2 D \sin \frac{k_2 a}{2} \quad (4) \end{aligned}$$

Relações entre k_1 e k_2 podem ser obtidas dividindo-se as equações acima ($4 \div 1$ e $3 \div 2$). Entretanto, para fazer isso, devemos garantir que o denominador não seja nulo. No primeiro

7.4 Partícula em Uma Caixa (Poço Quadrado)

caso, impondo $B + E \neq 0$ e $D \neq 0$, temos:

$$k_2 \tan \frac{k_2 a}{2} = k_1 \quad (i)$$

no outro caso, se $B - E \neq 0$ e $C \neq 0$, temos:

$$k_2 \cot \frac{k_2 a}{2} = -k_1 \quad (ii)$$

As duas condições não podem ser satisfeitas simultaneamente. Isso pode ser verificado somando-se as duas expressões acima, que resulta em:

$$k_2 \left(\tan \frac{k_2 a}{2} + \cot \frac{k_2 a}{2} \right) = 0$$

Multiplicando a relação acima por $\tan k_2 a/2$, temos a relação $\tan^2 k_2 a/2 = -1$, o que é impossível, visto que o argumento da tangente é real. Portanto devemos impor $B-E=C=0$ e obter a primeira das relações acima, ou impor $B+E=D=0$ e obter a segunda das relações mostradas acima. No primeiro caso, substituindo as relações entre os coeficientes nas expressões (I) e (II), obtemos para as funções de onda:

$$\Psi_p(x) = \begin{cases} D \cos \frac{k_2 a}{2} e^{k_1 a/2} e^{k_1 x} & \text{para } x < -\frac{a}{2} \\ D \cos k_2 x & \text{para } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ D \cos \frac{k_2 a}{2} e^{k_1 a/2} e^{-k_1 x} & \text{para } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

Substituindo as expressões para k_1 e k_2 na relação (i), temos:

$$\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \tan \left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \right) = \sqrt{m(V_o - E)a^2/2\hbar^2}$$

multiplicando a expressão acima por $\frac{a}{2}$ e definindo $\epsilon = \sqrt{mEa^2/2\hbar^2}$, temos:

$$\epsilon \tan \epsilon = \sqrt{\frac{mV_o a^2}{2\hbar^2} - \epsilon^2}$$

Na expressão acima, não há como isolar e obter analiticamente o valor de ϵ . Entretanto, definido as funções $p(\epsilon) = \epsilon \tan \epsilon$ e $q(\epsilon) = \sqrt{\frac{mV_o a^2}{2\hbar^2} - \epsilon^2}$ como o segundo membro da expressão acima, os valores possíveis de ϵ podem ser visualizados graficando-se as duas funções e determinando-se os pontos de intersecção, conforme visto na figura 7.7.

As soluções para os três valores mais baixos de E são vistas na figura 7.6 . Pode-se verificar ainda que para estados com $E \ll V_o$, os valores de E se aproximam daqueles que encontramos para o poço infinito. De maneira análoga procede-se para encontrar as soluções do segundo tipo. Neste caso, a equação a ser resolvida será:

$$-\epsilon \cot \epsilon = \sqrt{mV_o a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2}$$

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

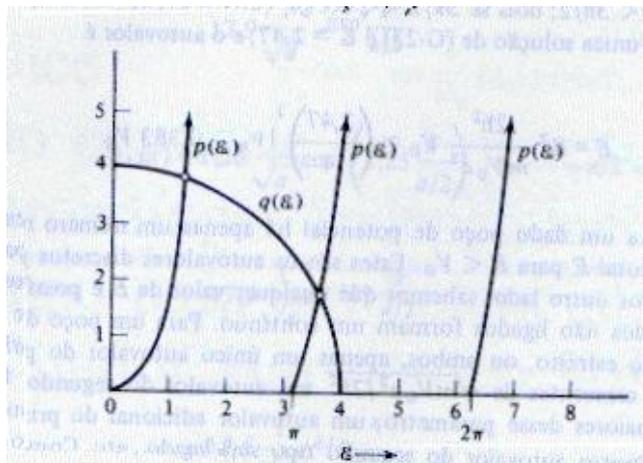


Figura 7.7: Solução gráfica para a equação $p(\epsilon) = q(\epsilon)$

7.5 O Oscilador Harmônico

O caso mais realista que podemos resolver analiticamente neste curso corresponde ao do oscilador harmônico. O oscilador harmônico tem grande importância na física, pois muitos problemas de sistemas ligados em equilíbrio, como moléculas, átomos ou moléculas em uma rede cristalina, e mesmo partículas no núcleo atômico, podem, para pequenos deslocamentos da posição de equilíbrio (pequenas energias de excitação) ser descritos por um potencial do tipo:

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2; F = -\frac{dV}{dx} = -Kx$$

O potencial mostrado na figura 7.8 é típico da ligação de moléculas di-atômicas, como O_2 ou N_2 . Classicamente sabemos que uma partícula de massa m sob ação desse potencial, para pequenos deslocamentos em relação à posição de equilíbrio, executa movimento harmônico, descrito pela equação:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -Kx; \omega^2 = \frac{K}{m}$$

Cuja solução é:

$$x(t) = A \cos(\omega t + \varphi)$$

$$E = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}KA^2$$

A amplitude da vibração é $x_o = \sqrt{2E/K}$ onde E é a energia total do sistema e pode ter qualquer valor. No caso quântico, temos que resolver a equação:

7.5 O Oscilador Harmônico

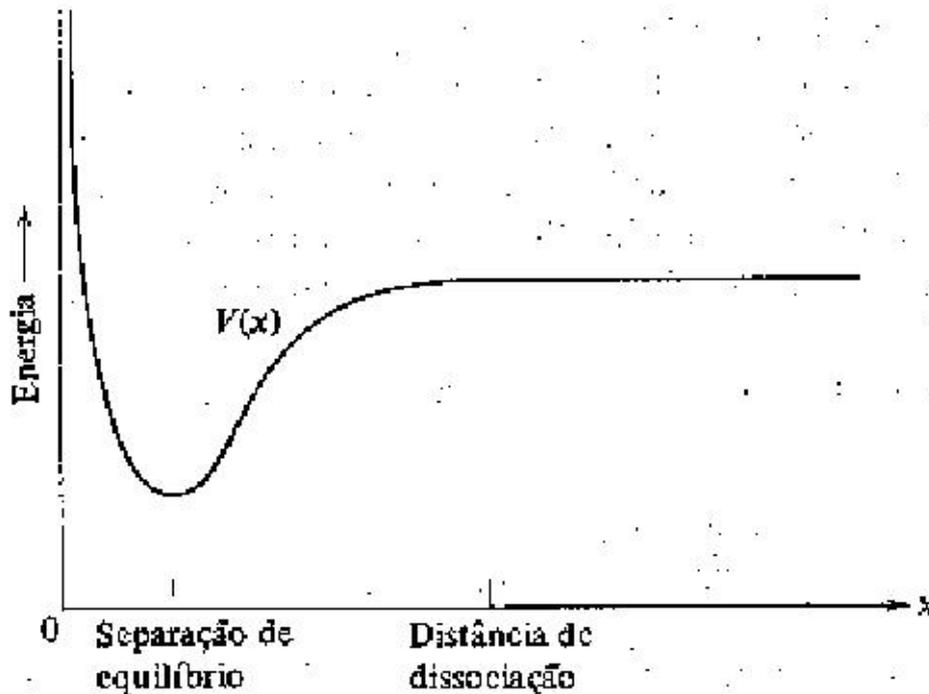


Figura 7.8: Potencial sentido por um átomo, numa molécula di-atômica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2\Phi(x) = E\Phi(x)$$

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 \right] \Phi = 0; \quad \omega^2 = \frac{K}{m}$$

definindo $\beta = 2mE/\hbar^2$ e $\alpha = m\omega/\hbar$:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2x^2)\Phi = 0$$

mudança de variável: $u = \sqrt{\alpha}x$:

$$\frac{d\Phi}{dx} = \frac{d\Phi}{du} \frac{du}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d\Phi}{du}; \quad \frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{d}{du} \left(\frac{d\Phi}{dx} \right) \frac{du}{dx} = \alpha \frac{d^2\Phi}{du^2}$$

e portanto a equação de Schroedinger fica:

$$\alpha \frac{d^2\Phi}{du^2} + (\beta - \alpha u^2)\Phi = 0 \text{ ou } \frac{d^2\Phi}{du^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right) \Phi = 0$$

Para encontrar a solução desta equação, antes vamos tentar descobrir o comportamento assintótico de Φ para grandes valores de u . Neste caso, podemos escrever a equação acima como:

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

$$\frac{d^2\Phi_a}{du^2} - u^2\Phi_a = 0 \text{ ou } \frac{d^2\Phi_a}{du^2} = u^2\Phi_a$$

podemos facilmente verificar que a solução assintótica $\Phi_a(u)$ é dada por:

$$\Phi_a(u) = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}$$

calculando as derivadas:

$$\frac{d\Phi_a}{du} = -Aue^{-u^2/2} + Bue^{u^2/2}$$

e

$$\frac{d^2\Phi_a}{du^2} = Au^2e^{-u^2/2} - Ae^{-u^2/2} + Bu^2e^{u^2/2} + Be^{u^2/2} = (u^2 - 1)Ae^{-u^2/2} + (u^2 + 1)Be^{u^2/2}$$

o que para grandes valores de u se reduz a:

$$\frac{d^2\Phi_a}{du^2} = u^2(Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}) = u^2\Phi_a$$

Para que esta solução seja uma solução fisicamente aceitável para a equação de Schroedinger, ela não pode divergir para $u \rightarrow \pm\infty$ e portanto devemos escolher $B = 0$. A solução da equação de Schoedinger para qualquer valor de u , pode então ser fatorada como:

$$\Phi(u) = Ae^{-u^2/2}H(u)$$

onde $H(u)$ deve ser uma função que varie lentamente para $u \rightarrow \pm\infty$, ou seja: cresça mais lentamente que $e^{u^2/2}$ de modo que no produto acima, para grandes valores de u prevaleça o comportamento assintótico que foi obtido. Calculemos agora a derivada segunda desta função, para obtermos então a equação para $H(u)$:

$$\frac{d\Phi}{du} = -Aue^{-u^2/2}H(u) + Ae^{-u^2/2}\frac{dH}{du}$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi}{du^2} &= -Ae^{-u^2/2}H(u) + Au^2e^{-u^2/2}H(u) - Aue^{-u^2/2}\frac{dH}{du} - Aue^{-u^2/2}\frac{dH}{du} + Ae^{-u^2/2}\frac{d^2H}{du^2} = \\ &= Ae^{-u^2/2} \left(-H + u^2H - 2u\frac{dH}{du} + \frac{d^2H}{du^2} \right) \end{aligned}$$

substituindo na equação de Schoedinger, temos:

$$Ae^{-u^2/2} \left(-H + u^2H - 2u\frac{dH}{du} + \frac{d^2H}{du^2} \right) + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right) Ae^{-u^2/2}H = 0$$

ou

7.5 O Oscilador Harmônico

$$\frac{d^2 H}{du^2} - 2u \frac{dH}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1 \right) H = 0$$

Como sabemos que a solução $H(u)$ deve ser uma função bem comportada, ela pode sempre ser escrita na forma de uma série de potências. Definindo a expansão de $H(u)$ como:

$$H(u) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l u^l = a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + \dots$$

as derivadas de $H(u)$ podem então ser escritas como:

$$\frac{dH}{du} = \sum_{l=0}^{\infty} l a_l u^{l-1} = a_1 + 2a_2 u + 3a_3 u^2 + \dots$$

$$\frac{d^2 H}{du^2} = \sum_{l=0}^{\infty} l(l-1) a_l u^{l-2} = 2 \cdot 1 a_2 + 3 \cdot 2 a_3 u + 4 \cdot 3 a_4 u^2 + \dots$$

Substituindo na equação para $H(u)$, temos:

$$\sum l(l-1) a_l u^{l-2} - 2u \sum l a_l u^{l-1} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1 \right) \sum a_l u^l = 0$$

ou

$$\sum_{l=0}^{\infty} l(l-1) a_l u^{l-2} + \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{\beta}{\alpha} - 2l - 1 \right) a_l u^l = 0$$

na primeira somatória, os dois primeiros termos são nulos. Podemos redefinir os índices trocando $l \rightarrow l + 2$ de modo que a equação acima fica:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (l+2)(l+1) a_{l+2} u^l + \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{\beta}{\alpha} - 2l - 1 \right) a_l u^l = 0$$

ou

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left((l+2)(l+1) a_{l+2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 2l - 1 \right) a_l \right) u^l = 0$$

para que esta expressão seja nula para qualquer valor de u , devemos impor que os coeficientes de u^l sejam nulos e então obtemos a seguinte relação entre os a_l :

$$a_{l+2} = - \frac{\frac{\beta}{\alpha} - (2l+1)}{(l+1)(l+2)} a_l$$

com esta expressão, dado a_0 podemos calcular todos os outros coeficientes pares. Dado a_1 podemos calcular todos os ímpares. A solução $H(u)$ pode então ser dividida em duas séries distintas:

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

$$H_p(u) = a_0(1 + \frac{a_2}{a_0}u^2 + \frac{a_4}{a_0}u^4 + \dots)$$

e

$$H_i(u) = a_1u(1 + \frac{a_3}{a_1}u^2 + \frac{a_5}{a_1}u^4 + \dots)$$

Com $H(u) = H_p(u) + H_i(u)$. Resta então verificar se o comportamento da série obtida, para grandes valores de u , respeita as condições necessárias. Para isso, verifiquemos o comportamento das razões a_{l+2}/a_l para grandes valores de l :

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{a_{l+2}}{a_l} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{\frac{\beta}{\alpha} - (2l + 1)}{(l + 1)(l + 2)} = \frac{2}{l}$$

esta razão de coeficientes, para grandes valores de l , é idêntica à mesma razão na expansão em série de potências da função e^{u^2} :

$$e^{u^2} = 1 + u^2 + \frac{u^4}{2!} + \frac{u^6}{3!} + \dots + \frac{u^l}{(\frac{l}{2})!} + \frac{u^{l+2}}{(\frac{l+2}{2})!} + \dots$$

portanto, a razão entre dois coeficientes consecutivos, a_{l+2} e a_l é:

$$\frac{a_{l+2}}{a_l} = \frac{(\frac{l}{2})!}{(\frac{l}{2} + 1)!} = \frac{(\frac{l}{2})!}{(\frac{l}{2} + 1)(\frac{l}{2})!} = \frac{1}{\frac{l}{2} + 1}$$

que para grandes valores de l é idêntica à razão que obtivemos para os coeficientes das funções H_p e H_i . Embora para pequenos valores de l os coeficientes sejam diferentes, quando queremos comparar o comportamento dessas funções para grandes valores de u , os termos com pequenas potências de u (pequenos valores de l) não são importantes e portanto, verificamos que para grandes valores de u , $H(u) \sim e^{u^2}$. Portanto,

$$\lim_{u \rightarrow \infty} Ae^{-u^2/2}H(u) = Ae^{-u^2/2}(a_0e^{u^2} + a_1ue^{u^2}) = a_0Ae^{u^2/2} + a_1Aue^{u^2/2}$$

e portanto será divergente, contrário à condição imposta inicialmente para H . A menos que para um dado valor de l , por exemplo $l=n$, o coeficiente a_{l+2} para uma das séries se anule e portanto todos os outros com l maior. Supondo que esta condição se dê para um l par, $H_p(u)$ será agora um polinômio e se fizermos $a_1 = 0$ a outra série $H_i(u)$ será nula, e o comportamento assintótico para $\Phi(u)$ será obedecido. De modo análogo, se a_{l+2} se anular para um valor ímpar de l e fizermos $a_0 = 0$. Para que um dado coeficiente a_{l+2} se anule para $l=n$, devemos impor a condição:

$$\frac{\beta}{\alpha} - (2n + 1) = 0 \text{ ou } \beta = (2n + 1)\alpha$$

substituindo as expressões para α e β na expressão acima, obtém-se:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = (2n + 1)\frac{m\omega}{\hbar}$$

7.5 O Oscilador Harmônico

ou

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0,1,2,3,\dots$$

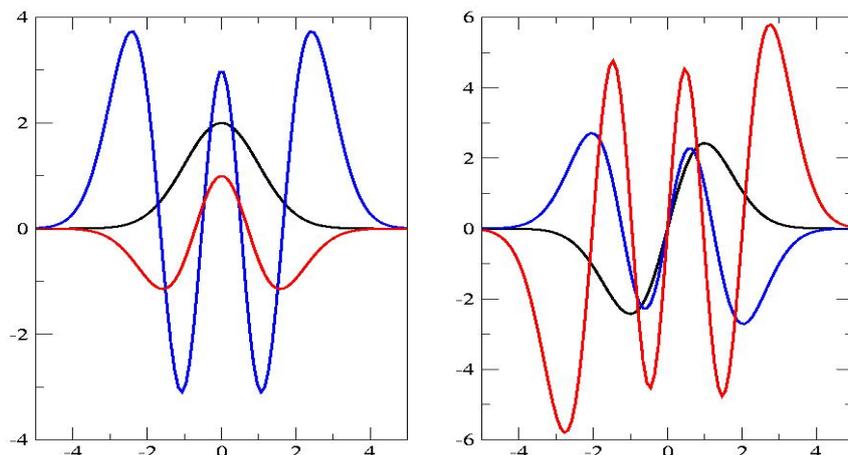


Figura 7.9: Funções de Onda do Oscilador Harmônico

que corresponde à quantização da energia para o oscilador harmônico. As funções de ondas correspondentes são:

$$\begin{aligned} n = 0 : \Phi_0(u) &= A_0 e^{-u^2/2} \\ n = 1 : \Phi_1(u) &= A_1 2u e^{-u^2/2} \\ n = 2 : \Phi_2(u) &= A_2 (4u^2 - 2) e^{-u^2/2} \\ n = 3 : \Phi_3(u) &= A_3 (8u^3 - 12u) e^{-u^2/2} \\ n = 4 : \Phi_4(u) &= A_4 (16u^4 - 48u^2 + 12) e^{-u^2/2} \\ n = 5 : \Phi_5(u) &= A_5 (32u^5 - 160u^3 + 120u) e^{-u^2/2} \end{aligned}$$

Note que para n par, a função $\Phi(u)$ é uma função par e para n ímpar, $\Phi(u)$ é uma função ímpar.

As funções $H(u)$, mostradas entre parênteses nas expressões acima, são conhecidas como *polinômios de Hermite*. Os polinômios de Hermite podem ser obtidos da relação:

$$H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

Os coeficientes de normalização das funções de onda são dados por:

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}}$$

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

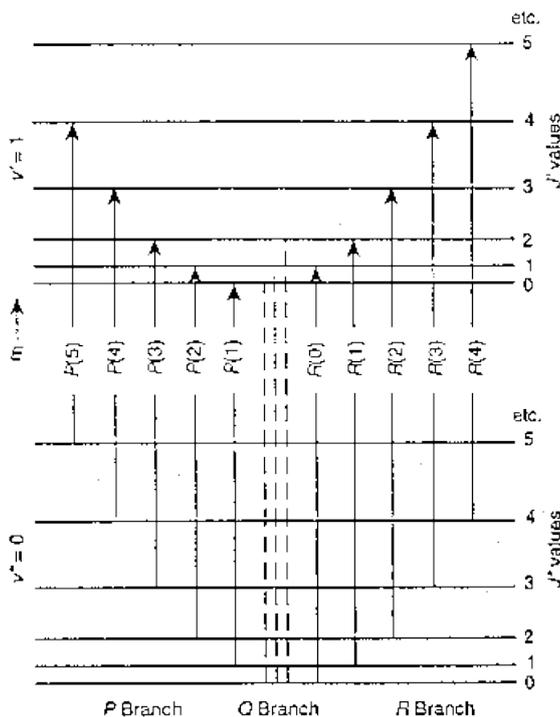


Figura 7.10: Possíveis transições em moléculas diatômicas

7.5.1 Espectro Vibração-Rotação Molecular

Uma molécula diatômica, como a de HBr pode vibrar e também girar em torno de um eixo perpendicular ao definido pelos centros dos átomos da molécula. As energias de rotação de uma molécula diatômica são dadas por:

$$E_j = \frac{J^2}{2I} = \frac{j(j + 1)\hbar^2}{2I}$$

Onde j é o número quântico associado ao momento angular de rotação J e I o momento de inércia. Note que um rotor, ao passar de um estado com número quântico j , para outro com $j-1$, emite um fóton com energia $h\nu_j = E_j - E_{j-1} = 2j\hbar^2/2I$. A diferença de energia de fótons emitidos de estados com j consecutivos é portanto constante: $\delta = (h\nu_j - h\nu_{j-1})$. No caso de HBr, as energias de vibração são dadas por $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega = (n + \frac{1}{2})0,316$ eV. As transições de um estado a outro são governadas por uma regra de seleção (ligada à conservação de momento angular, mas que não discutiremos aqui), dada por $\nabla j = \pm 1$. Nas vibrações de uma molécula di-atômica, o momento angular é sempre nulo. Portanto transições de um estado n para $n-1$ ou qualquer outro estado de energia mais baixa são proibidas, pois correspondem a $\nabla j = 0$. Com isso as possíveis transições, envolvendo o estado fundamental (energia de ponto zero) e as rotações à partir desse estado, o primeiro estado vibracional ($n=1$) e as rotações desse estados são vistas na figura 7.10:

7.5 O Oscilador Harmônico

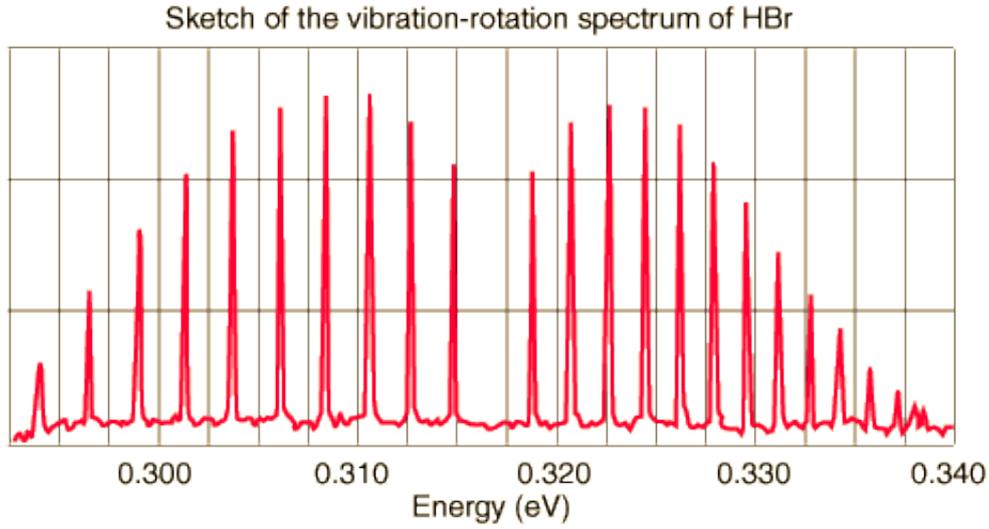


Figura 7.11: Espectro vibração-rotação molecular

O espectro da radiação (infravermelho) emitido por uma molécula diatômica é portanto como mostrado na figura 7.11.

7.5.2 Operadores de Criação e Aniquilação de Fonons

Na física de sólidos, o termo *fonon* é usado para denominar o *quantum* de energia vibracional. Assim como $h\nu$ é a energia do *fóton*, o *quantum* de energia eletromagnética, a energia do *fonon* de vibração é $\hbar\omega$. Definimos os operadores \hat{a} e \hat{a}^+ chamados operadores de destruição (aniquilação) e criação de fonons como:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

é fácil verificar as relações:

$$\hat{a}\Phi_n = \sqrt{n}\Phi_{n-1}; \hat{a}^+\Phi_n = \sqrt{n+1}\Phi_{n+1}$$

onde Φ_n são as funções de onda do oscilador harmônico. Por exemplo:

$$\begin{aligned} \hat{a}\Phi_1 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \Phi_1 = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} \left(x + \frac{1}{\alpha} \frac{d}{dx} \right) A_1 2\sqrt{\alpha} x e^{-\alpha x^2/2} = \\ &= A_1 \alpha \sqrt{2} \left(x^2 + \frac{1}{\alpha} - x^2 \right) e^{-\alpha x^2/2} = A_1 \sqrt{2} e^{-\alpha x^2/2} = A_0 e^{-\alpha x^2/2} \end{aligned}$$

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

$$\begin{aligned}\hat{a}^+\Phi_0 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\Phi_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}\left(x - \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}\right)A_0e^{-\alpha x^2/2} = \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{2}}A_0(x + x)e^{-\alpha x^2/2} = A_0\frac{2}{\sqrt{2}}\sqrt{\alpha}xe^{-\alpha x^2/2} = A_12\sqrt{\alpha}xe^{-\alpha x^2/2}\end{aligned}$$

outra relação importante, envolvendo esses operadores:

$$\hat{a}^+\hat{a}\Phi_n = \hat{a}^+\sqrt{n}\Phi_{n-1} = n\Phi_n$$

Esse operador $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$, é chamado número de fonons, pois aplicado à função de onda de um dado estado do oscilador, obtém-se o número de fonons desse estado. A equação de Schoedinger para o oscilador harmônico pode ser escrita como:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2\right)\Phi_n = E_n\Phi_n$$

Definindo o operador Hamiltoniano $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2\right)$, a equação fica:

$$\hat{H}\Phi_n = E_n\Phi_n$$

em termos dos operadores \hat{a} e \hat{a}^+ a equação de Schoedinger para o oscilador harmônico é escrita como (lembrando que $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$):

$$\hbar\omega\hat{N}\Phi_n = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})\Phi_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega = E_n\Phi_n$$

A formulação quântica em termos de operadores de criação e aniquilação, também chamada de *segunda quantização*, é muito utilizada na solução de problemas complexos.

7.6 Caixa Cúbica: Equação de Schroedinger em 3 Dimensões

Vimos que a Equação de Schroedinger pode ser escrita na forma:

$$\hat{T} + \hat{V}\Phi = \hat{E}\Phi$$

onde \hat{T} é o operador energia cinética, \hat{V} o operador energia potencial e \hat{E} o operador energia total. Em três dimensões, utilizando-se coordenadas cartesianas, a energia cinética de uma partícula é dada pela expressão:

$$T = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

e portanto o operador quântico correspondente será:

7.6 Caixa Cúbica: Equação de Schroedinger em 3 Dimensões

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

e a equação de Schroedinger em três dimensões será então:

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

Facilmente podemos verificar que também aqui, se V não depende explicitamente de t, podemos separar a solução na forma:

$$\Psi(x,y,z,t) = \Phi(x,y,z)\varphi(t)$$

onde $\Phi(x,y,z)$ é a solução da equação de Schroedinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Phi(x,y,z) + V(x,y,z)\Phi(x,y,z) = E\Phi(x,y,z)$$

Consideremos agora um caso simples, o de uma partícula dentro de uma caixa cúbica, definida pelo potencial:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 < x < L \\ 0 & \text{para } 0 < y < L \\ 0 & \text{para } 0 < z < L \\ \infty & \text{fora da caixa} \end{cases}$$

Aqui também facilmente se verifica que como V não depende explicitamente de x,y,z podemos obter a soluções da equação na forma de um produto de funções, cada uma correspondendo a uma dimensão espacial. Uma solução possível para este problema é dado pela função de onda:

$$\Phi(x,y,z) = A \sin k_1x \sin k_2y \sin k_3z$$

Substituindo-se esta função na equação de Schroedinger encontra-se para a energia da partícula:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$

Aplicando-se a condição de continuidade da função de onda nas regiões dentro e fora da caixa, observa-se que as constantes k_i devem obedecer a relação: $k_i = n_i\pi/L$ onde n_i são números inteiros. Em termos dos n_i , a energia da partícula será então:

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad n_i = 1,2,3,\dots$$

A energia da partícula na caixa é quantizada e caracterizada por um conjunto de três números inteiros, correspondentes à condição de continuidade da função de onda nas três

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

direções espaciais. O estado fundamental (menor energia) corresponde portanto a $n_1 = n_2 = n_3 = 1$, com a energia dada por:

$$E_{111} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

O primeiro estado excitado será aquele em que 2 dos n têm valor 1 e um deles assume o valor 2, com a energia tomando o valor $3\pi^2\hbar^2/mL^2$. Existem três estados com essa mesma energia, descritos pelas funções de onda $\Phi_{2,1,1}$, $\Phi_{1,2,1}$ e $\Phi_{1,1,2}$. Quando há mais de uma função de onda para descrever um mesmo nível de energia, dizemos que esse estado é degenerado. No caso acima temos um estado com degenerescência tripla.

A degenerescência reflete uma simetria do problema. Considerando por exemplo uma caixa sem simetria cúbica, ou seja com lados desiguais L_1 , L_2 , L_3 , a solução da equação de Schroedinger com aplicação das condições de continuidade da função de onda será:

$$\Phi_{n_1n_2n_3}(x,y,z) = A \sin \frac{n_1\pi}{L_1}x \sin \frac{n_2\pi}{L_2}y \sin \frac{n_3\pi}{L_3}z$$

e a energia da partícula será dada por:

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right)$$

e portanto $E_{112} \neq E_{121} \neq E_{211}$, não havendo portanto estados degenerados, ou seja, a quebra da simetria do problema removeu a degenerescência.

7.7 Exercícios

1.- Uma partícula está sujeita ao potencial de um oscilador harmônico, cuja função de onda é dada por:

$$\Psi(x) = Ae^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

(a) Seria a quantidade de movimento uma constante neste estado? Se sua resposta for positiva, determine o valor da quantidade de movimento. Se for negativa, determine o valor médio da quantidade de movimento. O que seria obtido em medidas da quantidade de movimento da partícula neste estado?

(b) É a energia mecânica conservada neste estado? Se sua resposta for positiva, determine o valor da energia. Se for negativa, determine o valor médio da energia. Que você obterá numa medida da energia da partícula neste estado?

c) Calcule $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ para essa partícula.

d) Calcule a incerteza na medida da posição da partícula, definida como o desvio padrão.

e) Repita o cálculo de c) e d) para o momento da partícula e verifique se o princípio de incerteza é obedecido neste caso.

2) A função de onda para uma partícula confinada numa caixa de largura a é dada por:

7.7 Exercícios

$$\begin{cases} A \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} & -a/2 < x < a/2 \\ 0 & x < -a/2 \text{ ou } x > a/2 \end{cases}$$

a) Verifique que esta função é uma solução da equação de Schroedinger. b) Determine o valor da energia total E neste estado.

3.- Repita o cálculo do potencial degrau realizado em classe, para a condição $E > V_0$, considerando agora a função:

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

Calcule os coeficientes de transmissão e reflexão e compare-os com os obtidos em classe.

4.- Mostre que o problema de uma partícula passando por um poço de potencial ($V = 0$ para $x < 0$, $V = -V_0$ para $0 \leq x \leq a$ e $V = 0$ para $x > a$), com $E > 0$ é equivalente ao da barreira de potencial de altura V_0 nas mesmas condições.

5.- Uma reação de fusão importante na produção de energia solar envolve a captura de um próton por um núcleo de carbono, que tem carga seis vezes maior que a do próton e um raio $r \sim 2 \cdot 10^{-15}m$. a) Faça uma estimativa do potencial coulombiano V que atua sobre o próton se ele estiver na superfície do núcleo. b) O próton incide sobre o núcleo devido seu movimento térmico. Podemos realisticamente supor que sua energia total não seja muito maior que $10kT$, onde $T \sim 10^7K$ é a temperatura no interior do sol. Calcule sua energia total nessas condições e compare com a altura da barreira calculada no item anterior. c) Calcule a probabilidade de que o próton possa penetrar em uma barreira retangular equivalente, de altura V e se estendendo de r a 2r, o ponto em que a barreira cai para V/2.

6.- Um átomo do gás nobre kripton exerce um potencial atrativo sobre um elétron não ligado que varia muito bruscamente. Devido a isto, é uma aproximação razoavel descrever o potencial como um poço quadrado atrativo de raio igual a $4 \cdot 10^{-10}m$, o raio do átomo. As experiências mostram que um elétron com energia cinética de 0,7 eV nas regiões fora do átomo pode atravessá-lo sem sofrer praticamente reflexão nenhuma. O fenomeno é chamado *efeito Ramsauer*. Use essa informação para determinar a profundidade (V_0) do poço quadrado.

7.- Uma partícula confinada numa caixa de paredes impenetráveis e largura L está num estado cuja função de onda $\Psi(x,t)$ é dada pela combinação linear:

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$$

onde Ψ_1 e Ψ_2 são as auto-funções de energia normalizadas para o estado fundamental (energia E_1) e para o primeiro estado excitado (energia E_2) respectivamente e c_1 e c_2 são constantes.

(a) Mostre que esta função de onda pode representar um estado quântico porque obedece a equação de Schrödinger dependente do tempo.

(b) Encontre o valor dessas constantes que normalizam a função de onda $\Psi(x,t)$.

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

(c) Seria a função de onda $\Psi(x,t)$ um auto-estado de energia? Se sua resposta for positiva, determine o valor da energia; se for negativa, determine a energia média deste estado em função das auto-energias E_1 e E_2 . Em qualquer caso justifique sua resposta.

(d) Determine a densidade de probabilidade $\Psi^*\Psi$. O termo dependente do tempo representa uma oscilação. Obtenha a frequência dessa oscilação e tente interpretá-la.

8) Um próton e um dêuteron (mesma carga do próton, massa duas vezes maior) tentam penetrar em uma barreira de potencial de altura 10 MeV e largura 10^{-14} m. As duas partículas têm energia de 3 MeV. a) Use argumentos qualitativos para prever qual das partículas tem maior probabilidade de consegui-lo. b) Calcule quantitativamente a probabilidade de sucesso para cada uma das partículas.

9) Aplique a condição de normalização para mostrar que a constante multiplicativa para a autofunção com $n=3$ do poço de potencial quadrado infinito é $B_3 = \sqrt{2/a}$.

10) Uma bola de bilhar, de massa $m=0.2$ kg e energia E é jogada na direção de uma rampa inclinada, de altura $H=10$ cm. Para $E=1.001*mgH$, calcule qual a probabilidade da bola não conseguir subir a rampa.

11) Um dos estados excitados do átomo de hidrogênio tem função de onda dada por:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = Ar^2e^{-r/3a} \sin\theta \cos\theta e^{-i\varphi}$$

onde A é uma constante e o sistema de coordenadas é o esférico.

a) Qual a expressão para o componente na direção z do momento angular nesse sistema?

b) Utilizando o resultado do item a), qual o componente z do momento angular para o átomo de hidrogênio no estado descrito pela função de onda acima?

12) No caso da barreira de potencial com $E > V_0$, como desenvolvido nas notas de aula:

a) Mostre que se $B=0$, o coeficiente de transmissão será igual a 1. b) Mostre que nesse caso, a densidade de probabilidade para se encontrar a partícula na região $0 < x < a$ é dada por:

$$\Psi_{II}^* \Psi_{II} = C^* C \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2 \left[1 - \left(1 - \left(\frac{k_2}{k_1}\right)^2\right) \cos^2 k_2 x \right]$$

c) Verifique também que a condição $B=0$ implica em $k_2 a = n\pi$, $n=1,2,3,\dots$

13) Encontre $|\Psi|^2 = \Psi(x)^* \Psi(x)$ para as soluções da barreira de potencial ($E < V_0$ e $E > V_0$)

14) A constante da força restauradora C para vibrações interatômica em uma molécula diatômica típica é de aproximadamente 10^3 J/m^2 . Use esse valor para fazer uma estimativa da energia de ponto zero das vibrações moleculares.

15) (a) Faça uma estimativa da diferença em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado da molécula vibrando considerada no problema anterior. (b) A partir dessa estimativa, determine a energia do fóton emitido por vibrações da distribuição de cargas quando o sistema faz uma transição entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental. (c) Determine também a frequência do fóton e compare com a frequência de oscilação clássica do sistema. (d) Em que região do espectro está a radiação emitida?

16.- No instante $t=0$, um sistema é descrito pela seguinte função de onda normalizada:

7.7 Exercícios

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{5}}\Phi_0(x) + \sqrt{\frac{1}{2}}\Phi_2(x) + c\Phi_3(x)$$

onde Φ_0 , Φ_1 e Φ_3 são as autofunções normalizadas do oscilador harmônico. Calcular o valor numérico de c ? Qual o valor esperado da energia se é efetuada a medida dessa no instante $t=0$?

17.- Mostre que um oscilador harmônico com energia $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ corresponde à amplitude de um oscilador clássico $A_n = \sqrt{(2n + 1)\hbar/m\omega}$.

18.- Encontre a constante de normalização (A_0) para o estado fundamental do oscilador harmônico.

19.- Calcule a probabilidade de um oscilador harmônico no estado fundamental ser encontrado fora da região “clássica”.

20.- Um elétron está contido numa caixa de paredes rígidas de largura 0.1 nm. a) Desenhe os níveis de energia até $n=4$. b) Encontre os comprimentos de onda de todos os possíveis fótons que poderiam ser emitidos até que o elétron passe do estado $n=4$ para o $n=1$.

21.- Um elétron está preso em um poço de potencial infinito de 0.3 nm de largura. a) Se o elétron está no estado fundamental, qual a probabilidade de encontrá-lo a menos de 0.1 nm do lado esquerdo da parede? Repita os cálculos para um elétron no estado $n=99$. As respostas são consistentes com o princípio de correspondência?

22.- Se o potencial V é independente do tempo, mostre que o valor esperado de x é independente do tempo.

23.- Determine o valor médio de $\Psi_n^2(x)$ dentro de um poço de potencial infinito para $n=1,5,20$ e 100. Compare esses resultados com a probabilidade clássica de encontrar a partícula dentro da caixa.

$1/L$ (independente de n , em acordo com a previsão clássica)

24.- Considere um poço de potencial finito de largura $3 \times 10^{-15}m$ que contém uma partícula de massa $m= 2GeV/c^2$. Quão profundo deve ser esse potencial para conter três níveis de energia? (Exceto pelos valores exatos das energias, esta é a situação aproximada de um núcleo de deutério).

25.- Uma possível solução para o oscilador harmônico simples é:

$$\Psi_n = A(2\alpha x^2 - 1)e^{-\alpha x^2/2}$$

onde A é uma constante. Qual o valor da energia E_n desse estado?

26.- Mostre que a energia de um oscilador harmônico simples no estado $n=1$ é $3\hbar\omega/2$ substituindo a função de onda $\Psi_1 = Axe^{-\alpha x^2/2}$ diretamente na equação de Schroedinger.

27.- Uma molécula H_2 pode ser aproximada por um oscilador harmônico simples com constante de mola $k= 1,1 \times 10^3N/m$. Encontre a) os níveis de energia e b) os possíveis comprimentos de onda de fótons emitidos quando a molécula H_2 decai do terceiro estado excitado, terminando no estado fundamental.

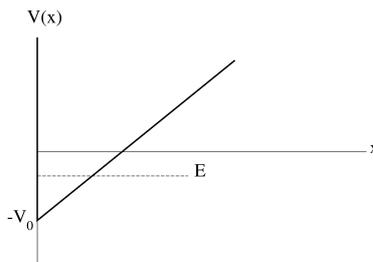
a) $E_n = (n + 1/2)0.755eV$ b) 1640 nm; 822 nm; 549 nm

28.- a) Calcule a probabilidade de transmissão de uma partícula α de energia $E = 5$ MeV através da barreira coulombiana de um núcleo pesado, que pode ser aproximada por

7 Aplicações da Equação de Schroedinger

uma barreira quadrada de altura $V_0 = 15\text{MeV}$ e largura $L = 1,3 \times 10^{-14}\text{m}$. Calcule essa probabilidade b) dobrando a altura da barreira e c) usando a altura original mas dobrando a largura da barreira. Compare os três resultados.

29.- Considere uma partícula de energia E aprisionada num poço de potencial como mostrado na figura abaixo. Desenhe esquematicamente as funções de onda para os três estados de mais baixa energia da partícula. Explique o esquema obtido.



30.- Quando uma partícula de energia E se aproxima de uma barreira de potencial de altura V_0 com $E \gg V_0$, mostre que o coeficiente de reflexão pode ser aproximado por $R = [(V_0 \sin(kL))/2E]^2$.

31.- Para uma região onde o potencial é $V=0$, a função de onda de uma partícula é dada por $\sqrt{2/\alpha} \sin(3\pi x/\alpha)$. Calcule a energia da partícula.

32.- Considere um poço semi-infinito no qual $V=\infty$ para $x < 0$, $V=0$ para $0 \leq x \leq L$ e $V=V_0$ para $x > L$. a) Mostre que as funções de onda possíveis são $A \sin kx$ dentro do poço e Be^{-k_2x} para $x > L$, onde $\sqrt{2mE/\hbar^2}$ e $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$. b) Mostre que a aplicação das condições de contorno resultam na relação $k_2 \tan(ka) = -k$.

33.- A função de onda para o estado $n=2$ do oscilador harmônico é $A(1 - 2\alpha x^2)e^{-\alpha x^2/2}$. a) Mostre que o nível de energia correspondente é $5\hbar\omega/2$, substituindo a função de onda diretamente na equação de Schroedinger. b) Encontre $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$.

$$\langle x \rangle = 0; \langle x^2 \rangle = 5/2\alpha$$

34.- Uma partícula está aprisionada entre $x=0$ e L dentro de um poço de potencial infinito. Sua função de onda é uma superposição do estado fundamental e primeiro estado excitado. A função de onda é dada por:

$$\Psi(x) = \frac{1}{2}\Psi_1(x) + \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_2(x)$$

Mostre que esta função de onda está normalizada.

35.- Considere uma partícula de massa m dentro de uma caixa quadrada bi-dimensional de lado L , alinhada com os eixos x e y . Mostre que as funções de onda e níveis de energia da partícula são dados por:

$$\Psi(x,y) = \frac{2}{L} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L}; \quad E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$$