

NOTAS DE AULAS DE FÍSICA MODERNA

Prof. Carlos R. A. Lima

CAPÍTULO 7

SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

Primeira Edição – junho de 2005

CAPÍTULO 07 – SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

ÍNDICE

- 7.1- Partícula Livre
- 7.2- Potencial Degrau
- 7.3- Barreira de Potencial
- 7.4- Poços de Potenciais Finito e Infinito
- 7.5- Oscilador Harmônico

Nessa apostila aparecem seções, sub-seções e exemplos resolvidos intitulados como **facultativos**. Os assuntos que se referem esses casos, podem ser dispensados pelo professor durante a exposição de aula sem prejuízo da continuidade do curso de Estrutura da Matéria. Entretanto, é desejável que os alunos leiam tais assuntos e discutam dúvidas com o professor fora do horário de aula. Fica a cargo do professor a cobrança ou não dos tópicos facultativos.

Excluindo os tópicos facultativos, esse capítulo deve ser abordado no máximo em **4 aulas de quatro créditos**.

CAPÍTULO 07

SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO.

Neste capítulo estudar-se-á o comportamento dos mais importantes sistemas quânticos, por meio da solução da equação de Schroedinger independente do tempo. Os sistemas estudados aqui estarão restritos a uma única dimensão, uma vez que isso leva a uma razoável simplificação matemática sem perdas de generalização na obtenção dos conceitos físicos importantes. As exceções a essa regra são os fenômenos que envolvem o conceito de momento angular, pois essa grandeza não tem significado unidimensional. Exemplos de fenômenos como esse serão abordados em capítulos posteriores.

7.1. Partícula Livre.

O sistema quântico mais simples é aquele no qual o potencial $V(x)$ é uma constante. Esse é o caso de uma partícula livre, pois a força atuante é $F = -dV(x)/dx = 0$. Sem perdas de generalidades, pode-se assumir

$$V(x) = 0 \quad (7.1)$$

Nesse caso, a equação de Schrodinger independente do tempo (6.35), torna-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x) \quad (7.2)$$

A solução mais geral dessa equação é uma combinação linear de duas ondas planas se deslocando para a direita e para a esquerda, isto é

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (7.3)$$

Substituindo-se uma solução na eq. (7.2), obtém-se o número de onda k , por

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (7.4)$$

O valor esperado do momento linear $\langle p \rangle$ para a parcela da função de onda que se desloca para a direita $\psi_d(x) = A e^{ikx}$, será

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_d^* p \psi_d dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_d^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) A e^{ikx} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_d^* (-i\hbar ik A e^{ikx}) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_d^* (\hbar k) \psi_d dx \end{aligned}$$

ou, da condição de normalização $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_d^* \psi_d dx = 1$, e da eq. (7.4)

$$\langle p \rangle = \hbar k = \sqrt{2mE} \quad (7.5)$$

pois a integral dá a probabilidade de se encontrar a partícula em algum lugar do eixo x , que deve ser igual a unidade. A eq. (7.5) dá o momento de uma partícula se movendo para a direita, da mesma forma que para uma função de onda.

Similarmente, para a parcela da função de onda que se desloca para a esquerda, $\psi_e(x) = A e^{-ikx}$, tem-se

$$\langle p \rangle = -\sqrt{2mE} \quad (7.6)$$

Conclui-se então que, o sentido do movimento de uma partícula livre deve ser o mesmo de sua respectiva função de onda.

A densidade de probabilidade para a partícula livre que se move, por exemplo, para a direita, é

$$\psi^*(x) \psi(x) = A^* e^{-ikx} A e^{ikx} = A^* A \quad (7.7)$$

independente portanto da posição x da partícula. Este é o fato que garante à partícula ter igual probabilidade de ser encontrada em qualquer local, e consequentemente incerteza na sua posição $\Delta x \rightarrow \infty$. Do princípio da incerteza isso significa que o momento p da partícula pode ser encontrado com precisão total, uma vez que

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$$

e, $\Delta p \rightarrow 0$.

Da mesma forma que $\Delta x \rightarrow \infty$ tem-se $\Delta t \rightarrow \infty$, isto é, pode-se dispor de um intervalo de tempo infinito para se medir a energia da partícula, então, do princípio da incerteza $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$, essa energia pode ser conhecida também com uma precisão total.

Pode-se concluir que a função de onda (7.3) descreve uma partícula livre de momento $p = \hbar k$ e energia $E = \hbar \omega$, ambos bem definidos, e que se relacionam por $p = \sqrt{2mE}$.

7.2. Potencial Degrau.

Nessa e nas próximas seções considerar-se-ão potenciais com descontinuidades abruptas em determinados pontos do eixo x . Potenciais como esse não existem realmente na natureza, no entanto, são frequentemente utilizados na física quântica para aproximar situações reais por serem de fácil tratamento matemático.

O potencial de grau, mostrado na fig. 7.1, é o primeiro exemplo que se propõe a discutir.

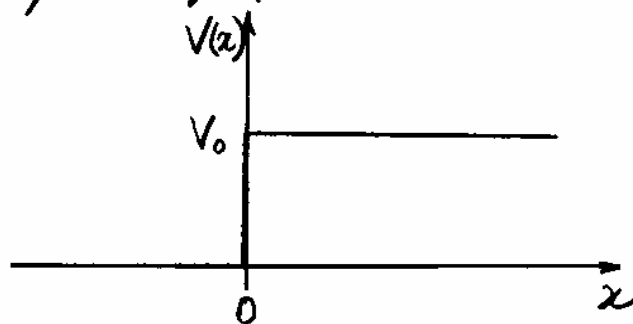


fig. 7.1. Representação gráfica de um potencial de grau.

Esse potencial pode ser descrito matematicamente, por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ V_0 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (7.8)$$

onde V_0 é uma constante.

Seja uma partícula de massa m e energia total E na região $x < 0$, se dirigindo para o ponto $x = 0$, onde o potencial $V(x)$ varia abruptamente. De acordo com a mecânica clássica, se moverá livremente até alcançar $x = 0$, onde estará sujeita a uma força impulsiva $F = -dV(x)/dx$ atuando no sentido negativo do eixo x . A idealização do potencial dado na fig. 7.1 implica numa força impulsiva de módulo infinito em $x = 0$, pois nesse ponto, $dx \rightarrow 0$. No entanto, como sua ação é durante um tempo infinitesimal, e não exatamente zero, o impulso $I = \int F dt$, que dá a variação do momento linear da partícula, é finito. Conclui-se que a variação do momento da partícula não é afetada pela idealização do problema.

Na mecânica clássica, o comportamento da partícula, após sofrer ação do potencial em $x = 0$, depende da relação entre E e V_0 . Isso também deve ocorrer do ponto de vista da mecânica quântica. O caso em que $E < V_0$ está representado na fig. 7.2, o qual se propõe a estudar neste momento. O caso $E > V_0$ não considerado no final dessa seção.

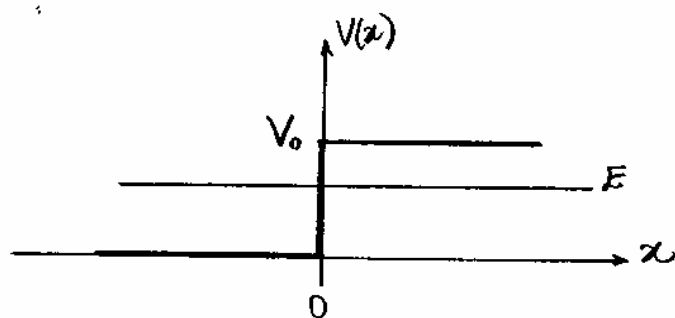


fig. 7.2 - Incidência de uma partícula de energia total E sobre um potencial degrau, onde $E < V_0$.

De acordo com a mecânica clássica, a força impulsiva invertua o momento da partícula. O módulo do momento p será o mesmo após inversão, pois a energia total $E = p^2/2m$, permanece constante.

Para determinar o movimento da partícula segundo a mecânica quântica, deve-se encontrar uma função de onda que é solução da equação de Schrödinger independente do tempo, para o caso em que $E < V_0$.

Para o potencial degrau, o eixo x se divide em duas regiões. Na região $x < 0$ tem-se $V(x) = 0$, e na região $x > 0$ tem-se $V(x) = V_0$, e as equações de Schrödinger correspondentes, são

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x), \text{ para } x < 0 \quad (7.9)$$

$$e) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x), \text{ para } x > 0 \quad (7.10)$$

A eq. (7.9) é essencialmente a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula livre,

discutida na seção anterior cuja solução, obtida na eq. (7.3), é

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} ; k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ para } x < 0 \quad (7.11)$$

No caso da eq. (7.10), a partir das considerações qualitativas da seção 6.7, não se deve esperar uma função $\psi(x)$ oscilatória como na eq. (7.11), e sim uma função que se aproxima gradativamente do eixo x , uma vez que, sendo $V_0 > E$, deve ocorrer um ponto de mínimo para $\psi(x) > 0$. A função com essa propriedade é uma exponencial real decrescente, isto é

$$\psi(x) = e^{-k_2x} \text{ para } x > 0 \quad (7.12)$$

Derivando-se duas vezes em relação a x , obtém-se

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (-k_2)^2 e^{-k_2x} = k_2^2 \psi(x) \quad (7.13)$$

Substituindo-se na eq. (7.10), conclui-se que a eq. (7.12) será solução desde que

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} , E < V_0 \quad (7.14)$$

Como na eq. (6.13) aparece o quadrado de k_2 , então o sinal na exponencial (6.12), na verdade pode também ser positivo. Assim, a solução mais completa, é

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} ; k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \text{ para } x > 0 \quad (7.15)$$

As constantes A, B, C e D nas eqs. (7.11) e (7.15) podem ser determinadas utilizando-se as condições de continuidade e continuidade das funções $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$.

Seja inicialmente o comportamento de $\psi(x)$ quando $x \rightarrow +\infty$. Nessa região do eixo x , a solução é dada pela eq. (7.15), e constata-se que $\psi(x) \rightarrow +\infty$ quando $x \rightarrow +\infty$, por causa do termo Ce^{k_2x} . Logo, para evitar que isso ocorra, é necessário que $C=0$.

Por outro lado, para se garantir continuidade em $x=0$, as duas formas de $\psi(x)$ em (7.11) e (7.15), e suas derivadas, devem ser iguais em $x=0$. No primeiro caso, tem-se

$$D(e^{-k_2x})_{x=0} = A(e^{ik_1x})_{x=0} + B(e^{-ik_1x})_{x=0} \Rightarrow D = A + B \quad (7.16)$$

Com as derivadas das duas formas, tem-se

$$-k_2 D(e^{-k_2x})_{x=0} = ik_1 A(e^{ik_1x})_{x=0} - ik_1 B(e^{-ik_1x})_{x=0}$$

ou,

$$\frac{ik_2}{k_1} D = A - B \quad (7.17)$$

Somando-se as eqs. (7.16) e (7.17), obtém-se

$$A = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) \quad (7.18)$$

e, subtraindo-as, obtém-se

$$B = \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) \quad (7.19)$$

Assim, a solução para o potencial degrau, com energia $E < V_0$, será

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2}(1 + ik_2/k_1)e^{ik_1x} + \frac{D}{2}(1 - ik_2/k_1)e^{-ik_1x} & \text{para } x < 0 \\ De^{-k_2x} & \text{para } x > 0 \end{cases} \quad (7.20)$$

A constante arbitrária D determina a amplitude da função e poderá ser determinada pela condição de normalização.

A função de onda $\Psi(x,t)$ para o problema em questão seria determinada lembrando-se, que

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (7.21)$$

Para $x < 0$, o primeiro termo é uma onda propagando-se no sentido positivo do eixo x , e o segundo uma onda propagando-se no sentido negativo. Esse fato, somado às previsões clássicas, sugerem que se deve associar o primeiro termo à transmissão da partícula sobre o potencial degrau, e o segundo à reflexão da partícula no degrau.

A partir dessa concepção, pode-se calcular a probabilidade da partícula incidente ser refletida, denominado de coeficiente de reflexão R . Como a intensidade de uma onda é proporcional ao quadrado do módulo de sua amplitude, o coeficiente de reflexão será dado pela razão entre módulos quadráticos da amplitude da onda refletida $|B|^2$, e da onda incidente $|A|^2$, isto é

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{B^* B}{A^* A} \quad (7.22)$$

ou, de acordo com a eq. (7.20),

$$R = \frac{(1 - ik_2/k_1)^*(1 - ik_2/k_1)}{(1 + ik_2/k_1)^*(1 + ik_2/k_1)} = \frac{(1 + ik_2/k_1)(1 - ik_2/k_1)}{(1 - ik_2/k_1)(1 + ik_2/k_1)} = 1$$

Esse resultado mostra, similarmente às previsões clássicas, que, ao incidir sobre o degrau, a partícula sempre será refletida.

A fig. 7.3 mostra o comportamento das funções $\psi(x)$ e $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$, de acordo com as eqs. (7.20) e (7.21).

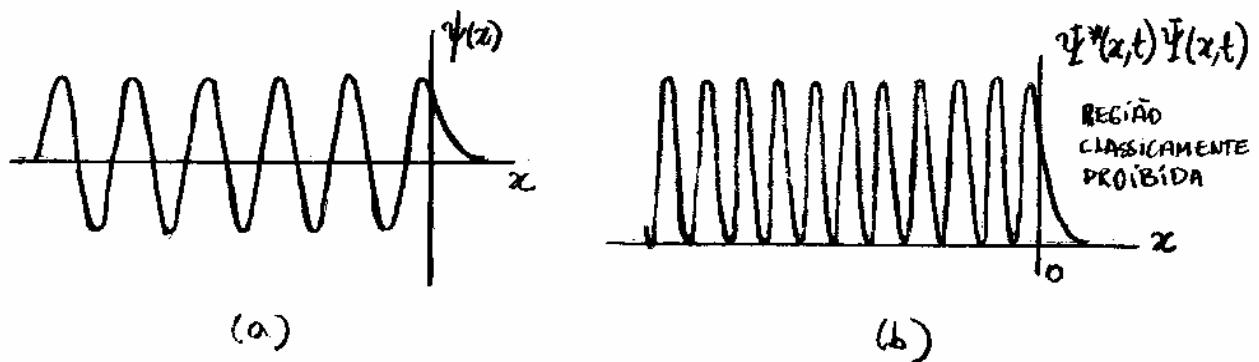


fig. 7.3 - Comportamento da (a) função de onda e (b) densidade de probabilidade, para um potencial degrau com $E < V_0$.

Note que existe uma probabilidade de se encontrar a partícula na região $x > 0$, condição essa, inaceitável do ponto de vista clássico quando $E < V_0$. Se isso fosse possível na mecânica clássica, teria-se uma energia crítica $p^2/2m$ negativa e momento p imaginário.

Este fenômeno, denominado penetração na região classicamente proibida, é uma das previsões mais notáveis da mecânica quântica.

É importante ressaltar que a penetração não significa que a partícula seja mantida na região classicamente proibida, pois mostrou-se que a partícula é eventualmente refletida pelo degrau.

Da eq. (7.20) para $x > 0$, e (7.21), a probabilidade de se encontrar a partícula em $x > 0$ será,

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = D^*D e^{-2k_2x} \quad (7.23)$$

A distância de penetração é definida como sendo a distância $x = \Delta x$ para o qual $e^{-2k_2\Delta x} \sim e^{-2}$, isto é,

$$\Delta x = \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (7.24)$$

No limite clássico, o produto de m por $(V_0 - E)$ é tão grande, comparado a $\hbar$, que Δx é extraordinariamente pequeno.

O princípio da incerteza permite encontrar a incerteza ΔE na energia da partícula quando está na região classicamente proibida. A incerteza na posição nessa região pode ser extrapolada para ser a metade da distância de penetração $\Delta x/2$, de modo que:

$$\Delta p \Delta x/2 \approx \hbar/2 \Rightarrow \Delta p \approx \hbar/\Delta x = \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

Consequentemente, a energia $E = p^2/2m$ da partícula tem uma incerteza dada por,

$$\Delta E \simeq \frac{\Delta p^2}{2m} \simeq V_0 - E \quad (7.25)$$

O que mostra que não é possível dizer que a energia total E da partícula é certamente menor do que a energia potencial na região classicamente proibida. Isso significa que as propriedades ondulatória e corpuscular não se conflitam na região classicamente proibida.

Seja agora a consideração do caso em que $E > V_0$, como mostra a fig. 7.4.

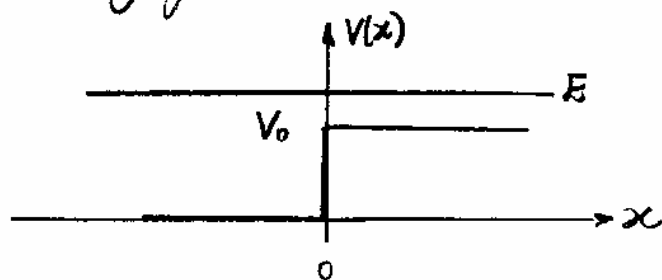


fig. 7.4 - Incidência de uma partícula de energia total E sobre um potencial degrau, onde $E > V_0$.

De acordo com a mecânica clássica, a força impulsiva $F = -dV(x)/dx$ sobre a partícula, de energia total E , no ponto $x = 0$, fará apenas que a partícula fique mais lenta e continue seu movimento em $x > 0$. Então, de acordo com a teoria clássica, a partícula sempre atingirá a região $x > 0$. Ver-se-á que as previsões quânticas não são tão simples assim.

Como $V_0 - E < 0$ em ambas as regiões, $x < 0$ e $x > 0$, tem-se funções oscilatórias para as soluções das equações de Schrödinger, isto é

$$\psi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \text{ para } x < 0 \quad (7.26)$$

e,

$$\psi(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}, \text{ para } x > 0 \quad (7.27)$$

onde,

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar} \quad \text{e} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar} \quad (7.28)$$

Note que as funções de onda são ondas que se propagam com comprimento de onda de de Broglie $\lambda_1 < \lambda_2$, uma vez que $\lambda_1 = 2\pi/k_1$, $\lambda_2 = 2\pi/k_2$ e $k_1 > k_2$.

Após ter passado para a região $x > 0$, a partícula não pode retornar para a região de incidência e, por consequência, $D = 0$ na eq. (7.27).

As outras constantes, A, B e C , podem ser encontradas assumindo-se a condição de que $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ sejam contínuas em $x = 0$. No primeiro caso,

$$A(e^{ik_1 x})_{x=0} + B(e^{-ik_1 x})_{x=0} = C(e^{ik_2 x})_{x=0}$$

ou,

$$A + B = C \quad (7.29)$$

e, no segundo

$$\text{ou, } ik_1 A(e^{ik_1 x})_{x=0} - ik_1 B(e^{-ik_1 x})_{x=0} = ik_2 C(e^{ik_2 x})_{x=0}$$

$$k_1(A-B) = k_2 C \quad (7.30)$$

Combinando-se as eqs. (7.29) e (7.30), obtém-se

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad \text{e,} \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \quad (7.31)$$

e portanto, as soluções (7.26) e (7.27), tornam-se

$$\psi(x) = \begin{cases} A \left(e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} \right) & , x < 0 \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} & , x > 0 \end{cases} \quad (7.32)$$

O primeiro termo para $x < 0$ especifica a onda incidente, o segundo termo, numa mesma região, especifica uma onda refletida e, o único termo para $x > 0$ especifica a onda transmitida.

A fig. 7.5 mostra o comportamento da densidade de probabilidade $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \Psi^*(x)\Psi(x)$ para a auto-função (7.32) quando $k_1 = 2k_2$.

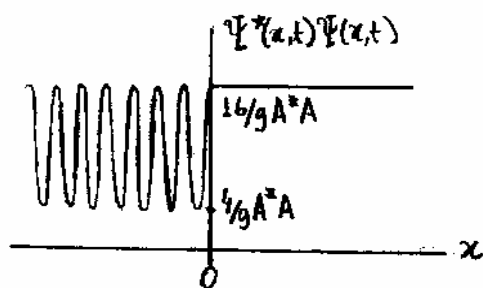


fig. 7.5 - Densidade de probabilidade para um potencial degrau para $E > V_0$ e $k_1 = 2k_2$.

A razão entre as intensidades das ondas refletida B^*B e incidente A^*A , dá a probabilidade de que a partícula seja refletida pelo degrau, ou o coeficiente de reflexão, e é dado, por:

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad E > V_0 \quad (7.33)$$

O fato de existir uma probabilidade da partícula ser refletida por um degrau de potencial para o qual $E > V_0$ é surpreendente pois, do ponto de vista clássico, ela deveria sempre ser transmitida através do degrau. Mas, por outro lado, é natural que uma onda clássica possa ser refletida em qualquer descontinuidade. Um exemplo disto, é a incidência de uma onda eletromagnética numa interface entre dois meios de diferentes índices de refração.

É importante também determinar a probabilidade da partícula ser transmitida através do degrau, ou o coeficiente de transmissão. Esse coeficiente não é tão simples de se determinar porque a velocidade da partícula é diferente nas duas regiões. Nesse caso, adota-se o conceito de fluxo de probabilidade, ou probabilidade por segundo, de modo, que

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

ou, como

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

então,

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad E > V_0 \quad (7.34)$$

Não é difícil mostrar que a soma das eqs. (7.33) e (7.34) resulta em:

$$R + T = 1 \quad (7.35)$$

Este resultado óbvio é, na verdade, a motivação para se representar o coeficiente de transmissão, e também o de reflexão, em termos de fluxo de probabilidade.

7.3 - Barreira de Potencial.

A barreira de potencial é especificada pela presença de um potencial diferente de zero somente numa região finita do espaço, como ilustrado na fig. 7.6.

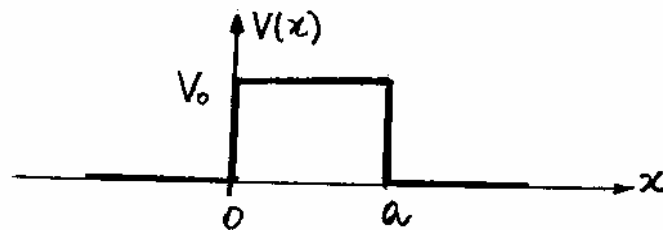


fig. 7.6 - Representação gráfica de uma barreira de potencial.

Esse potencial pode ser descrito matematicamente, por

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } 0 < x < a \\ 0 & \text{se } x < 0 \text{ ou } x > a \end{cases} \quad (7.36)$$

De acordo com a mecânica clássica, uma partícula de energia E vindo da região $x < 0$, tem probabilidade 01 de ser refletida se $E < V_0$, e probabilidade 01 de ser transmitida para a região $x > a$ se $E > V_0$. Ver-se-á que as previsões da mecânica quântica não são tão simples assim.

Nas regiões à esquerda e à direita da barreira as equações são as de uma partícula livre ($V=0$), com energia total E , cuja soluções, são

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ \psi(x) &= C e^{ik_1 x} + D e^{-ik_1 x} & x > a \end{aligned} \quad (7.37)$$

onde,

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

No interior da barreira, a solução vai depender se $E < V_0$, ou $E > V_0$. Os dois casos já foram discutidos na seção 7.2. No primeiro caso, $E < V_0$, a solução é

$$\psi(x) = F e^{-k_2 x} + G e^{k_2 x} \quad ; \quad 0 < x < a \quad (7.38)$$

onde,

$$k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad ; \quad E < V_0$$

No segundo caso, $E > V_0$, a solução é

$$\psi(x) = Fe^{ik_3x} + Ge^{-ik_3x}; \quad 0 < x < a$$

onde

$$k_3 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar; \quad E > V_0 \quad (7.39)$$

Como a partícula vem da esquerda para a direita, na região à direita da barreira ($x > a$) pode existir somente uma onda transmitida, de modo que se tem

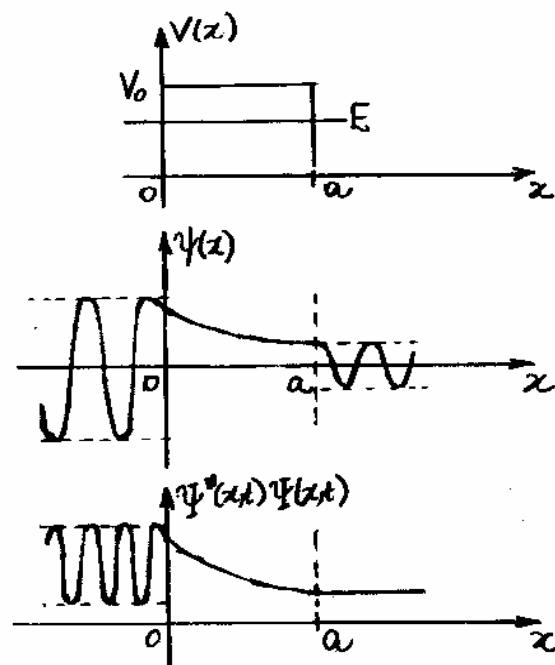
$$D = 0 \quad (7.40)$$

Entretanto, nesse caso, não se pode fazer $G = 0$, pois como x está limitado na região da barreira, $0 < x < a$, e de não se ter o problema de $\psi(x)$ crescer indefinidamente para $E < V_0$, é necessário se manter uma componente de reflexão em $x = a$.

Considere primeiramente o caso $E < V_0$.

Ao se igualar $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ nos pontos $x = 0$ e $x = a$, obtêm-se quatro equações dependentes das constantes A, B, C, F e G . Essas equações permitem escrever B, C, F e G em termos de A , que pode ser identificada como a amplitude da autofunção $\psi(x)$, e pode ser mantida arbitrária. O comportamento da densidade de probabilidade $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$, associada a esta autofunção é mostrada na fig. 7.7.

fig. 7.7 - Comportamento da função de onda Ψ e da densidade de probabilidade $\Psi^*\Psi$ de uma barreira de potencial para $E < V_0$ e para qualquer instante de tempo.



Na região $x > a$ a função de onda é uma onda plana e^{ik_2x} , e portanto $\Psi^*\Psi$ é uma constante. Na região $x < 0$ a função de onda tem uma parcela de onda estacionária (constante no tempo) e uma parcela propagante, associada a onda refletida. Portanto, $\Psi^*\Psi$ nessa região oscila, mas tem mínimos um pouco maiores que zero. Ambos os casos são similares ao mostrado na fig. 7.5 para o potencial de degrau.

Na região $0 < x < a$, a função de onda tem componentes propagante e estacionária, mas é basicamente uma onda estacionária cuja amplitude decai exponencialmente. Esse comportamento é observado claramente na fig. 7.7.

O resultado mais importante dos cálculos é a razão T entre o fluxo de probabilidade transmitido através da barreira para a região $x > a$ e o fluxo de probabilidade incidente sobre a barreira. Essa razão

é o coeficiente de transmissão e é dado, por

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_L A^* A} = \left[1 + \frac{(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a})^2}{16 E/V_0 (1 - E/V_0)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4 E/V_0 (1 - E/V_0)} \right]^{-1} \quad (7.41)$$

onde,

$$k_2 a = \sqrt{\frac{2m V_0 a^2}{\hbar^2} \left(1 - E/V_0 \right)} ; E < V_0 \quad (7.42)$$

Se os expoentes forem muito grandes, $e^{k_2 a}$ é grande, $e^{-k_2 a}$ é pequeno e $E \leq V_0$, então, a primeira eq. (7.41), torna-se

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

ou,

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2k_2 a} ; k_2 a \gg 1 \text{ ou } a/\lambda_2 \gg 1 \quad (7.43)$$

Este resultado faz uma previsão que, do ponto de vista clássico é notável. Ele mostra que uma partícula de massa m e energia total E , incidente sobre uma barreira de potencial de altura $V_0 > E$ e largura finita a , tem uma probabilidade T de penetrar na barreira e alcançar o outro lado. Este fenômeno é denominado penetração de barreira ou tunelamento. Evidentemente, T é praticamente zero no limite clássico, pois nesse limite

$2mV_0a^2/\hbar^2$, que é uma medida da opacidade da barreira, é extremamente grande, e $e^{-2k_2a} \rightarrow 0$.

A fig. 7.8 mostra um esquema experimental para observação da penetração de barreira para o caso da luz. Trata-se da incidência de luz através de dois prismas de reflexão total.

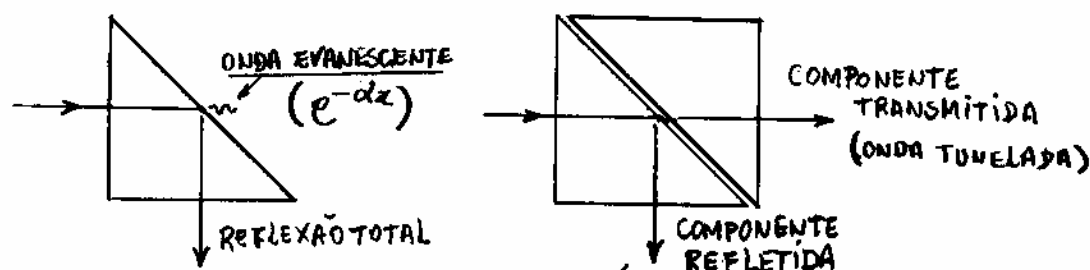


fig. 7.8 - Experimento para demonstração da penetração de barreira para o caso da luz.

Quando se utiliza um único prisma, a luz é refletida totalmente em uma das faces interna do prisma. Quando se aproxima um segundo prisma do primeiro, uma parcela da luz incidente será transmitida, através de uma barreira de ar de comprimento suficientemente pequeno.

Considere agora o caso $E > V_0$.

Nesse caso, a autofunção é oscilatória nas três regiões, mas com comprimento de onda maior no interior da barreira, $0 < x < a$, pois aí a diferença $E - V_0$ é menor.

O cálculo das constantes B, C, F e G em termos de A pela aplicação das condições de Continuidade em $x=0$ e $x=a$, resulta no seguinte coeficiente de transmissão:

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 - \frac{(e^{ik_3 a} - e^{-ik_3 a})^2}{16 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right] = \left[1 + \frac{4 \sin^2 k_3 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right)} \right]^{-1}$$

onde,

(7.44)

$$k_3 a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right)} ; \quad E > V_0 \quad (7.45)$$

Um exemplo interessante relacionado aos casos de barreira de potencial é o espalhamento de um elétron por um átomo de um gás negativamente ionizado no "plasma" em um tubo de descarga gasoso. Esse sistema pode ser idealizado por uma barreira retangular de altura $V_0 = 10V$ e largura $a = 1,8 \times 10^{-10}m$. Nesse exemplo, o termo comum $2mV_0 a^2 / \hbar^2$, nas eqs. (7.42) e (7.45), será dado por

$$2mV_0 a^2 / \hbar^2 \approx 9$$

a partir disso pode-se traçar um gráfico de T e $R = 1 - T$, em função de E/V_0 , para os casos $0 \leq E/V_0 < 1$ e $E/V_0 > 1$. Esse gráfico é mostrado na fig. 7.9.

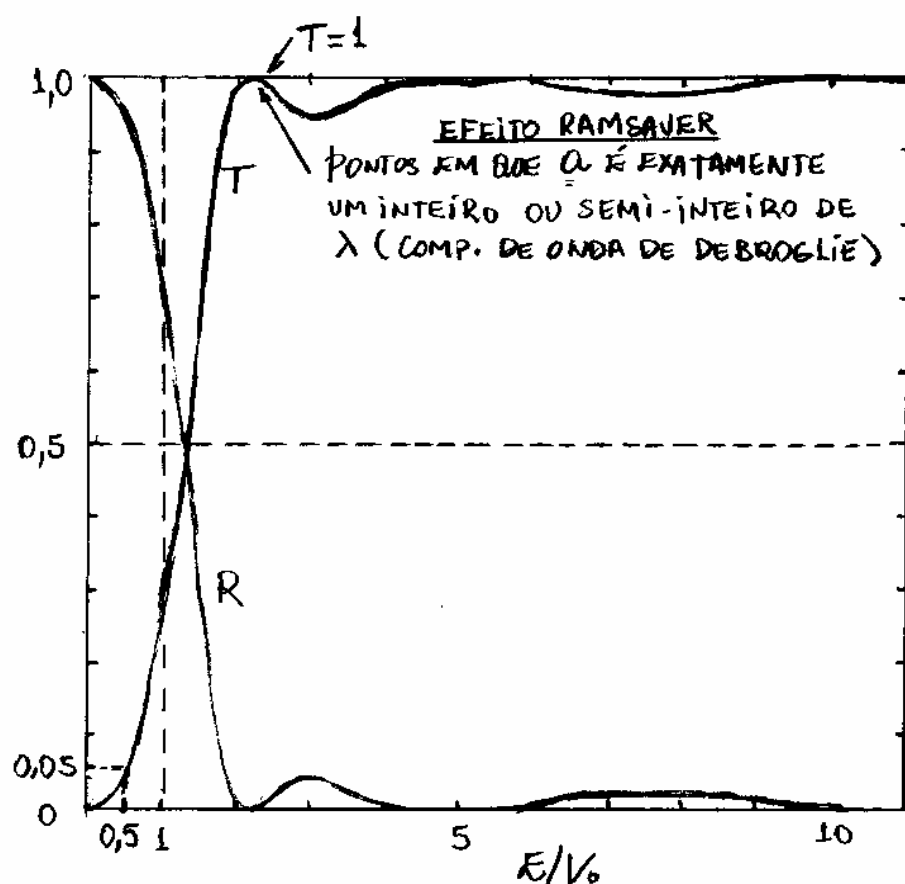


fig. 7.7 - Comportamento de R e T para um elétron espalhado por um átomo num gás negativamente ionizado.

No gráfico vê-se que $T \approx 0$ quando $E/V_0 \ll 1$. Mas quando E/V_0 é um pouco maior do que zero, nota-se que T começa a crescer. Por exemplo, quando $E/V_0 = 1/2$, ou $E = V_0/2$, tem-se $T \approx 0,05 = 5\%$. É evidente que os elétrons penetram nessa barreira com facilidade relativa. Por outro lado, para $E/V_0 > 1$, vê-se que T pode ser menor do que 1, isto é, mesmo que $E > V_0$, o elétron tem ainda boas chances de ser refletido pela barreira de potencial. No entanto, como se evidencia na eq. (7.44), nota-se que $T = 1$ sempre que $k_3 a = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$. Essa é a condição em que o comprimento

da barreira a é exatamente um número inteiro ou semi-inteiro de comprimentos de onda de de Broglie $\lambda_s = 2\pi/k_s$. Nessas condições os elétrons tem energias $E \approx 21 \text{ eV}, 53 \text{ eV}, \text{ etc...}$, e param para a região $x > a$ como se, simplesmente, os átomos não existissem. Esse efeito está relacionado com interferências construtivas entre reflexões em $x=0$ e $x=a$, e é denominado de efeito Ramsauer.

7.4 - Poços de Potenciais finito e infinito.

Até agora foi considerado potenciais que não são capazes de confinar o movimento de partículas em determinadas regiões do espaço. É nesse caso que a quantização da energia tem um papel importante. Os poços de potenciais finito e infinito são os potenciais mais comuns que apresentam essas propriedades. A fig. 7.8 mostra o aspecto do poço de potencial infinito,

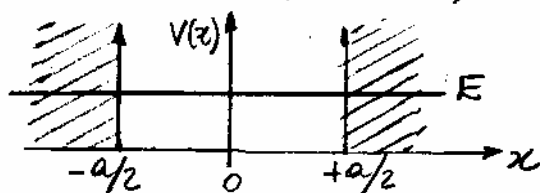


fig. 7.8 - Representação gráfica de um poço de potencial infinito. definido matematicamente, por

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x \leq -a/2 \text{ ou } x \geq +a/2 \\ 0 & \text{se } -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (7.46)$$

Como no interior do poço o potencial é nulo, a energia total E da partícula é igual a sua energia cinética. Classicamente, a partícula fica confinada no interior do poço de potencial infinito, uma vez que sua energia total E é sempre menor que o potencial fora do poço.

No interior do poço de potencial infinito, as previsões da teoria quântica podem ser obtidas a partir da solução da equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (7.47)$$

Assumindo-se evidentemente $V(x)=0$, a solução geral é oscilatória, dada por

$$\psi(x) = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx} ; -a/2 \leq x \leq +a/2$$

onde,

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (7.48)$$

A descrição ondulatória da partícula oscilando no interior do poço sugere que a autofunção nesta região deve corresponder a uma mistura de ondas iguais se movendo nos dois sentidos. As duas ondas de mesma amplitude $A'=B'$ se propagam em sentidos opostos e se combinam, resultando numa onda estacionária, dada por

$$\psi(x) = B'(e^{ikx} + e^{-ikx}) = 2B' \cos kx = B \cos kx \quad (7.49)$$

onde se fez $B = 2B'$. Pode-se obter também uma onda estacionária fazendo-se $A' = B'$ na eq. (7.48), isto é

$$\psi(x) = A'(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA' \sin kx = A \sin kx \quad (7.50)$$

onde se fez $A = 2iA'$. Como ambas, eqs. (7.49) e (7.50), são soluções da equação de Schrödinger independente do tempo para o mesmo valor de E , então é também solução, a forma geral

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (7.51)$$

Na verdade, as duas soluções gerais, eq. (7.48) e eq. (7.51) são completamente equivalentes, no entanto, a segunda é mais indicada no tratamento do movimento de partículas ligadas, ou confinadas.

O potencial torna-se infinito quando $x \leq -a/2$ e $x \geq +a/2$, e assim, a equação de Schrödinger (7.47) só terá sentido nessas regiões se $\psi(x) = 0$. Logo, a condição $\psi(x = \pm a/2) = 0$ deve ser satisfeita para que a solução seja fisicamente aceitável. Aplicando-se essas condições à solução (7.51), tem-se

$$A \sin ka/2 + B \cos ka/2 = 0 \quad \text{para } x = +a/2 \quad (7.52)$$

e,

$$-A \sin ka/2 + B \cos ka/2 = 0 \quad \text{para } x = -a/2 \quad (7.53)$$

Somando-se essas duas últimas equações, obtém-se

$$2B \cos ka/2 = 0 \quad (7.54)$$

e, subtraindo-as, obtém-se

$$2A \sin ka/2 = 0 \quad (7.55)$$

Quando ambas essas condições forem satisfeitas, tanto $\psi(x)$ quanto $d\psi(x)/dx$ serão finitas e unívocas, e $\psi(x)$ será contínua em todos os pontos.

Não há nenhum valor de k que faça $\cos(ka/2)$ e $\sin(ka/2)$ simultaneamente nulos. Também, não se quer que A e B sejam nulos para satisfazer as eqs. (7.54) e (7.55), pois $\psi(x)$ seria nula e a partícula não estaria no poço. No entanto, pode-se satisfazer as equações fazendo-se uma das seguintes escolhas:

$$\cos(ka/2) = 0 \quad \text{e} \quad A = 0 \quad (7.56)$$

ou,

$$\sin(ka/2) = 0 \quad \text{e} \quad B = 0 \quad (7.57)$$

Conclui-se então que se pode ter dois tipos de solução como se segue:

Para o primeiro tipo,

$$\psi(x) = B \cos kx \quad \text{onde} \quad \cos ka/2 = 0 \quad (7.58)$$

Para o segundo tipo,

$$\psi(x) = A \sin kx \quad \text{onde} \quad \sin ka/2 = 0 \quad (7.59)$$

Os valores possíveis de k para o primeiro tipo, eq. (7.58), são

$$\begin{aligned} ka/2 &= \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \dots \\ \text{ou,} \quad k_n &= n\pi/a \quad ; \quad n=1,3,5, \dots \quad (7.60) \end{aligned}$$

Os valores possíveis de k para o segundo tipo, eq. (7.59), são

$$\begin{aligned} ka/2 &= \pi, 2\pi, 3\pi, \dots \\ \text{ou,} \quad k_n &= n\pi/a \quad ; \quad n=2,4,6, \dots \quad (7.61) \end{aligned}$$

Em resumo, as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo para um poço de potencial infinito, serão

$$\psi_n(x) = B_n \cos k_n x \quad \text{onde,} \quad k_n = n\pi/a \quad ; \quad n=1,3,5, \dots \quad (7.62)$$

e

$$\psi_n(x) = A_n \sin k_n x \quad \text{onde,} \quad k_n = n\pi/a \quad ; \quad n=2,4,6, \dots \quad (7.63)$$

O número quântico n também é utilizado para indexar os autovalores de energia. Utilizando-se a relação $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, dada na eq. (7.48), e a expressão $k_n = n\pi/a$, dada nas eqs. (7.62) e (7.63), obtém-se

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} ; n=1,2,3,4, \dots \quad (7.64)$$

Conclui-se então que a energia total E da partícula num poço de potencial infinito é quantizada.

A fig. 7.9(a) mostra as primeiras autofunções do poço de potencial infinito, de acordo com as eqs. (7.62) e (7.63), e a fig. 7.9(b) ilustra esse poço de potencial juntamente com alguns de seus primeiros autovalores de acordo com a eq. (7.64).

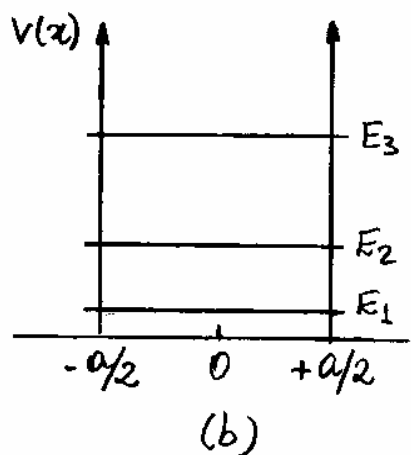
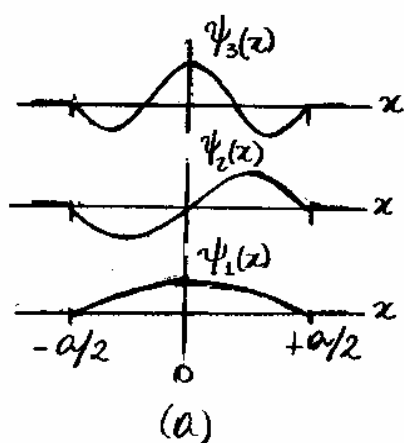


fig. 7.9 - (a) Primeiras autofunções do poço de potencial infinito e, (b) primeiras autovalores para o mesmo poço de potencial.

Nota-se que o número de meios comprimentos de onda ($1/2 \lambda$) de cada auto-função é igual ao seu número quântico n e, portanto, o número de nós é $n+1$.

Nota-se que uma energia mínima E_1 , diferente de zero, dada por

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (7.65)$$

surge no poço de potencial infinito. Essa energia mínima diferente de zero é uma consequência direta do princípio da incerteza $\Delta x \Delta p \sim \hbar/2$, uma vez que Δp e, consequentemente ΔE , tem um limite inferior regulado por $\hbar$. Evidentemente isto tem um contraste forte com os princípios da mecânica clássica, que afirma que todo movimento cessa ($E=0$) quando um sistema encontra-se numa temperatura de zero absoluto.

Seja agora analisar o caso do poço de potencial finito mostrado na fig. 7.10.

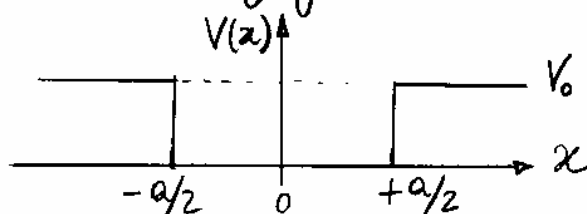


fig. 7.10. Representação gráfica de um poço de potencial finito.

Esse potencial é definido matematicamente, por

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } x < -a/2 \text{ ou } x > +a/2 \\ 0 & \text{se } -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (7.66)$$

Se a partícula tem energia $E < V_0$, então de acordo com a mecânica clássica, ela poderá ser encontrada somente no interior do poço, onde qualquer valor da energia total $E \geq 0$ será permitida. Entretanto, a mecânica quântica prevê somente valores discretos para a energia total.

Como no caso do poço de potencial infinito, na região entre $x = -a/2$ e $x = +a/2$, a solução da equação de Schrödinger será como na eq. (7.51), isto é

$$\psi(x) = A \sin k_1 x + B \cos k_1 x \quad \text{onde, } k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (7.67)$$

Para o caso das duas regiões fora do poço de potencial, $x < -a/2$ e $x > +a/2$, as soluções da eq. de Schrödinger independente do tempo, serão dadas por

$$\psi(x) = C e^{k_2 x} + D e^{-k_2 x} \quad ; \quad x < -a/2 \quad (7.68)$$

$$e) \quad \psi(x) = F e^{k_2 x} + G e^{-k_2 x} \quad ; \quad x > +a/2 \quad (7.69)$$

onde,

$$k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad (7.70)$$

Pode-se obter autofunções válidas para qualquer x juntando-se as soluções consideradas para cada região. As três formas envolvem seis constantes arbitrárias A, B, C, D, F e G . Mas como qualquer autofunção aceitável,

deve se manter sempre finita. Para que isso seja possível, deve-se fazer $D=0$ e $F=0$ para se evitar que $\psi(x) \rightarrow \infty$, quando $x \rightarrow -\infty$ na eq. (7.68) e $x \rightarrow +\infty$ na eq. (7.69). Ainda da exigência de acurabilidade das autofunções, pode-se obter mais 04 equações aplicando-se a condição de continuidade de $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ nas duas fronteiras. Não se pode permitir que as 04 constantes que sobram sejam especificadas por estas 04 equações. Pelo menos uma deve se manter indeterminada, para que a amplitude da autofunção seja arbitrária, uma vez que a equação diferencial é linear em relação a $\psi(x)$. O problema fica resolvido considerando-se a energia total E como uma constante adicional que pode ser ajustada se necessário. Ver-se-á que de fato isso será possível somente para valores discretos da energia total, como ilustrado na fig. 7.11(a).

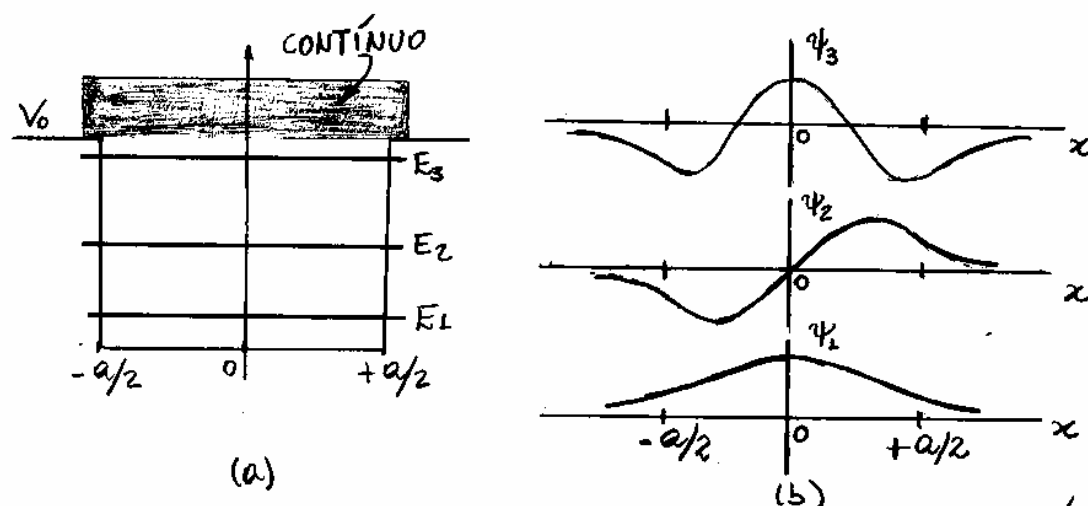


fig. 7.11 - autovalores e autofunções para um poço de potencial finito para os três primeiros estados.

A figura mostra ainda que qualquer valor da energia total é permitido fora da região classicamente proibida ($E > V_0$), pois aí as soluções são oscilatórias e não há restrição para elas. A fig. 7.11(b) mostra as três autofunções associadas aos três autovalores apresentados na fig. 7.11(a).

A determinação de todos os autovalores permitidos para o poço de potencial finito, leva a uma solução que envolve uma equação transcendental complicada (identidade de duas funções cujos argumentos são as incógnitas do problema). Seja considerado como exemplo a determinação do estado fundamental da partícula no poço de potencial finito.

Similarmente ao poço de potencial infinito, na região $-a/2 \leq x \leq +a/2$, eq. (7.62), a solução para o estado fundamental ($n=1$), deve ser uma função de paridade positiva, dada por

$$\psi(x) = B \cos k_1 x \quad \text{se, } -a/2 \leq x \leq +a/2 \quad (7.71)$$

Como $E=0$, a solução para $x > +a/2$, eq. (7.69), deve ser reescrita por:

$$\psi(x) = G e^{-k_2 x} \quad \text{se, } x > +a/2 \quad (7.72)$$

Aplicando a condição de continuidade para $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ em $x = +a/2$, obtém-se

$$B \cos k_1 a/2 = G e^{-k_2 a/2}$$

e,

$$-k_1 B \sin k_1 a/2 = -k_2 G e^{-k_2 a/2}$$

Dividindo-se a segunda equação pela primeira, obtém-se

$$k_1 \operatorname{tg} k_1 a/2 = k_2 \quad (7.73)$$

ou, substituindo-se $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$,

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \operatorname{tg} \frac{a\sqrt{2mE}}{2\hbar} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\sqrt{2mE} \operatorname{tg} \sqrt{\frac{2ma^2E}{4\hbar^2}} = \sqrt{2mE} \left(\frac{V_0}{E} - 1 \right)$$

$$\cancel{\sqrt{2mE}} \operatorname{tg} \sqrt{\frac{ma^2}{2\hbar^2} E} = \cancel{\sqrt{2mE}} \sqrt{\left(\frac{V_0 - E}{E} \right)}$$

$$\operatorname{tg} \sqrt{\frac{ma^2}{2\hbar^2} E} = \sqrt{\left(\frac{V_0 - E}{E} \right)} \quad (7.74)$$

Sabe-se que quando $V_0 \rightarrow \infty$, ou o argumento da tangente tende a $\pi/2$, encontra-se a energia E_1 do estado fundamental do poço de potencial infinito, isto é

$$\sqrt{\frac{ma^2}{2\hbar^2} E_1} = \frac{\pi}{2} \quad ; \text{ para } V_0 \rightarrow \infty$$

ou,

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \text{para } V_0 \rightarrow \infty \quad (7.75)$$

relação que concorda com a eq. (7.65) obtida da solução da equação de Schrödinger independente do tempo para o poço de potencial infinito. Substituindo-se $ma^2 = \hbar^2 \pi^2 / 2E_1$ da eq. (7.75) na eq. (7.74), obtém-se

$$\operatorname{tg} \sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^2 / 2E_1}{2\hbar^2}} E = \sqrt{\left(\frac{V_0 - E}{E}\right)}$$

ou,

$$\operatorname{tg} \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{E}{E_1}} = \sqrt{\left(\frac{V_0 - E}{E}\right)} \quad (7.76)$$

Essa equação transcendental, cuja incógnita é a energia E do estado fundamental de uma partícula no poço de potencial finito, é resolvida graficamente como mostra a fig. 7.12.

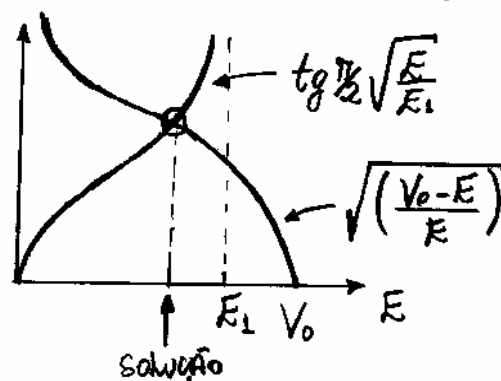


fig. 7.12 - Solução gráfica para o autovalor do estado fundamental de uma partícula no poço de potencial finito.

A solução é dada pela intersecção entre as duas curvas. O limite $V_0 \rightarrow \infty$ resulta na solução $E = E_1$, correspondendo ao estado fundamental de uma partícula no poço de potencial infinito.

7.5- Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico clássico é um dos sistemas mecânicos mais importantes da física. Sua descrição quântica serve de modelo para explicar diversos efeitos observados em sistemas microscópicos. Um exemplo disso é a interação de dois átomos numa molécula diatômica. A fig. 7.13 mostra o comportamento da energia potencial $V(r)$ que varia com a separação r entre os dois átomos, simulando propriedades dinâmicas da molécula.

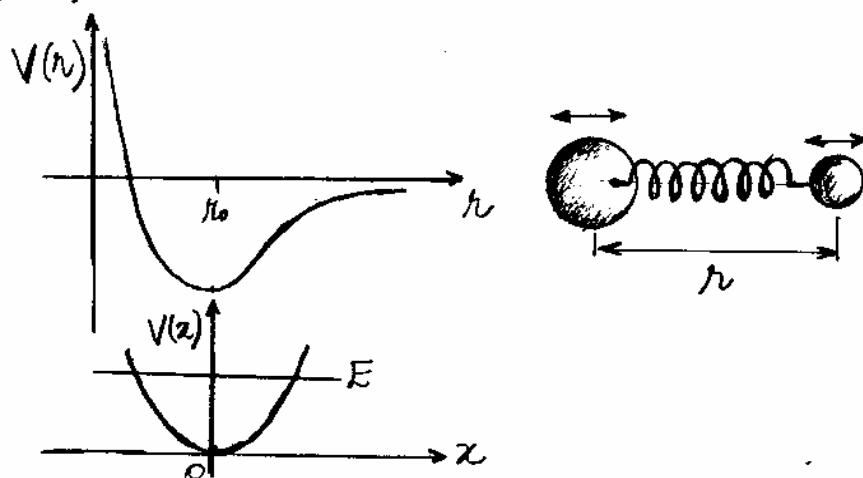


Fig. 7.13 - Modelo de energia potencial para uma molécula diatômica. O potencial de um oscilador harmônico $V(x)$ como uma aproximação para o caso real.

A função $V(r)$ tem uma posição de equilíbrio numa separação r_0 , onde $dV(r)/dr = 0$. Expandindo-se $V(r)$ em uma série de potências em torno do ponto de equilíbrio $r=r_0$, obtém-se

$$V(r) = V(r_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 V}{dr^2} \right)_{r_0} (r-r_0)^2 + \dots \quad (7.77)$$

Note que o termo linear em $(r-r_0)$ não está presente uma vez que $(dV(r)/dr)_{r_0} = 0$. Se a oscilação ocorrer somente nas vizinhanças de $r=r_0$, a diferença $r-r_0$ será muito pequena e os termos de altas ordens em $r-r_0$, poderão ser desprezados. Definindo-se $x = r - r_0$ e $V(x) = V(r-r_0)$, a origem $x = r - r_0 = 0$, do eixo x será colocada no ponto $r=r_0$. O nível de referência para o sistema de coordenadas não é importante. Em particular pode-se escolher a origem do eixo x em $r=r_0=0$ e o potencial correspondente $V(r_0) = V(0) = 0$, como ilustrado na fig. 7.13. De acordo com o que foi discutido acima, a eq. (7.77) pode ser escrita, como

$$V(x) \simeq \frac{1}{2} k x^2 \quad (7.78)$$

onde,

$$k = \left[d^2 V(x) / dx^2 \right]_{x=0} \quad (7.79)$$

que é exatamente a forma da energia potencial de um oscilador harmônico simples.

A descrição quântica do oscilador harmônico é baseada nas soluções da equação de Schrödinger independente do tempo, para o potencial dado na eq. (7.78), isto é

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{k}{2} x^2 - E \right) \psi = \frac{mk}{\hbar^2} \left(x^2 - \frac{2E}{k} \right) \psi \\ &= \frac{\sqrt{mk} \sqrt{mk}}{\hbar \hbar} \left(x^2 - \frac{2E}{k} \right) \psi\end{aligned}$$

ou,

$$\frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x^2 - \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \frac{2E}{k} \right) \psi = \left(\frac{\sqrt{mk}}{\hbar} x^2 - \sqrt{\frac{m}{k}} \frac{2E}{\hbar} \right) \psi$$

ou ainda,

$$\frac{1}{\alpha} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\alpha x^2 - \frac{2E}{\hbar\omega_0} \right) \psi \quad (7.80)$$

onde,

$$\alpha = \sqrt{mk} / \hbar \quad (7.81)$$

e,

$$\omega_0 = \sqrt{k/m} \quad (7.82)$$

Introduzindo-se uma variável adimensional ξ e um parâmetro adimensional λ , dados por

$$\xi = \sqrt{\alpha} x \quad (7.83)$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{\hbar\omega_0} \quad (7.84)$$

tem-se

$$\frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha} ; \quad \frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{d\xi}$$

ou, por essas duas equações,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d}{d\xi} \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \frac{d\xi}{dx} = \frac{d}{d\xi} \left(\sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{d\xi} \right) \sqrt{\alpha} = \alpha \frac{d^2\psi}{d\xi^2} \quad (7.85)$$

Substituindo-se as eqs. (7.85), (7.84) e (7.83) na eq. (7.80), obtém-se

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \lambda) \psi \quad (7.86)$$

Nesta equação a autofunção ψ é considerada como uma função da nova variável ξ . Note que λ assume o papel de autovvalor nesta equação no lugar de E da equação original. Para se entender a estrutura da equação diferencial de segunda ordem da eq. (7.86), deve-se examinar alguns resultados clássicos do oscilador harmônico. Para um oscilador harmônico clássico, a energia total E é toda potencial $V(x)$ quando a posição x da partícula corresponder a amplitude A , isto é

$$E = \frac{1}{2} k A^2$$

ou,

$$A^2 = \frac{2E}{k} \quad (7.87)$$

Por outro lado, assumindo-se $x = A$ na eq. (7.83), tem-se a condição de máximo para a variável ξ , dada por

$$\xi_{\max} = \sqrt{\alpha} A$$

ou, da eq. (7.81),

$$\xi_{\max}^2 = \alpha A^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} A^2 \quad (7.88)$$

ou, do ponto de vista clássico, de acordo com a eq. (7.87), e da eq. (7.84),

$$\xi_{\max}^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} \frac{2E}{k} = \sqrt{\frac{m}{k}} \frac{2E}{\hbar} = \lambda \quad (7.89)$$

Essa relação tem um significado especial no problema quântico por causa da presença do fator $(\xi \leq \lambda)$ na eq. (7.86). Nota-se nessa equação, que os fatores $d^2\psi/d\xi^2$ e ψ tem sinais opostos para $\xi^2 < \lambda = \xi_{\max}^2$ e mesmos sinais para $\xi^2 > \lambda = \xi_{\max}^2$. Essas duas condições delimitam as regiões classicamente permitida e proibida respectivamente, como ilustra a fig. 7.14.

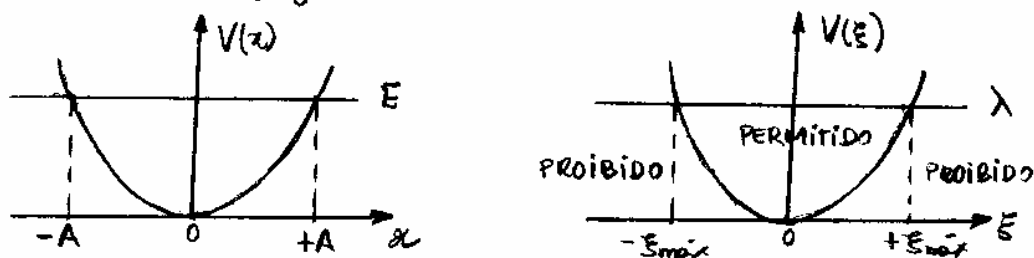


fig. 7.14 - Regiões classicamente permitida e proibida para o oscilador harmônico.

Espera-se, evidentemente, uma probabilidade pequena de se encontrar a partícula na região classicamente proibida $\xi^2 > \lambda = \xi_{\max}^2$. Nas condições, a autofunção ψ deve se anular para valores grandes de ξ^2 . Uma solução Gaussiana $\psi_0(\xi)$ é apropriada para a garantia dessa condição:

$$\psi_0(\xi) = B e^{-\xi^2/2} \quad (7.90)$$

cujas derivadas primeira e segunda são,

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_0}{d\xi} &= -B \xi e^{-\xi^2/2} \\ e, \quad \frac{d^2\psi_0}{d\xi^2} &= B (\xi^2 e^{-\xi^2/2} - e^{-\xi^2/2}) = (\xi^2 - 1) B e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - 1) \psi_0 \end{aligned}$$

Assim, nota-se que a solução (7.90) satisfaz a equação diferencial (7.86) quando λ assume o valor particular:

$$\lambda = \lambda_0 = 1 \quad (7.91)$$

Da eq. (7.84) o autovalor correspondente para essa solução, é

$$E_0 = \frac{\hbar \omega_0}{2} \lambda_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \quad (6.92)$$

De acordo com as eqs. (7.83) e (7.81), a solução (7.90) é escrita em termos da variável x como,

$$\psi_0(x) = B e^{-\alpha x^2/2} = B e^{-\sqrt{mk} x^2/2\hbar} \quad (7.93)$$

e a função de onda associada, é

$$\psi_0(x,t) = \psi_0(x) e^{-iE_0 t/\hbar} = B e^{-\sqrt{mk} x^2/2\hbar} e^{-iE_0 t/\hbar}$$

Cuja normalização resulta, em

$$\psi_0(x,t) = \left(\frac{mk}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/8} e^{-\sqrt{mk} x^2/2\hbar} e^{-iE_0 t/\hbar} \quad (7.94)$$

Como se concluirá em seguida, essa simples solução da eq. (7.86) é uma função de onda associada ao menor valor do parâmetro λ e autovalor de energia E . Logo, a função de onda $\psi_0(x,t)$ e a energia E_0 referem-se ao estado fundamental do oscilador harmônico.

É razoável esperar que as soluções da eq. (7.86) para estados excitados do oscilador harmônico devam também decair rapidamente nas regiões classicamente proibidas. Uma solução geral com esse comportamento, é

$$\psi(\xi) = H(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (7.95)$$

onde o fator $H(\xi)$ tem uma forma polinomial.

Essa função polinomial pode ser determinada encontrando-se inicialmente a equação diferencial satisfeita por $H(\xi)$ e, em seguida, sua solução.

De acordo com a eq. (7.95), as derivadas primeira e segunda de $\psi(\xi)$ são, respectivamente:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \frac{dH}{d\xi} e^{-\xi^2/2} - (H\xi) e^{-\xi^2/2}$$

e,

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \frac{d^2H}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} - 2 \frac{dH}{d\xi} \xi e^{-\xi^2/2} - H e^{-\xi^2/2} + H \xi^2 e^{-\xi^2/2}$$

cuja substituição na eq. (7.86), resulta em

$$\left[\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\xi^2 - 1)H \right] e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - \lambda) H e^{-\xi^2/2}$$

ou,

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \quad (7.96)$$

Note que esta equação é automaticamente satisfeita para o estado fundamental no qual $H = \text{constante}$, uma vez que isso resulta em $\lambda = 1$.

As soluções fisicamente aceitáveis da eq. (7.96) estão restritas a formas polinomiais para $H(\xi)$, uma vez que, qualquer outro tipo de função não satisfaz a condição de decaimento de $\psi(\xi)$ para grandes valores de ξ^2 .

Adotando-se este fato sem provas, pode-se introduzir um inteiro n para denotar a ordem desses polinômios.

Nota-se que a energia potencial $V(x)$ do oscilador harmônico é uma função simétrica de x , e assim, espera-se encontrar autofunções de paridade definidas, como ocorrem nas poluções do poço de potencial na eq. 7.4.

Como o fator $e^{-\xi^2/2}$ na eq. (7.95) é uma função par de ξ , segue que cada polinômio $H(\xi)$ deve ser uma função par ou ímpar dessa variável, isto é

$$H_n(\xi) = \begin{cases} \sum_{\text{par } k=0}^n a_k \xi^k & \text{para } n \text{ par} \\ \sum_{\text{ímpar } k=1}^n a_k \xi^k & \text{para } n \text{ ímpar} \end{cases} \quad (7.97)$$

A eq. (7.96) será então resolvida encontrando-se os coeficiente a_k .

Com a finalidade de encontrar os valores permitidos do parâmetro $\lambda = \lambda_n$ na eq. (7.96), e por consequência os autovalores de energia $E = E_n$, é suficiente examinar os polinômios de paridade positiva nas eqs. (7.97):

$$H_n = a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \dots + a_n \xi^n, \text{ onde } a_n \neq 0 \quad (7.98)$$

As derivadas primeira e segunda desta equação, são

$$H'_n = 2a_2 \xi + 4a_4 \xi^3 + \dots + na_n \xi^{n-1}$$

e,

$$H''_n = 2a_2 + 12a_4 \xi^2 + \dots + n(n-1)a_n \xi^{n-2}$$

cujas inseridas na eq. (6.96) resulta, em

$$2a_2 + 12a_4 \xi^2 + \dots + n(n-1)a_n \xi^{n-2} - 2\xi[2a_2 \xi + \dots + na_n \xi^{n-1}]$$

$$+ (\lambda_n - 1)[a_0 + a_2 \xi^2 + \dots + a_n \xi^n] = 0$$

ou,

$$2a_2 + 4(3a_4 - a_2)\xi^2 + \dots + n(n-1)a_n \xi^{n-2} - 2na_n \xi^n +$$

$$(\lambda_n - 1)a_0 + (\lambda_n - 1)a_2 \xi^2 + \dots + (\lambda_n - 1)a_n \xi^n = 0$$

As somas dos coeficientes de cada potência de ξ devem se anular, potência a potência, para satisfazer a equação acima. Em particular, os coeficientes de ξ^n resultam na seguinte condição:

$$-2na_n + (\lambda_n - 1)a_n = 0 \Rightarrow [-2n + (\lambda_n - 1)]a_n = 0$$

Como $a_n \neq 0$, conclui-se, que

$$\lambda_n = 2n + 1 \quad (7.99)$$

Substituindo-se a eq. (7.99) na equação diferencial (7.96), obtém-se

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \quad (7.100)$$

Esta é uma equação diferencial especial denominada de equação diferencial de Hermite, cuja soluções são polinômios de Hermite muito bem estabelecidos pelos matemáticos. Os primeiros polinômios de Hermite estão listados abaixo:

$$H_0(\xi) = 1 ; H_1(\xi) = 2\xi \quad (7.101)$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 ; H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \dots$$

O número inteiro n na eq. (7.99) introduz um número quântico para nivelar os estados estacionários do oscilador harmônico. Substituindo-se a eq. (7.99) na eq. (7.89), obtém-se a relação para os possíveis autovalores de energia E_n permitidos para este sistema:

$$E_n = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \lambda_n = (n + 1/2) \hbar \omega_0 \quad (7.102)$$

Desta equação, nota-se que as energias discretas ΔE são igualmente espaçadas, por

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar \omega_0 = h\nu_0 \quad (7.103)$$

Note que esse espaçamento é igual a energia do oscilador quântico $\Delta E = h\nu$, idealizado por Planck na radiação do corpo negro.

A fig. 7.15 mostra as primeiras autofunções para o oscilador harmônico bem como, os respectivos autovalores permitidos, de acordo com as eqs. (7.95) e (7.102).

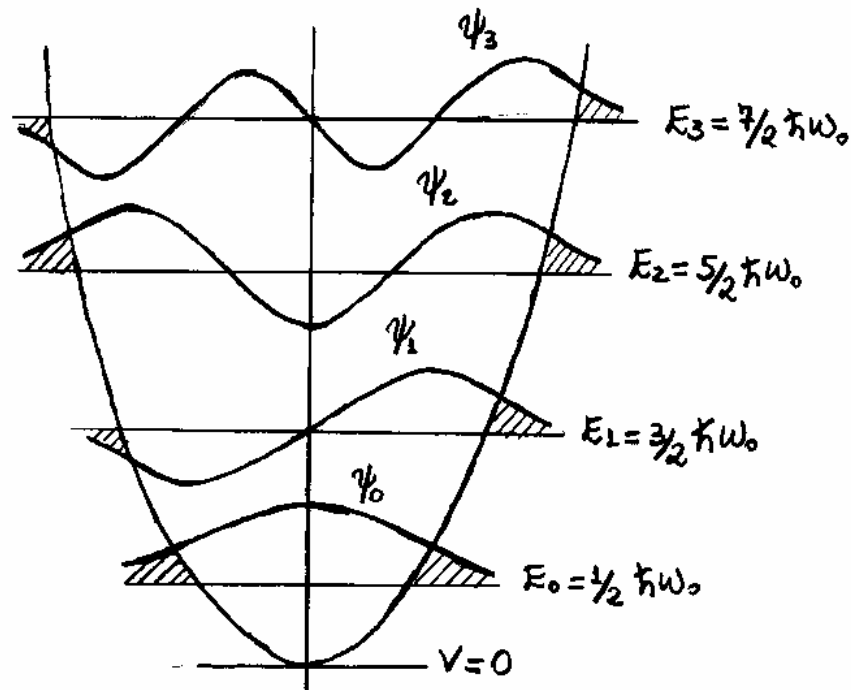


fig. 7.15 - Alguns estados estacionários permitidos para o oscilador harmônico quântico.

A figura mostra também como as autofunções "penetram" nas regiões classicamente proibidas, e como os nós de ψ_n aumentam em número com a energia E_n . Esse comportamento é uma característica geral de qualquer solução da equação de Schrödinger.

Lista de Exercícios

1- Por que na mecânica clássica não é possível ter-se $E < V(x)$? Por que isto é possível na mecânica quântica, desde que haja alguma região na qual $E > V(x)$?

2- Se duas ondas de mesmas amplitudes se propagam em sentidos contrários obtém-se uma onda estacionária. Que tipo de onda obtém-se se as amplitudes não forem iguais?

3- O que você entende exatamente sobre o fluxo de probabilidade?

4- O que significa exatamente afirmar que o coeficiente de reflexão é unitário para uma partícula incidindo sobre um potencial degrau com energia total menor do que a altura do degrau? O que significa exatamente afirmar que o coeficiente de reflexão é menor do que a unidade se a energia total for maior que a altura do degrau? O coeficiente de reflexão pode ser maior que a unidade?

5- Uma partícula incide sobre uma barreira de potencial, com energia total menor do que a altura da barreira, e é refletida. A reflexão envolve apenas a primeira descontinuidade do potencial? Se a outra descontinuidade fosse retirada, de forma que a barreira se transformasse em um degrau, o coeficiente de reflexão mudaria?

6- No sol, dois núcleos de Hidrogênio em movimento térmico violento podem colidir penetrando a barreira coulombiana que os separa. A massa do núcleo resultante é menor do que a soma das massas dos dois núcleos de iniciais, de forma que ocorre grande liberação de energia. Este processo de fusão nuclear é responsável pela emissão de calor pelo sol. Quais seriam as consequências para a vida na terra se isso não pudesse ocorrer?

7- Por que os poços quadrados finitos têm apenas um número finito de autovalores ligados? Quais são as características dos autovalores não ligados?

8- Como seria uma autofunção de onda estacionária para um autovalor não ligado de um poço de potencial quadrado finito?

9- Se as autofunções de um potencial tem paridades definidas, a de menor energia tem sempre paridade positiva. Explique por que.

10- Para o caso de um degrau de potencial com $E > V_0$ em que os coeficientes de reflexão e

transmissão são $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$ e $T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$, mostre que $R + T = 1$.

11- Mostre que a expressão $T = \left[1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}$, para o coeficiente de transmissão para a

penetração de uma barreira de potencial retangular, se reduz à $T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2k_2 a}$ se $k_2 a \gg 1$.

12- (a) Calcule o coeficiente de transmissão para um elétron de energia total $E = 2eV$ incidente sobre uma barreira de potencial retangular de altura $V_0 = 4eV$ e largura $a = 10^{-10}m$ (dimensão atômica), usando a relação exata e aproximada citadas na questão anterior. (b) Repita os cálculos para uma barreira de largura $a = 10^{-9}m$.

13- Um próton e um dêuteron (partícula de mesma carga do próton, mas de massa duas vezes maior) tentam penetrar em uma barreira de potencial retangular de altura $V_0 = 10MeV$ e largura $a = 10^{-14}m$ (dimensão nuclear). As duas partículas tem energias totais $E = 3MeV$. Use argumentos qualitativos para prevê qual das partículas tem mais chance de consegui-lo.

14- Um átomo do gás nobre Kriptônio exerce um potencial atrativo sobre um elétron não ligado, que varia muito bruscamente. Devido a isto, é uma aproximação razoável descrever o potencial como um poço quadrado atrativo, de dimensão da ordem do raio atômico, $4 \times 10^{-10}m$. As experiências que um elétron com energia cinética $E = 0.7eV$, nas regiões fora do átomo, pode atravessá-lo sem sofrer reflexão alguma. Esse é o fenômeno do **efeito Ramsauer** para uma poço quadrado atrativo. Use essas informações para fazer uma estimativa da profundidade do poço de potencial quadrado. (Sugestão: Use o fato que cabe exatamente um comprimento de onda de de Broglie na largura do poço nas condições do **efeito Ramsauer**).

15- Sabendo-se que as massas do elétron e do nêutron são respectivamente, $m_e = 9.1 \times 10^{-31}kg$ e $m_n = 1.67 \times 10^{-27}kg$, faça uma estimativa das energias de ponto zero de um elétron e de um nêutron em um poço quadrado infinito de largura igual ao diâmetro nuclear $a = 10^{-14}m$, e compare esse resultados.

16- Sabendo-se que as energias permitidas para uma partícula num poço de potencial infinito são $E_n = n^2 E_0$, onde E_0 é a energia do estado fundamental, mostre que a diferença fracional em energia entre autovalores adjacentes é $\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}$. Use esta relação para discutir o limite clássico do sistema.

17- Aplique a condição de normalização para mostrar que o valor da constante multiplicativa para a autofunção com $n = 3$ do poço de potencial infinito é $B_3 = \sqrt{2/a}$.

18- Use as autofunções ψ_1 e ψ_3 para o poço de potencial infinito para mostra a propriedade de ortogonalidade

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x) \psi_3(x) dx = 0$$

(Sugestão: Use a relação $\cos u \cos v = \frac{1}{2} [\cos(u+v) + \cos(u-v)]$).

19- A constante da força restauradora K para as vibrações interatômicas de uma molécula diatômica típica é da ordem de $10^3 J / m^2$. (a) Use esse valor para fazer uma estimativa da energia de ponto zero das vibrações moleculares. (b) Faça uma estimativa da diferença em energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado da molécula vibrante. (c) A partir dessa estimativa, determine a energia do fóton emitido por vibrações da distribuição de carga quando o sistema faz uma transição entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental. (d) Determine o comprimento de onda desta transição e descubra em que região do espectro eletromagnético está a radiação emitida.