

MECÂNICA QUÂNTICA I

LEFT – 3º ANO, 1º Sem (P1). (2021/2022)

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\Delta x_i \Delta p_i \geq \frac{\hbar}{2}$$

SUMÁRIO:

- POTENCIAIS A UMA DIMENSÃO (Griff. 2.2-2.6, Gas. 3-3, 3-5, 4)
- A partícula livre
- Estados ligados e de dispersão
- Poços de potencial (infinito e finito)



DF
DEPARTAMENTO
DE FÍSICA
TÉCNICO LISBOA

Filipe Rafael Joaquim

Centro de Física Teórica de Partículas (CFTP) – DF -IST

filipe.joaquim@tecnico.ulisboa.pt, Ext: 3704, Gab. 4-8.3

Agora que aprendemos o básico...

Vamos começar a caracterizar sistemas quânticos simples.

Sabendo as características ou, noutras palavras, o Hamiltoniano, como calcular a função de onda, espectro de energia, valores esperados, etc etc...

Uma partícula livre tem apenas energia cinética:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t) \xrightarrow{V(x) = 0} i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$



Solução separável:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) \xrightarrow{\quad} i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = E \varphi(t), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x)$$

E.S. independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x) \xrightarrow{\quad} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Solução: combinação linear das ondas planas

$$\psi_{\pm}(x) = A_{\pm} e^{\pm i k x}$$

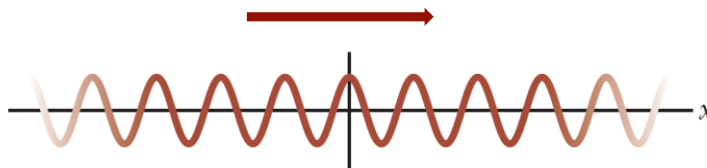
$$\psi_k(x) = A_+ e^{i k x} + A_- e^{-i k x}$$

Em função do tempo: $\xrightarrow{E = \hbar \omega}$ $\Psi_k(x, t) = A_+ e^{i(kx - \omega t)} + A_- e^{-i(kx + \omega t)}$

- As ondas planas $\psi_{\pm}(x) = A_{\pm}e^{\pm ikx}$ são **auto-estados do momento**

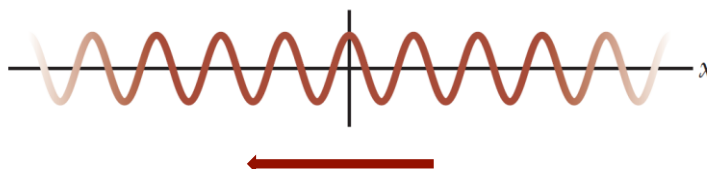
$$\hat{p}\psi_{\pm}(x) = -i\hbar\frac{\partial\psi_{\pm}(x)}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial(A_{\pm}e^{\pm ikx})}{\partial x} = \pm\hbar k\psi_{\pm}(x) = \pm p\psi_{\pm}(x)$$

$$\psi_{+}(x) = A_{+}e^{ikx}$$



Onda a propagar-se
para a **direita**

$$\psi_{-}(x) = A_{-}e^{-ikx}$$



Onda a propagar-se
para a **esquerda**

- **As ondas planas** $\psi_{\pm}(x) = A_{\pm}e^{\pm ikx}$ são auto-estados de energia

$$\hat{H}\psi_{\pm}(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_{\pm}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{\pm}(x)}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi_{\pm}(x) \longrightarrow E_{\pm} \equiv E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- **Densidade de probabilidade:** $\rho_{\pm}(x, t) = |A_{\pm}|^2$ não depende de x ou t ...

$\rho_{\pm}(x, t) = |A_{\pm}|^2 \longrightarrow$ A probabilidade de a partícula estar em qualquer região do espaço é constante, ou seja $\Delta x = \infty$

$\Delta x = \infty \rightarrow \Delta p = 0 \longrightarrow$ Consistente! As ondas planas têm momento bem definido!

❑ **Normalização:** $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = |A_{\pm}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty \longrightarrow$ **Unphysical!**

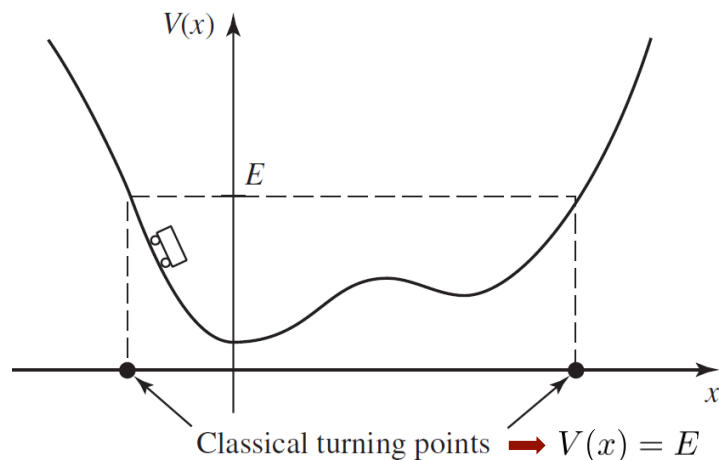
Mas, não existe tal coisa como uma partícula com momento totalmente definido...

Solução: Pacotes de onda... A solução físicas da E.S. não são as ondas planas mas sim os pacotes de onda.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \xrightarrow{\text{amplitude}} \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

Vamos considerar uma partícula sujeita a um potencial $V(x)$

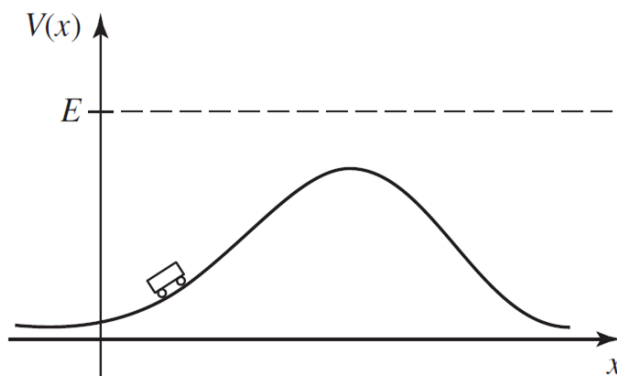
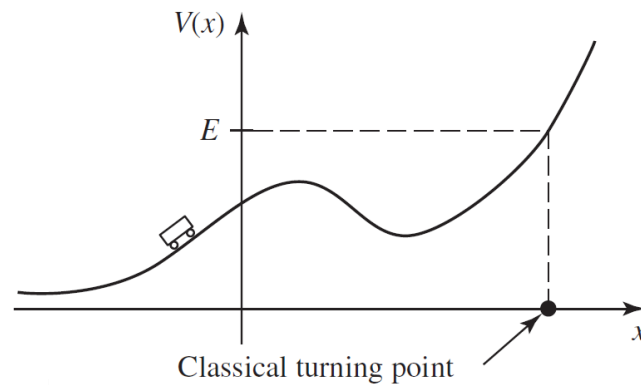
Estado ligado (bound state): a partícula está ligada ao potencial. Não consegue escapar.



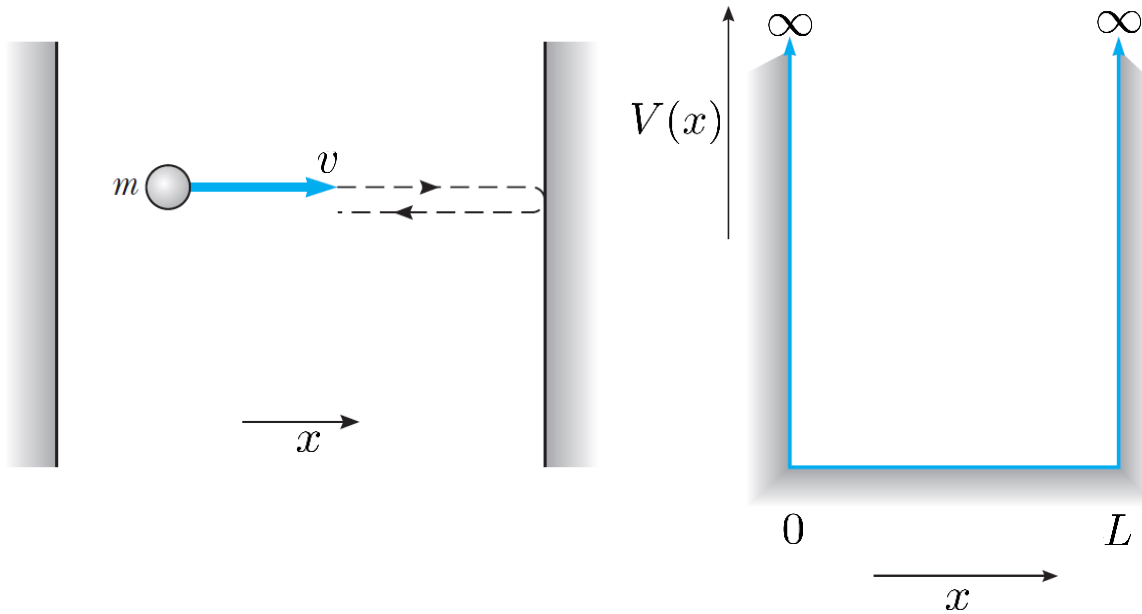
$$\begin{cases} E < V(-\infty) \text{ and } V(+\infty) \Rightarrow \text{Estado ligado} \\ E > V(-\infty) \text{ or } V(+\infty) \Rightarrow \text{Estado de dispersão} \end{cases}$$

Existem potenciais que apresentam estados ligados e de dispersão dependendo da energia da partícula.

Estado de dispersão (scattering state): a partícula não está ligada ao potencial. Algures, a sua energia é superior ao potencial.



O POÇO DE POTENCIAL INFINITO (assimétrico)



Poço de potencial infinito:

a partícula está confinada a uma certa região do espaço.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases}$$

O potencial infinito em 0 e L simula a existência de paredes rígidas.

❑ A probabilidade de a partícula estar em $|x| > L$ é nula, logo $\Psi(x, t) = 0$

❑ Para a região dentro do poço:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t) \quad \xrightarrow{V(x) = 0} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

Solução separável: $\Psi(x, t) = u(x)\varphi(t) \longrightarrow i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = E \varphi(t), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = E u(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = E u(x) \longrightarrow \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = -k^2 u(x), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{Solução: } u(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

$$\xrightarrow{\psi(0) = \psi(L) = 0} B = 0, \quad k_n L = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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

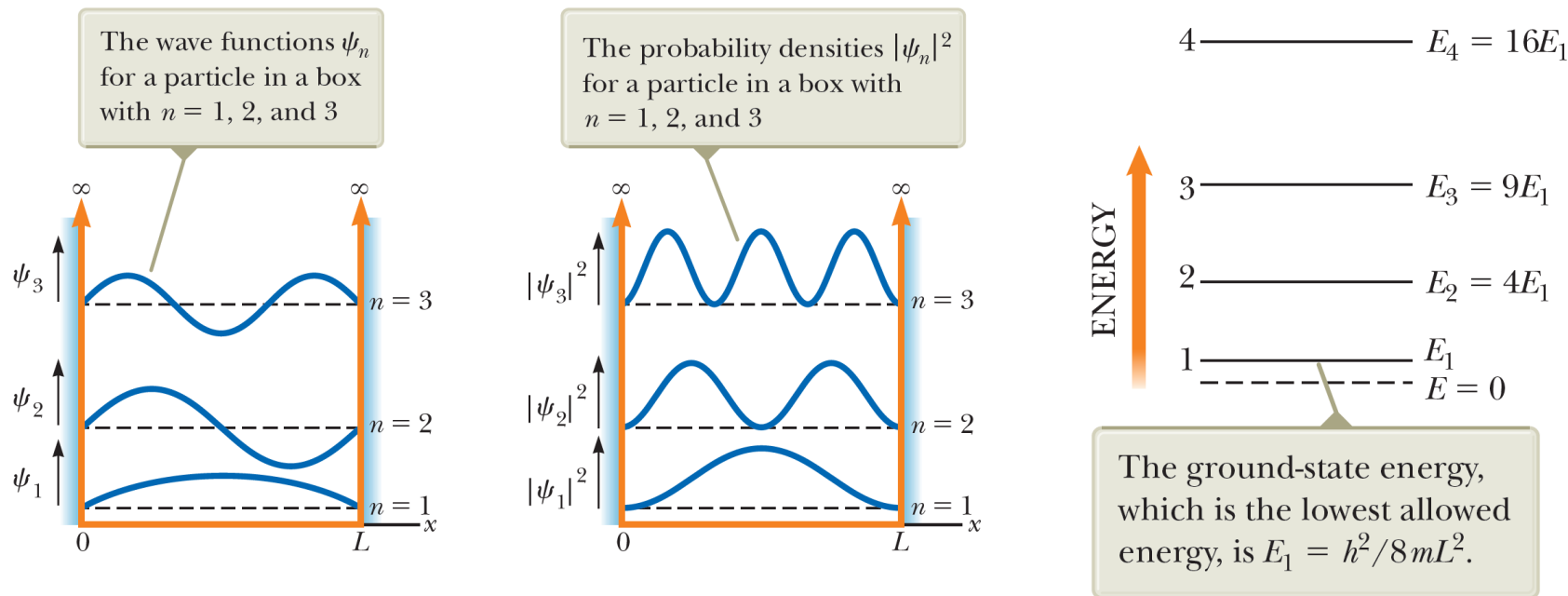
FUNÇÕES PRÓPRIAS: $u_n(x) = A \sin(k_n x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$

NORMALIZAÇÃO: $\int_0^L u_n^*(x) u_n(x) dx = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_m^*(x) u_n(x) dx = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{\sin[(m-n)\pi]}{(m-n)} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{(m+n)} \right\} = 0 \longrightarrow \int u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{mn}$$

O POÇO DE POTENCIAL INFINITO (assimétrico)



- ❑ O número de nodos de ψ_n é igual a $(n+1)$. Os c.d.o são $\lambda_n = \frac{2L}{n}$, $n = 1, 2, 3, \dots$
- ❑ A base das funções $u_n(x)$ é completa, i.e. qualquer função pode ser escrita como uma sobreposição destas funções.

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_n c_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \longrightarrow c_n = \int_0^L u_n^*(x) \psi(x) dx$$

- Suponhamos que em $t = 0$ a partícula está num estado $\psi_0(x)$ arbitrário. Qual a função de onda para $t > 0$?

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_n c_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \longrightarrow c_n = \int u_n^*(x) \psi_0(x) dx$$

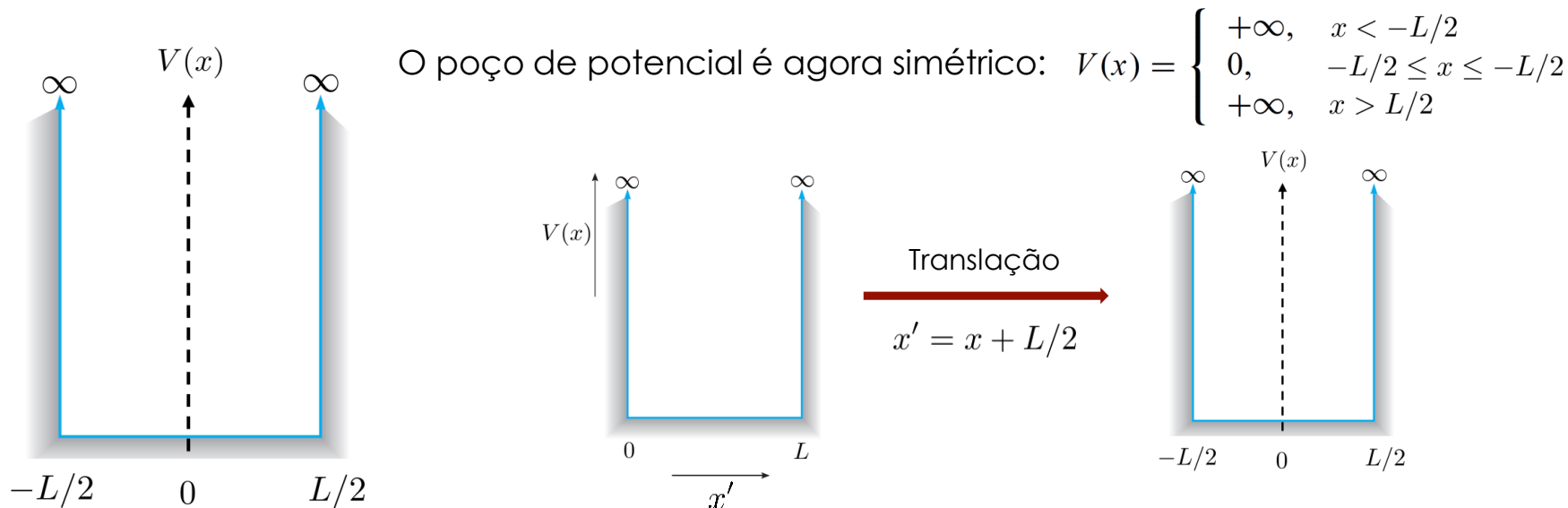


$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right), \quad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Para $t > 0$

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_n c_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-i \frac{\hbar n^2 \pi^2}{2m L^2} t}, \quad c_n = \int u_n^*(x) \psi_0(x) dx$$

Onde se teve em conta que: $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2$



- ❑ O Hamiltoniano do sistema é invariante debaixo de translações: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Então, o espectro é o mesmo do obtido para o poço de potencial assimétrico: $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$

- ❑ As funções próprias são obtidas fazendo a translação

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x'\right) \xrightarrow{x' = x + L/2} = \begin{cases} u_n^-(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), & n = 2, 4, 6, \dots \text{ Funções ímpares} \\ u_n^+(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right), & n = 1, 3, 5, \dots \text{ Funções pares} \end{cases}$$

- ❑ Paridade: $\hat{P} : x \rightarrow -x \longrightarrow \hat{P} u_n^\pm(x) = \pm u_n^\pm(x)$



$[\hat{H}, \hat{P}] = ?$ Significado?

Uma partícula move-se num poço de potencial assimétrico entre $x = 0$ e $x = a$. Em $t=0$, a função de onda é dada por:

$$\psi_0(x) = \frac{A}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{3}{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right)$$

a) Determine A

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \longrightarrow \psi_0(x) = \frac{A}{\sqrt{2}}u_1(x) + \sqrt{\frac{3}{10}}u_3(x) + \frac{1}{\sqrt{10}}u_5(x)$$

$$\psi_0(x) = \sum_n c_n u_n(x) \ , \ \sum_n |c_n|^2 = 1 \longrightarrow \frac{|A|^2}{2} + \frac{3}{10} + \frac{1}{10} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{6}{5}}$$

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{3}{5}}u_1(x) + \sqrt{\frac{3}{10}}u_3(x) + \frac{1}{\sqrt{10}}u_5(x)$$

b) Ao realizar uma medida da energia que valores se podem obter e com que probabilidades?

$$P(E_n) = |c_n|^2 \rightarrow P(E_1) = |c_1|^2 = \frac{3}{5} \ , \ P(E_3) = |c_3|^2 = \frac{3}{10} \ , \ P(E_5) = |c_5|^2 = \frac{1}{10}$$

b) Qual o valor médio da energia?

$$\bar{E} = \langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) \hat{H} \psi_0(x) dx = \sum_{m,n} c_m^* c_n E_n \int_0^L \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

$$\bar{E} = \frac{3}{5} E_1 + \frac{3}{10} E_3 + \frac{1}{10} E_5 \quad \xrightarrow{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2} \quad \bar{E} = \frac{29\pi^2 \hbar^2}{10ma^2}$$

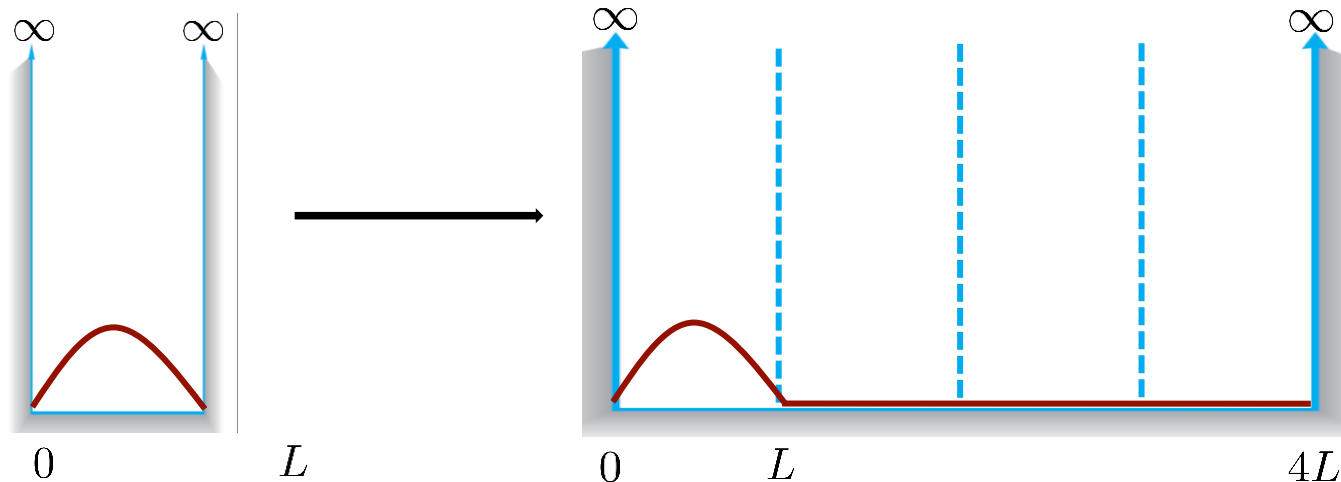
c) Qual a função de onda para $t > 0$?

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{3}{5}} u_1(x) + \sqrt{\frac{3}{10}} u_3(x) + \frac{1}{\sqrt{10}} u_5(x)$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right) \quad \downarrow$$

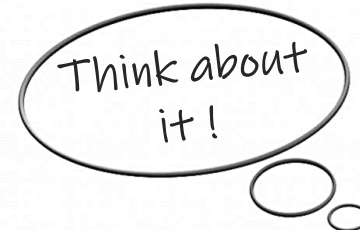
$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{3}{5}} u_1(x) e^{-i E_1 t / \hbar} + \sqrt{\frac{3}{10}} u_3(x) e^{-i E_3 t / \hbar} + \frac{1}{\sqrt{10}} u_5(x) e^{-i E_5 t / \hbar}$$

Um eletrão encontra-se confinado numa caixa de largura L . Inicialmente o eletrão encontra-se no estado fundamental. Instantaneamente a parede da direita é deslocada de L para $2L$.

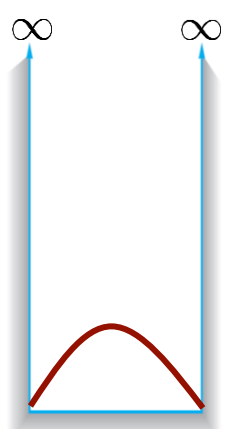


Calcule a probabilidade de encontrar o eletrão:

- a) No estado fundamental da nova caixa.
- b) No 1º estado excitado da nova caixa.



Um eletrão encontra-se confinado numa caixa de largura L . Inicialmente o eletrão encontra-se no estado fundamental. Instantaneamente a parede da direita é deslocada de L para $2L$.

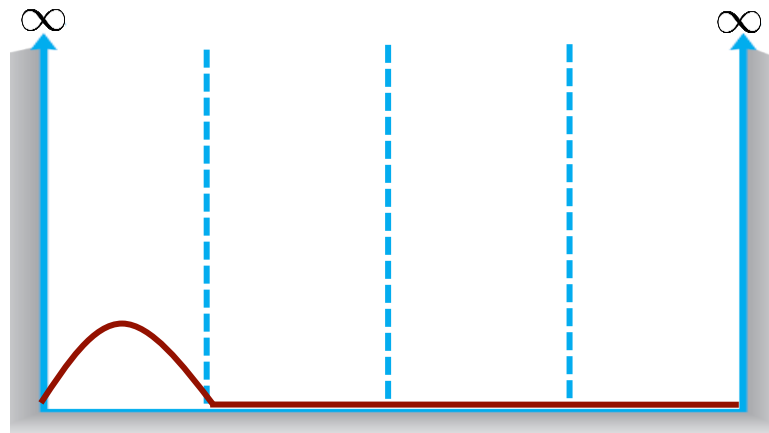


0 L

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

$$\psi_0(x) = u_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$



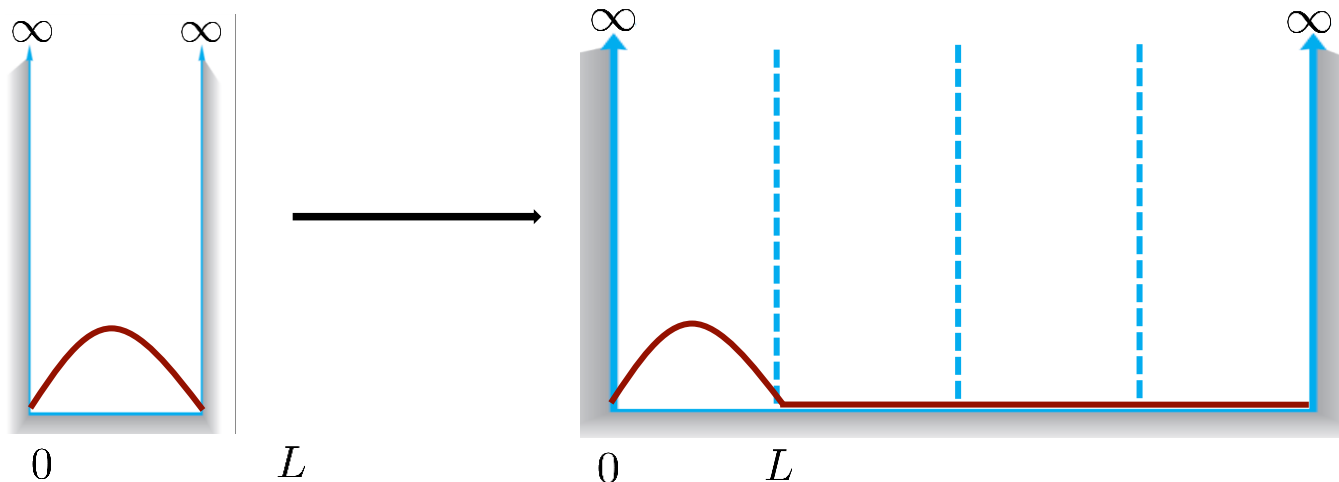
0 L

$$u'_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2L}} \sin\left(\frac{n\pi}{4L}x\right)$$

$$E'_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{32mL^2} n^2$$

$$\psi'_0(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) , & 0 < x < L \\ 0 , & x \geq L \end{cases}$$

Um eletrão encontra-se confinado numa caixa de largura L . Inicialmente o eletrão encontra-se no estado fundamental. Instantaneamente a parede da direita é deslocada de L para $2L$.



$$\psi'_0(x) = \sum_n c'_n u'_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2L}} \sum_n c'_n \sin\left(\frac{n\pi}{4L}x\right)$$

$$c'_n = \int u_n^*(x) \psi'_0(x) dx = \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L u_n^*(x) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx \longrightarrow P'_n = |c'_n|^2$$

a) No estado fundamental da nova caixa.

$$P'_1 = |c'_1|^2 = \frac{1}{L^2} \left| \int_0^L \sin\left(\frac{\pi}{4L}\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \right|^2 = \frac{128}{15^2 \pi^2} \simeq 0.058 = 5.8\%$$

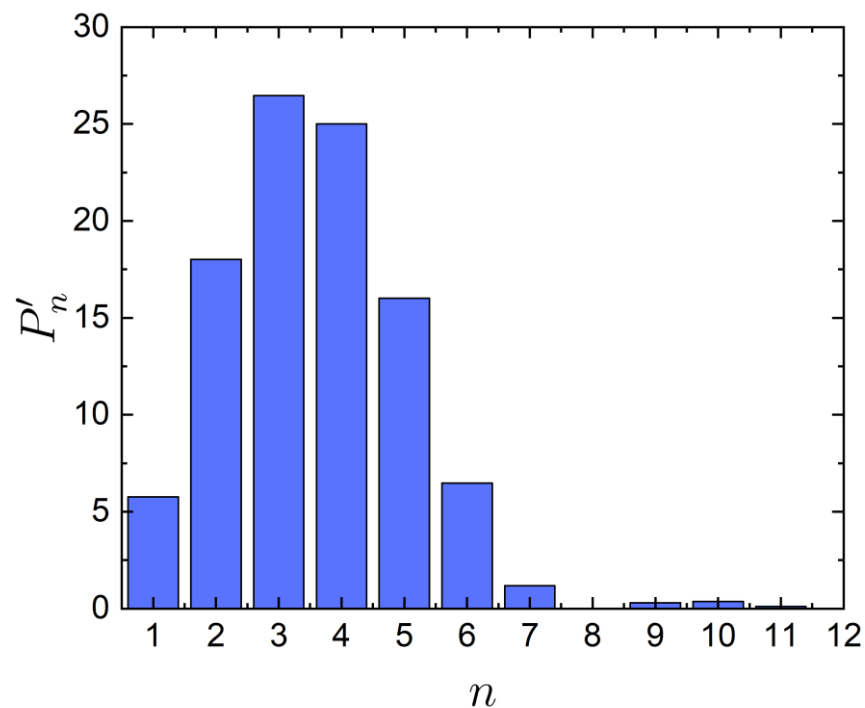
b) No 1º estado excitado da nova caixa.

$$P'_2 = |c'_2|^2 = \frac{1}{L^2} \left| \int_0^L \sin\left(\frac{\pi}{2L}\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \right|^2$$

$$= \frac{16}{9\pi^2} \simeq 0.18 = 18\%$$

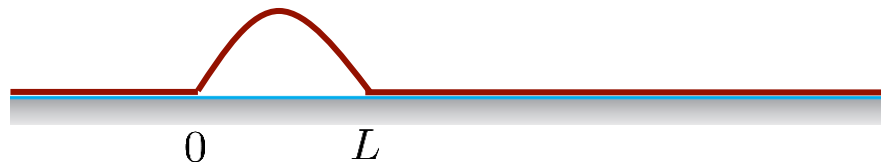
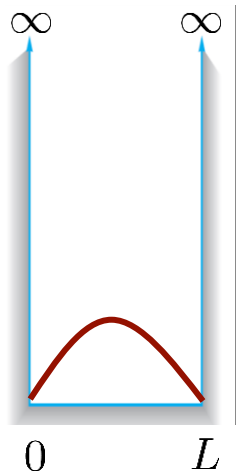
$$P'_n = |c'_n|^2 = \frac{1}{L^2} \left| \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{4L}\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \right|^2$$

$$= \frac{256 \sin^2(n\pi/4)}{(16\pi - n^2\pi)^2}$$



E SE AS PAREDES FOREM RETIRADAS INSTANTÂNEAMENTE?

Gasiorowicz, Exemplo 3-6



$$\psi'_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

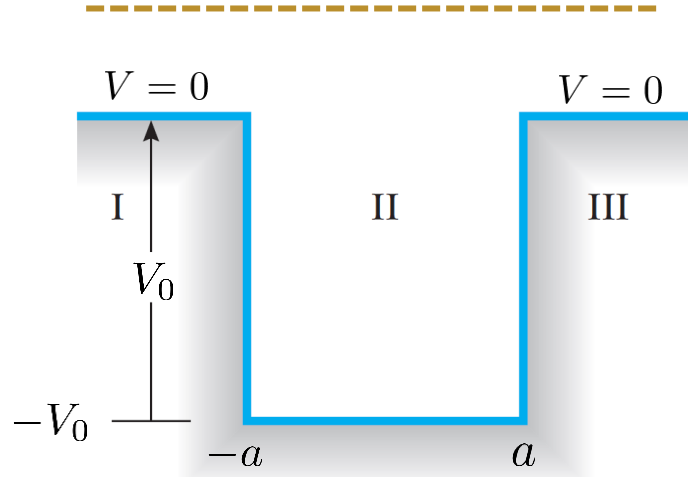
$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{\pi L}} \int_0^L \sin(\pi x/L) e^{-ikx} dx$$

$$\psi_0(x) = u_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$$

Think about
it!



$$E > 0$$



Vamos começar pela E.S. independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = [E - V(x)] u(x)$$

❑ Vamos considerar o caso com $E > 0$

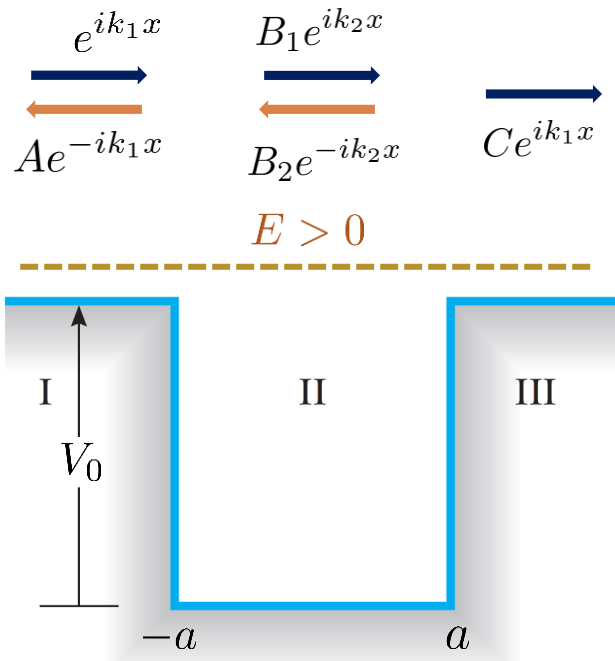
$$\text{Região I } [V(x) = 0]: \frac{\partial^2 u_I(x)}{\partial x^2} = -k_1^2 u_I(x)$$

$$u_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x}, \quad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\text{Região III } [V(x) = 0]: \frac{\partial^2 u_{III}(x)}{\partial x^2} = -k_1^2 u_{III}(x) \longrightarrow u_{III}(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}$$

$$\text{Regiões II } [V(x) = -V_0]: \frac{\partial^2 u_{II}(x)}{\partial x^2} = -k_2^2 u_{II}(x), \quad k_2^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} > 0$$

$$\longrightarrow u_{II}(x) = B_1 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$



□ Eq. da continuidade (Aula 2):

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(x, t) = 0, \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

$$\psi_{\pm}(x) = A_{\pm} e^{\pm ikx} \longrightarrow \vec{j}_{\pm} = \pm \frac{\hbar k}{m} |A_{\pm}|^2 \vec{e}_x$$

$$|\vec{j}_{\pm}| = \frac{\hbar k}{m} |A_{\pm}|^2 = |A_{\pm}|^2 \frac{p}{m} = |A_{\pm}|^2 v_{cl}$$

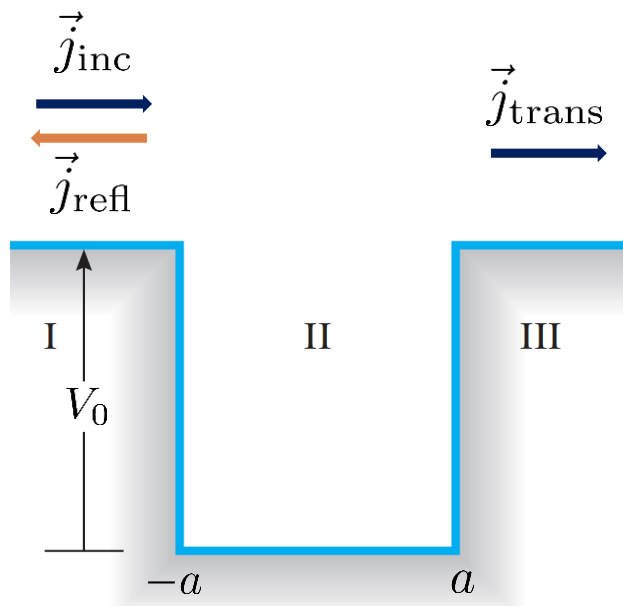
Fluxo de partículas com momento p e densidade $|A_{\pm}|^2$

$$u_I(x) = e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x}, \quad u_{II}(x) = B_1e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}, \quad u_{III}(x) = C_1e^{ik_1x}$$

□ **Continuidade da função de onda:** $u_I(-a) = u_{II}(-a), \quad u_{II}(a) = u_{III}(a)$

□ **Continuidade da derivada:** $u'_I(-a) = u'_{II}(-a), \quad u'_{II}(a) = u'_{III}(a)$

Permitem determinar os coeficientes A, B_1, B_2 e C

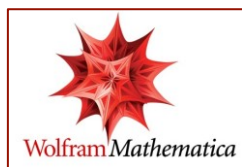


$$|\vec{j}_{\text{inc}}| = \frac{\hbar k_1}{m}, \quad |\vec{j}_{\text{refl}}| = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m}, \quad |\vec{j}_{\text{trans}}| = |C|^2 \frac{\hbar k_1}{m},$$

❑ **Coeficiente de transmissão:** $T = \left| \frac{\vec{j}_{\text{trans}}}{\vec{j}_{\text{inc}}} \right| = |C|^2$

❑ **Coeficiente de reflexão:** $R = \left| \frac{\vec{j}_{\text{refl}}}{\vec{j}_{\text{inc}}} \right| = |A|^2$

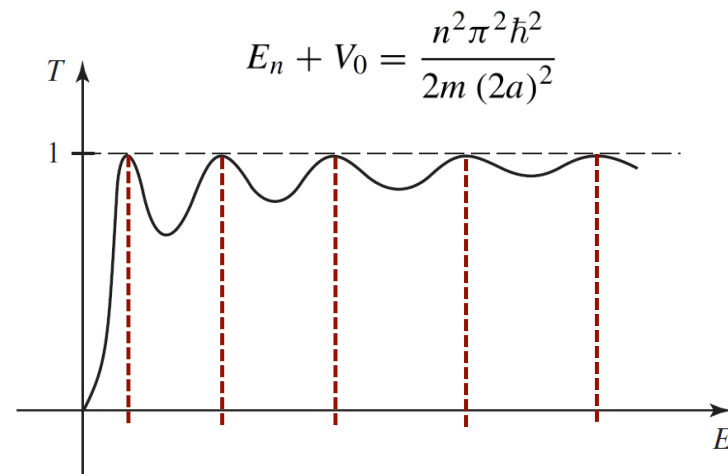
→ $R + T = 1$



Usando as relações de continuidade calculam-se os coeficientes que permitem calcular os fluxos e os coeficientes de transmissão e reflexão.

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right)$$

$$T = 1 \longrightarrow \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi$$



Demonstration of the Ramsauer-Townsend Effect in a Xenon Thyatron

STEPHEN G. KUKOLICH

Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts 02139

(Received 15 January 1968; revision received 15 April 1968)

The anomalously small scattering of electrons near 1 eV energy by noble gas atoms may be easily demonstrated using a 2D21 xenon thyatron. This experiment is suitable for a lecture demonstration or for an undergraduate physics laboratory. The probability of scattering and the scattering cross section may be obtained as a function of electron energy by measuring the grid and plate currents in the tube.

Eur. Phys. J. D (2021) 75:76
<https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-021-00083-x>

THE EUROPEAN
PHYSICAL JOURNAL D



Regular Article - ATOMIC AND MOLECULAR COLLISIONS

Ramsauer-Townsend minimum in electron scattering from CF₄: modified effective range analysis

Kamil Fedus^a and Grzegorz P. Karwasz

Institute of Physics, Faculty of Physics, Astronomy and Informatics, Nicolaus Copernicus University, Grudziadzka 5/7, 87-100 Toruń, Poland

Received 8 January 2021 / Accepted 13 February 2021 / Published online 2 March 2021
© The Author(s) 2021

Abstract. Elastic cross sections for electron scattering on tetrafluoromethane (CF₄) from 0 up to 5 eV energy are analyzed using semi-analytical approach to the modified effective range theory (MERT). It is shown that energy and angular variations of differential, integral and momentum transfer cross sections can be parameterized accurately by six MERT coefficients up to the energy region of the resonant scattering. In particular, the model is used to determine the depth and the position of the Ramsauer-Townsend minimum as well as the *s*-wave scattering length. Moreover, we investigate the influence of the dipole polarizability value on the predictions of present model. To further validate our approach, the elastic data are combined with the Born-dipole cross sections for vibrational excitations as the input data for Monte Carlo simulation of electron swarm coefficients.

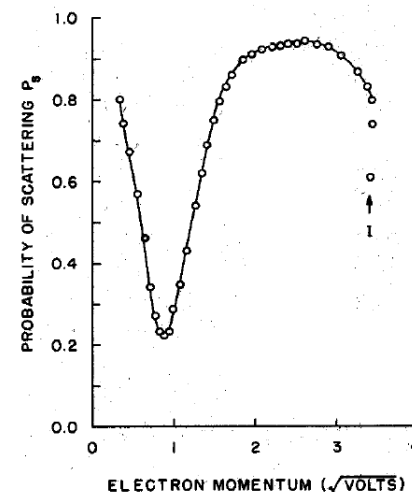
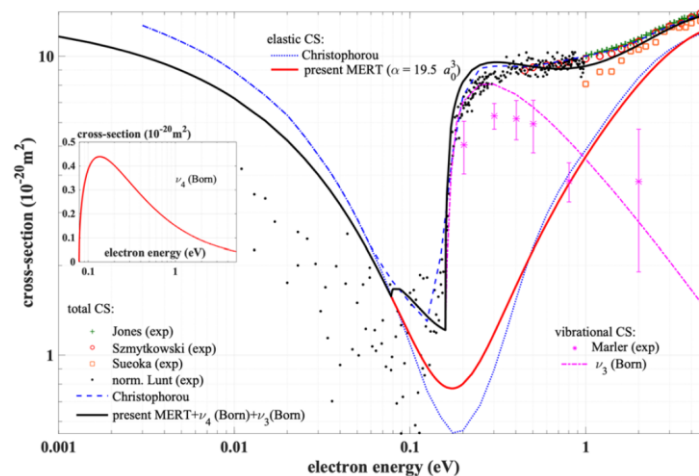
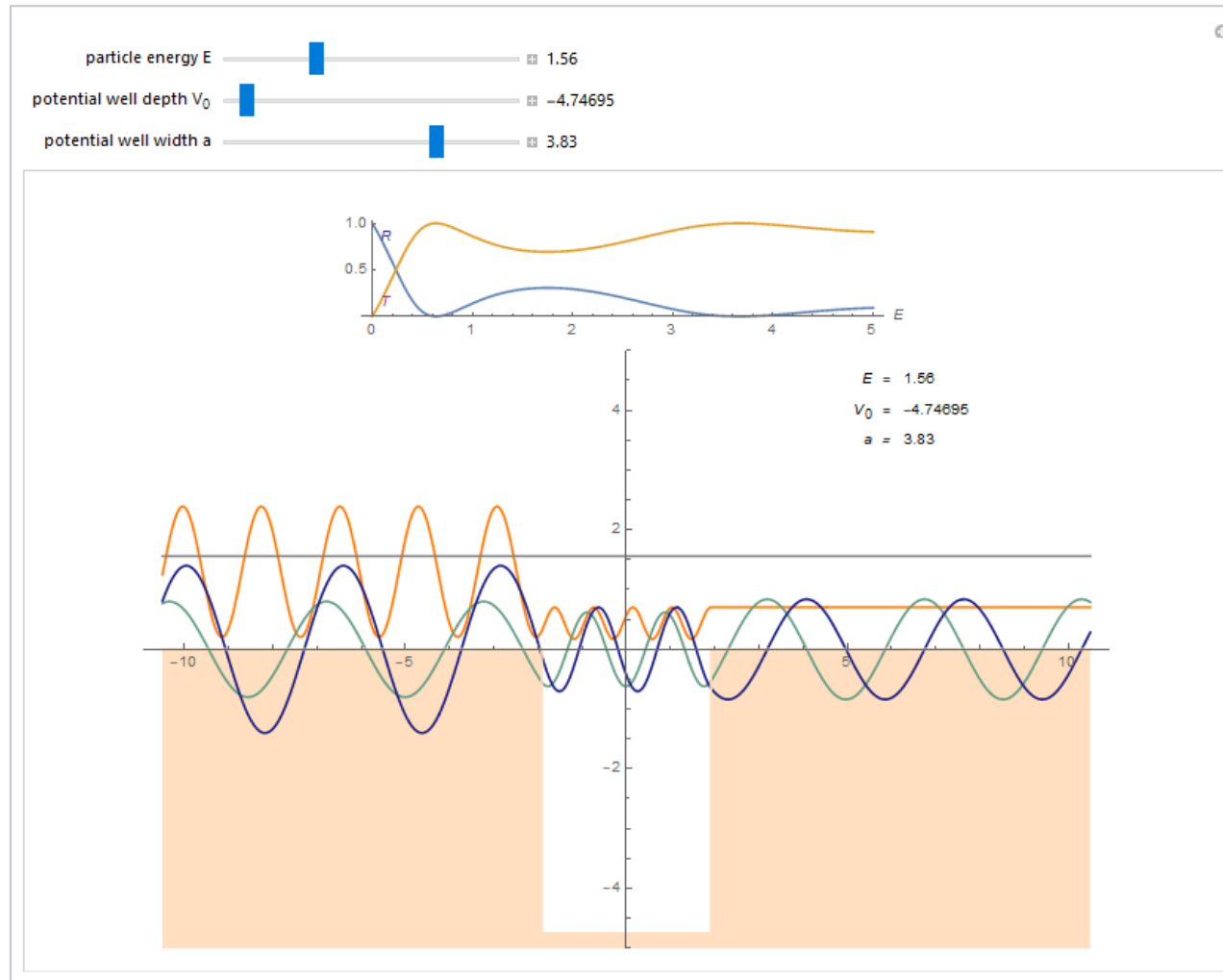


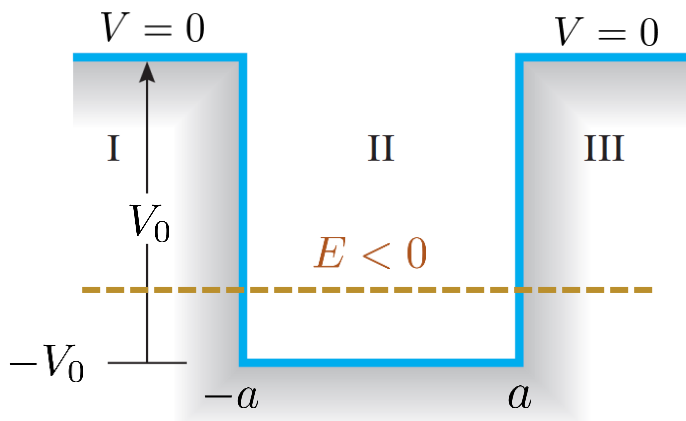
FIG. 4. The probability of scattering P_s as a function of $(V - V_0)^{1/2}$, where $V - V_0$ is the electron energy. Ionization occurs at "I".



Scattering by a Square-Well Potential



Vamos começar pela E.S. independente do tempo:



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = [E - V(x)] u(x)$$

❑ Vamos considerar o caso com $E < 0$

Região I [$V(x) = 0$]: $\frac{\partial^2 u_I(x)}{\partial x^2} = k_1^2 u_I(x)$

$$u_I(x) = A_1 e^{k_1 x} + A_2 e^{-k_1 x}, \quad k_1^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} > 0$$

Região III [$V(x) = 0$]: $\frac{\partial^2 u_{III}(x)}{\partial x^2} = k_1^2 u_{III}(x) \longrightarrow u_{III}(x) = C_1 e^{-k_1 x} + C_2 e^{k_1 x}$

Regiões II [$V(x) = -V_0$]: $\frac{\partial^2 u_{II}(x)}{\partial x^2} = -k_2^2 u_{II}(x), \quad k_2^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} > 0$

$$\longrightarrow u_{II}(x) = B_1 \cos(k_1 x) + B_2 \sin(k_2 x)$$

□ $V(x) = V(-x)$ logo o Hamiltoniano é invariante debaixo da operação de paridade.

$\psi(x) = \pm\psi(-x) \longrightarrow$ Vamos ter soluções pares (+) e ímpares (-).

Pares:
$$\begin{cases} u_I^+(x) = Ae^{k_1x}, & x < -a \\ u_{II}^+(x) = B_1 \cos(k_2x), & -a \leq x \leq a \\ u_{III}^+(x) = Ae^{-k_1x}, & x > a \end{cases}$$

Ímpares:
$$\begin{cases} u_I^-(x) = -Ae^{k_1x}, & x < -a \\ u_{II}^-(x) = B_2 \sin(k_2x), & -a \leq x \leq a \\ u_{III}^-(x) = Ae^{-k_1x}, & x > a \end{cases}$$

□ Continuidade da função e derivadas:

Pares: $u_{II}^+(a) = u_{III}^+(a), \quad \left. \frac{\partial u_{II}^+(x)}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial u_{III}^+(x)}{\partial x} \right|_{x=a} \longrightarrow \boxed{k_2 \tan(k_2a) = k_1}$

Ímpares: $u_{II}^-(a) = u_{III}^-(a), \quad \left. \frac{\partial u_{II}^-(x)}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial u_{III}^-(x)}{\partial x} \right|_{x=a} \longrightarrow \boxed{-k_2 \cot(k_2a) = k_1}$

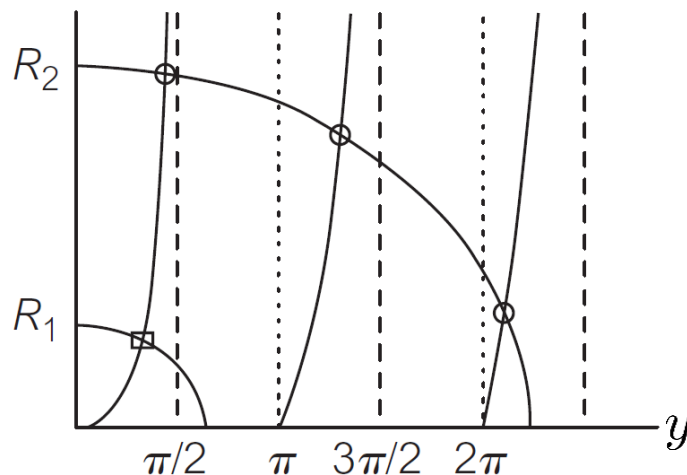
$$k_1 = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}$$

Estas equações têm que ser resolvidas numérica ou graficamente...

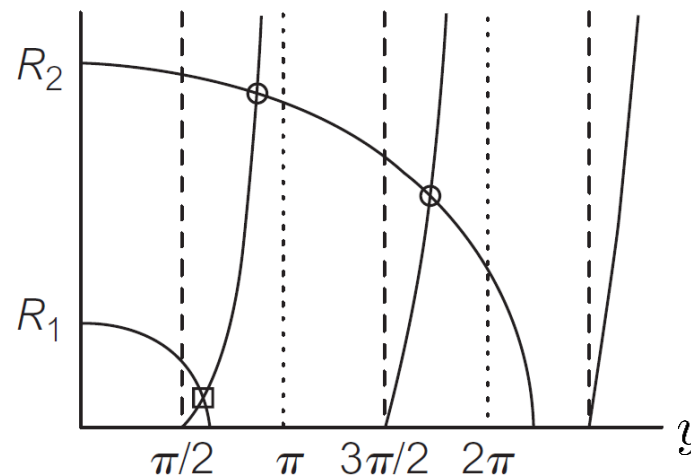
$$y = k_2 a, \quad R = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

POÇO DE POTENCIAL FINITO (Estados ligados)

Pares: $y \tan y = \sqrt{R^2 - y^2}$



Ímpares: $-y \cot y = \sqrt{R^2 - y^2}$



- Os pontos de intersecção indicam os valores próprios. Quanto maior for R (potencial mais profundo ou mais largo) maior será o número de estados ligados. Mas há sempre um estado ligado.
- O número de estados ligados pode ser determinado comparando o valor de R com os zeros da $\tan y$ e $\cot y$. Então, existem $n+1$ (n) estados ligados pares (ímpares) se, para um R , se tiver ($n=0,1,2,\dots$):

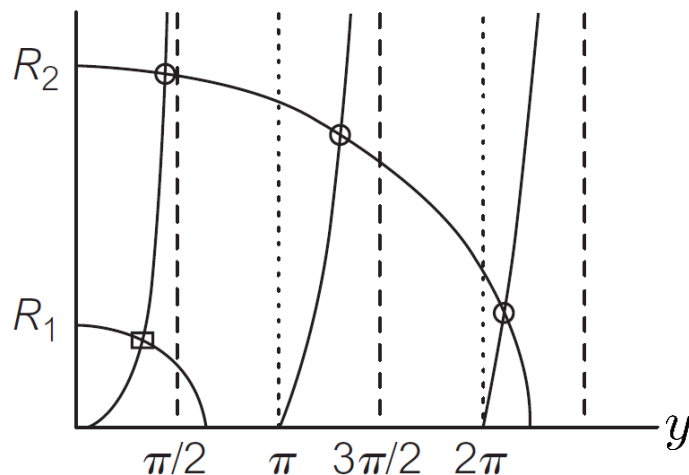
Pares: $n\pi < R < (n+1)\pi$

Ímpares: $(n-1/2)\pi < R < (n+1/2)\pi$ \longrightarrow

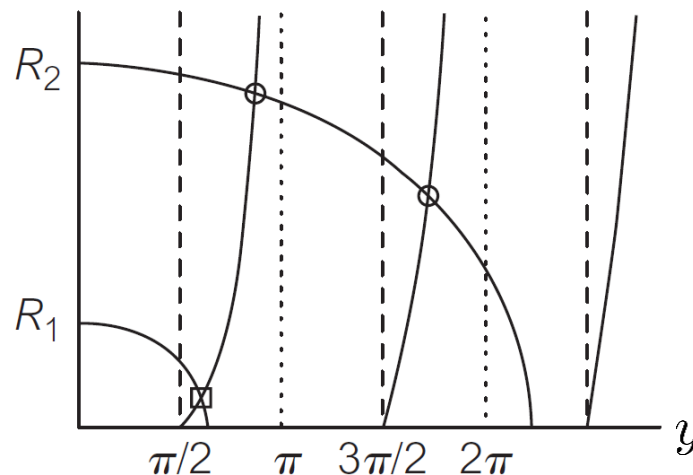
Se $R < n\pi/2$ ($n = 1, 2, \dots$) então existem n estados ligados. Esta condição é equivalente a:

$$V_0 < \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Pares: $y \tan y = \sqrt{R^2 - y^2}$



Ímpares: $-y \cot y = \sqrt{R^2 - y^2}$



- Para as soluções pares, à medida que se aumenta R , os pontos de interseção ocorrem para $y \simeq \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi, n = 1, 2, 3, \dots$

$$|E_n^+| + V_0 \simeq \frac{(n - 1/2)^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Para as soluções ímpares, à medida que se aumenta R , os pontos de interseção ocorrem para $y \simeq n\pi, n = 1, 2, 3, \dots$

$$|E_n^-| + V_0 \simeq \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$