

## 4 Aplicações I

### 4.5 Partícula num poço retangular finito

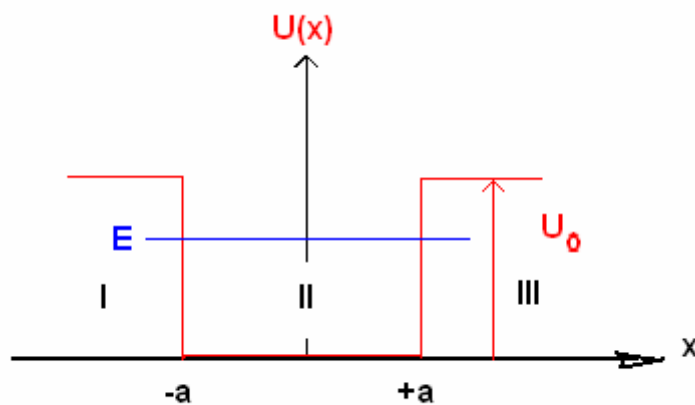


Fig. 1

Consideremos agora uma partícula confinada num poço de potencial de altura finita  $U$  com largura  $2a$ , conforme mostra a Fig. 1.

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \leq -a \\ 0, & -a \leq x \leq a \\ U_0, & x \geq a \end{cases} \quad (1)$$

com  $U_0 > 0$  e  $E < U_0$ ;  $E$  = energia total da partícula.

O potencial retangular pode ser usado como modelo unidimensional do potencial de três dimensões que experimenta um nêutron num núcleo. Em química utiliza-se o poço finito para modelar o potencial que experimenta um elétron numa molécula linear como  $\text{H-C}\equiv\text{C-H}$  (Acetileno).

Suponhamos que a energia  $E$  da partícula é menor que  $U_0$ , de modo que ela não pode sair do poço e será permanentemente ligada na região  $-a \leq x \leq +a$ .

Porém, conforme à mecânica quântica, há uma probabilidade finita de a partícula ser encontrada fora desta região. Já no caso do oscilador harmônico simples vimos que a função de onda não era nula fora da região classicamente permitida.

A equação de Schrödinger para as regiões I e III pode ser escrita na forma

$$\psi''(x) - \beta^2 \psi(x) = 0; \quad \beta^2 := 2m(U_0 - E) / \hbar^2 \quad (2)$$

e na região central como

$$\psi''(x) + \alpha^2 \psi(x) = 0; \quad \alpha^2 := 2mE / \hbar^2 \quad (3)$$

As soluções para as três regiões são, como se pode verificar por simples substituição,

$$a) \quad \psi_e = B_1 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x), \quad x \leq -a$$

$$b) \quad \psi_c = A_1 \exp(i\alpha x) + A_2 \exp(-i\alpha x), \quad -a \leq x \leq +a \quad (4)$$

$$c) \quad \psi_d = C_1 \exp(\beta x) + C_2 \exp(-\beta x), \quad x \geq +a$$

onde os  $A$ ,  $B$  e  $C$  são constantes arbitrárias.

O termo  $B_2 e^{-\beta x}$  tende a infinito para  $x \rightarrow -\infty$ , uma vez que  $\beta$  é positivo. Isso contradiz o terceiro postulado e, por conseguinte, devemos fazer  $B_2 = 0$ , a fim de evitar um valor infinito para  $\psi$  nos grandes valores negativos de  $x$ .

No caso da expressão 4c, válida para  $x \geq a$ , devemos excluir o primeiro termo,  $C_1 e^{\beta x}$ , que se torna infinito para grandes valores positivos de  $x$ . Por isso  $C_1 = 0$ .

A solução de (2) e (3) será, então,

$$\psi = \begin{cases} \psi_e = B_1 e^{\beta x} \\ \psi_c = A_1 e^{i\alpha x} + A_2 e^{-i\alpha x} \\ \psi_d = C_2 e^{-\beta x} \end{cases} \quad (5)$$

A função central,  $\psi_c$ , é oscilatória (senoidal), já que  $\exp(\pm i\alpha x) = \cos(\alpha x) \pm i \sin(\alpha x)$ . As funções de onda, nas regiões fora do poço, decaem exponencialmente com a distância.

Se desejarmos a solução  $\psi_c$  real, fica tacitamente subentendido que a solução verdadeira é a parte real (ou imaginária, dependendo da situação física) da expressão complexa de  $\psi_c$ . (Se você não gosta do cálculo complexo, pode escrever a solução, obviamente, diretamente em forma real:  $\psi_c = A \cos(\alpha x) + B \sin(\alpha x)$ ). Confira também 2.2 e 2.4.

Agora, para uma função de onda ser aceitável, o terceiro postulado exige que  $\psi$  e  $\psi'$  sejam contínuas para todo  $x$  em  $-\infty < x < +\infty$ , também nos pontos  $x = -a$  e  $x = +a$  - só estes pontos que podem produzir problemas.

$\psi$  será contínua em  $x = -a$ , se e somente se  $\psi_e(-a) = \psi_c(-a)$ . Da mesma forma,  $\psi_e'$  será contínua em  $-a$ , se e somente se  $\psi_e'(-a) = \psi_c'(-a)$ . Condições análogas devem ser válidas em  $x = +a$ . Aplicando estas relações de continuidade com (5), resulta

$$B_1 \exp(-\beta a) = A_1 \exp(-i\alpha a) + A_2 \exp(i\alpha a) \quad (6)$$

$$B_1 \beta \exp(-\beta a) = A_1 i\alpha \exp(-i\alpha a) - A_2 i\alpha \exp(i\alpha a) \quad (7)$$

Eliminando  $B_1$ , proporciona

$$A_2 = -(\beta - i\alpha)/(\beta + i\alpha) \cdot \exp(-2i\alpha a) \cdot A_1 \quad (8)$$

(Dividindo (7) por  $i\alpha$  e pois somando à (6), dá

$$B_1 \exp(-\beta a) = i\alpha/(i\alpha + \beta) \cdot 2A_1 \exp(-i\alpha a)$$

Substituindo na (7), dá  $2\beta/(\beta + i\alpha) \cdot A_1 \exp(-i\alpha a) - A_1 \exp(-i\alpha a) = -A_2 \exp(i\alpha a)$ , daí segue (8)).

Da mesma maneira obtemos

$$C_2 \exp(-\beta a) = A_1 \exp(i\alpha a) + A_2 \exp(-i\alpha a) \quad (9)$$

$$-C_2 \beta \exp(-\beta a) = A_1 i\alpha \exp(i\alpha a) - A_2 i\alpha \exp(-i\alpha a) \quad (10)$$

Eliminando  $C_2$  proporciona uma segunda relação entre  $A_1$  e  $A_2$

$$A_2 = -(\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha) \cdot \exp(2i\alpha a) \cdot A_1 \quad (11)$$

Em geral, as equações 8 e 11 podem não ser consistentes. A condição para isso é a equação

$$(\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha) \cdot \exp(2i\alpha a) = (\beta - i\alpha)/(\beta + i\alpha) \cdot \exp(-2i\alpha a) \quad (12)$$

Vamos simplificar essa relação entre  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $a$ . Multiplicando pelos denominadores dá

$$(\beta^2 + 2i\alpha\beta - \alpha^2) \exp(2i\alpha a) = (\beta^2 - 2i\alpha\beta - \alpha^2) \exp(-2i\alpha a)$$

$$\text{ou } (\beta^2 - \alpha^2) (\exp(2i\alpha a) - \exp(-2i\alpha a)) = -2i\alpha\beta (\exp(-2i\alpha a) + \exp(2i\alpha a)).$$

Por meio da fórmula de Euler obtemos as relações

$$\exp(2\alpha ai) - \exp(-2\alpha ai) = 2i \operatorname{sen}(2\alpha a)$$

$$\exp(2\alpha ai) + \exp(-2\alpha ai) = 2 \operatorname{cos}(2\alpha a)$$

daí segue  $i(\beta^2 - \alpha^2) \cdot \operatorname{sen}(2\alpha a) = -2i\alpha\beta \cdot \operatorname{cos}(2\alpha a)$ , ou

$$\operatorname{tg}(2\alpha a) = -2\alpha\beta/(\beta^2 - \alpha^2) \quad (13)$$

Substituindo as definições de  $\alpha$  e  $\beta$ , chegamos a

$$\operatorname{tg} [2a(2mE/\hbar^2)^{1/2}] = 2[E(U_0 - E)]^{1/2}/(2E - U_0) \quad (14)$$

Para uma dada partícula de massa  $m$  e um dado poço de potencial com profundidade  $U_0$  e largura  $2a$ , essa equação é uma equação com uma única incógnita,  $E$ . Então, os valores de  $E$ , ficando entre 0 e  $U_0$ , para os quais a Eq. de Schrödinger possui soluções bem comportadas são as soluções  $E_1, E_2, E_3 \dots$  da equação transcendental (14) entre 0 e  $U_0$ .

Mas só por métodos gráficos ou numéricos podemos obter as soluções da Eq. 14, veja 4.5.1.

Antes de determinar estes autovalores,  $E_n$ , formularemos as autofunções,  $\psi_n$ , correspondentes dos estados ligados.

O produto dos lados esquerdos dá  $A_2^2$  e o dos lados direitos destas equações dá  $A_1^2$ , ou seja  $A_2 = \pm A_1$  e a Eq. (11) passa a ser

$$(\beta + i\alpha)/(\beta - i\alpha) \cdot \exp(2i\alpha a) = -/+ 1 \quad (15)$$

Para a Eq. 5 precisamos os coeficientes  $B_1$  e  $C_2$  em termos de  $A_1$ . Das equações (6), (11) e (15) obtemos

$$\begin{aligned} B_1 &= A_1(\exp(-i\alpha a) - (-/+)\exp(i\alpha a)) \cdot \exp(\alpha\beta) = \\ &= A_1(\exp(-i\alpha a) \pm \exp(i\alpha a)) \cdot \exp(\alpha\beta) \end{aligned}$$

A autofunção  $\psi_e$  fica então

$$\psi_{e,n} = A(\exp(-i\alpha_n a) \pm \exp(i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha+x)), \quad (16)$$

onde  $A := A_1$  deve ser determinado por meio da normalização de  $\psi_{e,n}$ .

De maneira semelhante, obtemos as autofunções  $\psi_{c,n}$  e  $\psi_{d,n}$ , de modo que a solução da Equação de Schrödinger é

$$\psi_n = A(\exp(-i\alpha_n a) \pm \exp(i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha+x)), \text{ para } x \leq -a$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n x) \pm \exp(-i\alpha_n x)), \text{ para } -a \leq x \leq a \quad (17)$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n a) \pm \exp(-i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha-x)), \text{ para } a \leq x$$

Para determinar qual dos signos se deve usar em  $\psi_n$ , se substitui  $E_n$  na Eq. 15 e se determina, assim, qual dos dois signos é apropriado, veja os exemplos.

(Pode-se mostrar que fora dos valores discretos de  $E$  entre 0 e  $U_0$ , o sistema também tem um espectro contínuo de autovalores para  $E > U_0$ .)

### 4.5.1 Os autovalores

O próximo passo a fazer será a solução da equação transcendental (14) entre 0 e  $U_0$ . Primeiro determinamos graficamente soluções aproximadas da Eq. 14 e pois calculamos numericamente valores quase exatos de  $E_n$ .

Com  $e := 2a\alpha = 2a(2mE/\hbar^2)^{1/2}$  obtemos para o caso particular de  $U_0 a^2 2m/\hbar^2 = 36$  a seguinte relação

$$\text{tg } e = e(144 - e^2)^{1/2} / (e^2 - 72) \quad (18)$$

Buscamos as interseções das funções  $f(e) = e(144 - e^2)^{1/2} / (e^2 - 72)$  e  $g(e) = \text{tg}(e)$ .

Os valores de  $e$  podem ficar entre  $0 < e < 12$ .

- `reset()//soluções da Eq. 14`  
`f:=e*sqrt(144-e^2)/(e^2-72):`  
`g:=tan(e):`  
`plotfunc2d(f,g, e=0..12, YRange =-10..10,`  
`AxisTitles=["e","f(e),g(e)"])`

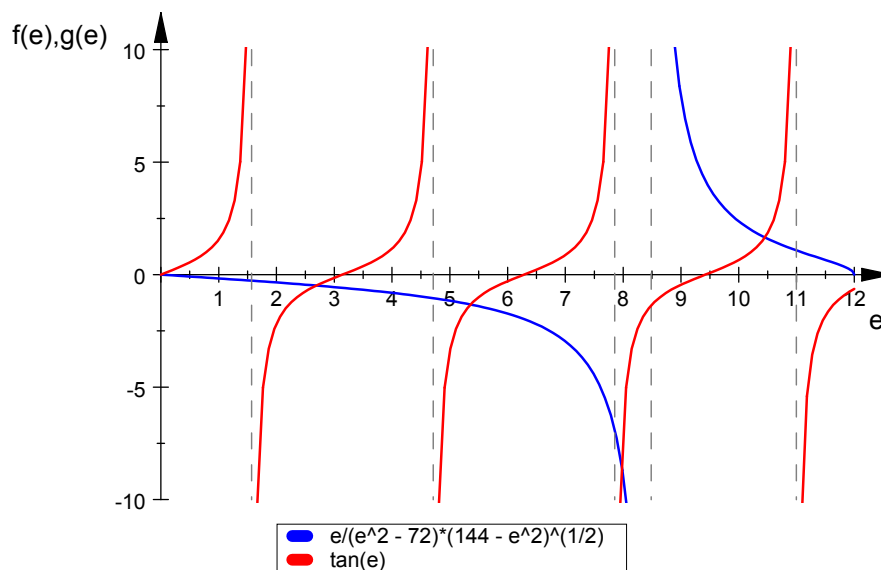


Fig. 2

A figura 2 mostra 4 interseções possíveis dos gráficos de  $f$  e  $g$  com os seguintes valores aproximativos:  $e_1 \approx 2,7$ ,  $e_2 \approx 5,4$ ,  $e_3 \approx 7,9$ ,  $e_4 \approx 10,5$ . Para determinar valores de maior precisão, podemos usar um dos métodos iterativos, por exemplo os de 3.9.3 da "Mecânica" ou a função `numeric::solve` de MuPAD. Para a raiz entre 5 e 6 obtemos  $e_2 \approx 5.357566217$

- `reset():`  
`numeric::solve(tan(x)-x*sqrt(144-x^2)/(x^2-72), x=5..6)`  
`{5.357566217}`

Os quatro valores são  $e_1 = 2,6895$ ,  $e_2 = 5,3576$ ,  $e_3 = 7,9717$ ,  $e_4 = 10,5419$

Da equação  $e := 2a (2mE/\hbar^2)^{1/2}$  obtemos

$E = e^2 \hbar^2 / (4a^2 \cdot 2m) = e^2 U_0 / (4 U_0) \cdot \hbar^2 / (2ma^2) = e^2 U_0 / 4 \cdot 1/36$ , ou seja

$$E = e^2 U_0 / 144 := w \cdot U_0 \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
 E_1 &= (2,6895)^2/144 \cdot U_0 = 0,05023 \cdot U_0 \\
 E_2 &= 0,1993 \cdot U_0 \\
 E_3 &= 0,4413 \cdot U_0 \\
 E_4 &= 0,7586 \cdot U_0
 \end{aligned}$$

Para aplicar a Eq. 15, precisamos dos valores de  $\alpha_n$  e  $\beta_n$  (usando  $U_0 a^2 2m / \hbar^2 = 36$ ). Obteremos assim

$$\alpha_n = 6/a \cdot (E_n/U_0)^{1/2} \quad \text{e} \quad \beta_n = 6/a \cdot ((U_0 - E_n)/U_0)^{1/2} \quad (20)$$

Entrando com estes resultados na Eq. 15, obtemos os valores -1, +1, -1, +1. O signo negativo significa que em (17) devemos tomar o signo superior, ou seja o signo positivo, etc.

### Exemplo:

$E_1 = 0.05023 \cdot U_0$ . Com este valor obtemos

$$\alpha_1 = 6/a \cdot (E_1/U_0)^{1/2} = 1,3447/a$$

$$\beta_1 = 6/a \cdot ((U_0 - 0.05023U_0)/U_0)^{1/2} = 5,8474/a$$

Estes valores devemos substituir na Eq. 15:

$a^{-1}(5,8474 + 1,3447 i) / a^{-1}(5,8474 + 1,3447 i) \cdot \exp(2,6894 i)$ .  
Esta expressão vamos simplificar aplicando  $(a+ib)/(a-ib) = (a^2+b^2)/(a^2-b^2-2abi)$  e  $e^{\pm ai} = \cos a \pm i \sin a$ . Resulta

$$-(32,382 - 15,73 i)/(32,384 - 15,73 i) \approx -1$$

Na Eq. 17 devemos usar, então, o signo positivo.

No caso  $E_2 = 0.1993 U_0$  obtemos  $(21,636 - 28,772 i) / (21,65 - 28,762 i) \approx 1$ , ou seja, o signo inferior, " - ", deve ser usado, etc.

## 4.5.2 As autofunções

Assim obtemos para a função  $\psi_1$  as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}
 \psi_{e,1} &= A(\exp(-i\alpha_1 a) + \exp(i\alpha_1 a)) \cdot \exp(\beta_1(a+x)) \\
 &= A[\cos(\alpha_1 a) - i \sin(\alpha_1 a) + \cos(\alpha_1 a) + i \sin(\alpha_1 a)] \cdot \exp(\beta_1(a+x))
 \end{aligned}$$

$$= 2A \cos(\alpha_1 a) \exp(\beta_1(a+x))$$

$$= 2A \cos(1,3447) \exp(5,8474(1+z)), \quad z := x/a; \quad x \leq -a$$

$$\psi_{c,1} = 2A \cos(1,3447 z); \quad -a \leq x \leq +a$$

$$\psi_{d,1} = 2A \cos(1,3447) \exp(5,8474(1-z)); \quad x \geq a \quad (21)$$

Mais adiante vamos comprovar que

$$A = (a + 1/\beta)^{-1/2}/2 \quad (22)$$

Para  $\beta_1 = 5,8474/a$  obtemos  $A_1 = 1/2(a + 0,1711a)^{1/2} = 0,924/2\sqrt{a} = 0,462/\sqrt{a}$

Com  $\beta_2 = 5,3689/a$  resulta  $A_2 = 0,459/\sqrt{a}$ ;  $A_3 = 0,452/\sqrt{a}$  e  $A_4 = 0,432/\sqrt{a}$

As seguintes figuras mostram os quatro casos  $n = 1$ ,  $n = 2$ ,  $n=3$  e  $n = 4$ . As funções de onda, junto com os valores dos parâmetros estão indicadas nos programas. Nos casos  $n = 2$  e  $n = 4$  aparecem fatores "i" que vamos desprezar para os gráficos. ( Na realidade desenhamos  $\psi_2(z)/i$  e  $\psi_4(z)/i$ . Sempre quando há um fator com "i" procedemos da mesma forma, o vamos desprezar.)

```

• reset();// Psi do poço finito retangular, n = 1
  s1:=0.924*cos(1.3447)*exp(5.8474*(1+z)):
  s2:=0.924*cos(1.3447*z):
  s3:=0.924*cos(1.3447)*exp(5.8474*(1-z)):
  S1:=plot::Function2d(s1,z=-1.8..-1):
  S2:=plot::Function2d(s2,z= -1..1):
  S3:=plot::Function2d(s3,z=1..1.8):
  plot(S1,S2,S3, AxesTitles=["z","Psi(z)"],
  plot::Text2d("n = 1",[1.2,.6])):

```

A função de onda  $\psi_1$  é simétrica e tem a forma

$$\psi_1 = \begin{cases} 2A \cos(\alpha_1 a) \exp(\beta_1(a+x)) & x < -a \\ 2A \cos(\alpha_1 x) & -a < x < a \\ 2A \cos(\alpha_1 a) \exp(\beta_1(a-x)) & x > a \end{cases}$$

$\psi_3$  tem a mesma estrutura:  $2A \cos(\alpha_3 a) \exp(\beta_3(a+x)) \quad x < -a$ , etc.



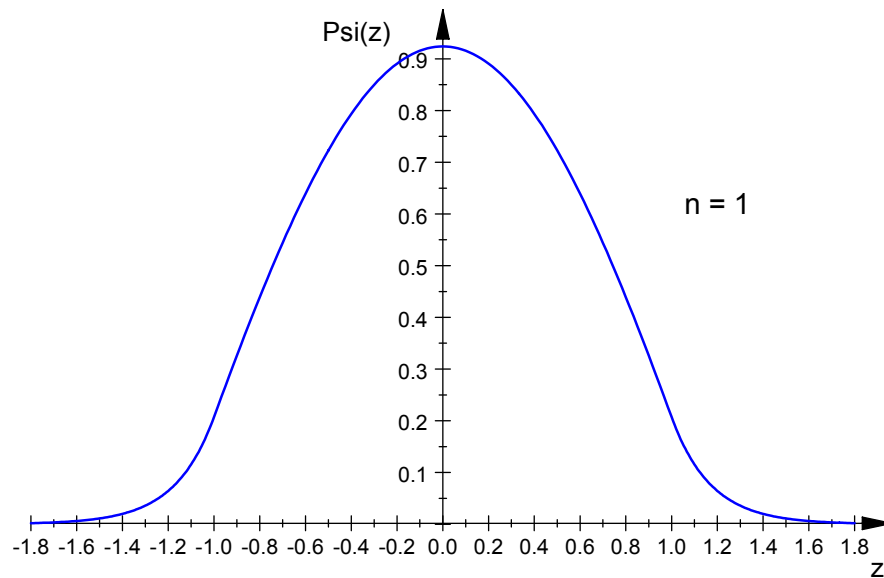


Fig. 3

As funções  $\psi_2$  e  $\psi_4$  são da forma

$$\psi_n = \begin{cases} -i 2A \sin(\alpha_n a) \exp(\beta_n(a+x)) & x < -a \\ +i 2A \sin(\alpha_n x) & -a < x < a \\ +i 2A \sin(\alpha_n a) \exp(\beta_n(a-x)) & x > a \end{cases}$$

- `reset()` // Psi do poço retangular,  $n = 2$   
`s1:=-0.918*sin(2.6786)*exp(5.3689*(1+z)):`  
`s2:=0.918*sin(2.678*z):`  
`s3:=0.918*sin(2.6786)*exp(5.3689*(1-z)):`

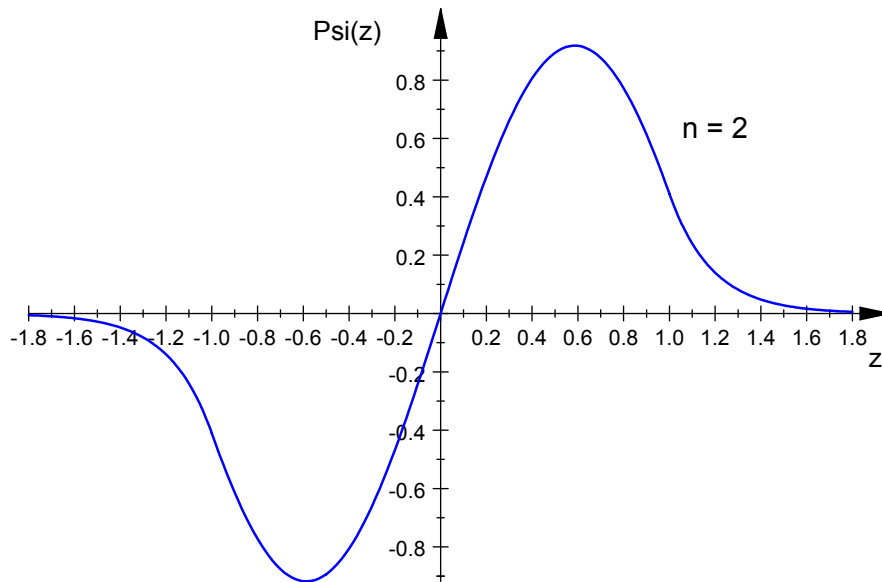


Fig. 4

- `reset()` // Psi do poço retangular,  $n = 3$   
`s1:=0.904*cos(3.986)*exp(4.485*(1+z)):`  
`s2:=0.904*cos(3.986*z):`  
`s3:=0.904*cos(3.986)*exp(4.485*(1-z)):`

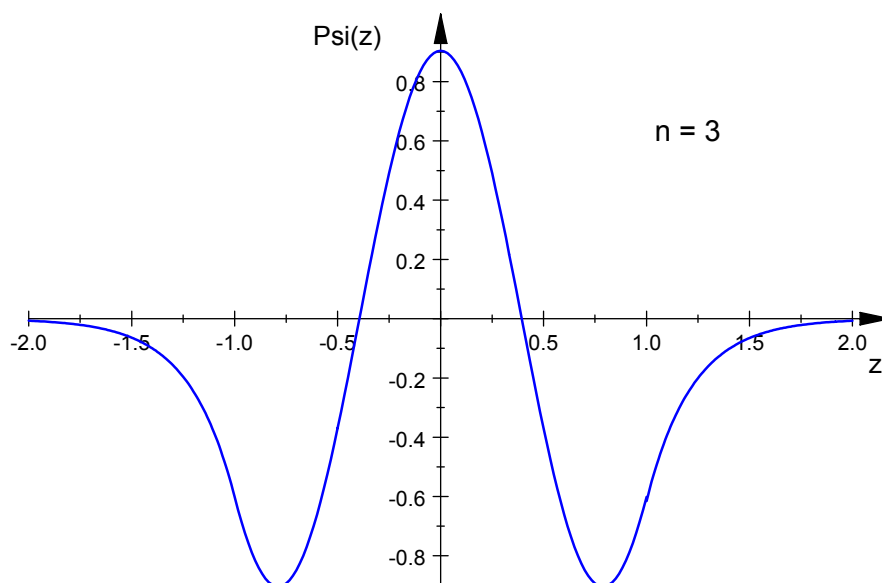


Fig. 5

- `reset()`:// Psi do poço retangular,  $n = 4$   
`s1:=-0.864*sin(5.226)*exp(2.948*(1+z)):`  
`s2:=+0.864*sin(5.226*z):`  
`s3:=0.864*sin(5.226)*exp(2.948*(1-z)):`

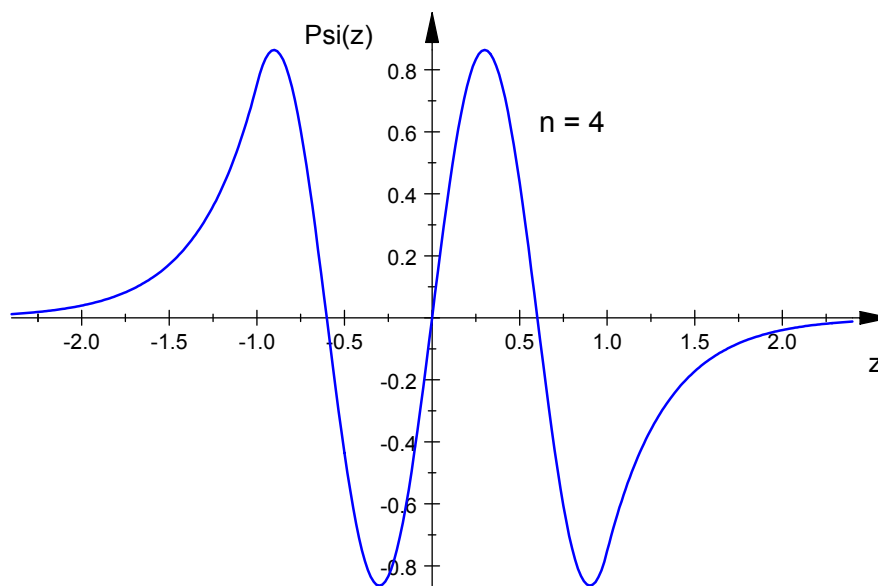


Fig. 6

É uma propriedade geral das soluções da Equação de Schrödinger para um estado ligado que o número dos zeros (dos nós) de  $\psi$  é  $n + 1$ , onde  $n$  é o número quântico (há dois zeros em  $x = \pm \infty$  e  $n - 1$  em  $-a < x < a$ ). Então esperamos para  $\psi_4$   $n - 1 = 4 - 1 = 3$  nós no intervalo  $-1 < x/a < 1$ .

### 4.5.3 As soluções numéricas

Do mesmo modo como na seção 4.2, no caso do oscilador harmônico simples, vamos analisar o problema do poço finito numericamente. Primeiro usamos um programa Runge-Kutta (descrita no curso de Mecânica na parte numérica 3), pois usamos um simples método de EULER, detalhadamente descrito na seção 3.1 do mesmo curso.

- ```

reset();//Poço finito com RK y''(t,y,y');a:=y'',v:=y'
t:=0:y:=0:v:=2.459:s:=0:// de -a até +a; n = 2
Y(0):=y:T(0):=t://valores iniciais para Regra do
Trapézio
e:=36:w:=0.1993:g:=1://g = limite do poço
h:=0.02:N:=91:// N = número dos passos
DIGITS:=5:
f:=(t,y,v)->-F*y:
for i from 1 to N do
if t>= 0 and t <= g-h then F:= e*w// Equação (3)
else
if t > g-h then F:= e*(w-1)//Equação (2)
end_if
end_if:
v1:=v:
a1:=f(t,y,v):
v2:=v+a1*h/2:
a2:=f(t+h/2,y+v1*h/2,v2):
v3:=v+a2*h/2:
a3:=f(t+h/2,y+v2*h/2,v3):
v4:=v+h*a3:
a4:=f(t+h,y+v3*h,v4):
y:=y+h*(v1+2*v2+2*v3+v4)/6:
v:=v+h*(a1+2*a2+2*a3+a4)/6:
Y(i):=y:T(i):=t:
t:=t+h:
if (i=0) or (modp(i,10)=0) then
print(t,y,v):
end_if:
end_for:
s:=Y(0):
for i from 1 to N step 1 do // Regra do Trapézio
s:=s+Y(i)^2:
end_for:

```

```

s:=s-(Y(0)^2+y(N)^2)/2:
print(s*h)// fator de normalização
plot(plot::Point2d(T(i),Y(i),Color=RGB::Blue,
AxesTitles=["z","Psi(z)"])
$ i=1..N step 2):

```

```
0.2, 0.46861, 2.1145
```

```
0.4, 0.80592, 1.1775
```

```
0.6, 0.91742, -0.089371
```

```
0.8, 0.77186, -1.3312
```

```
1.0, 0.41003, -2.2001
```

```
1.2, 0.14043, -0.7501
```

```
1.4, 0.048915, -0.25134
```

```
1.6, 0.01943, -0.07131
```

```
1.8, 0.014584, 0.018287
```

```
Fator de normalização: 0.49999
```

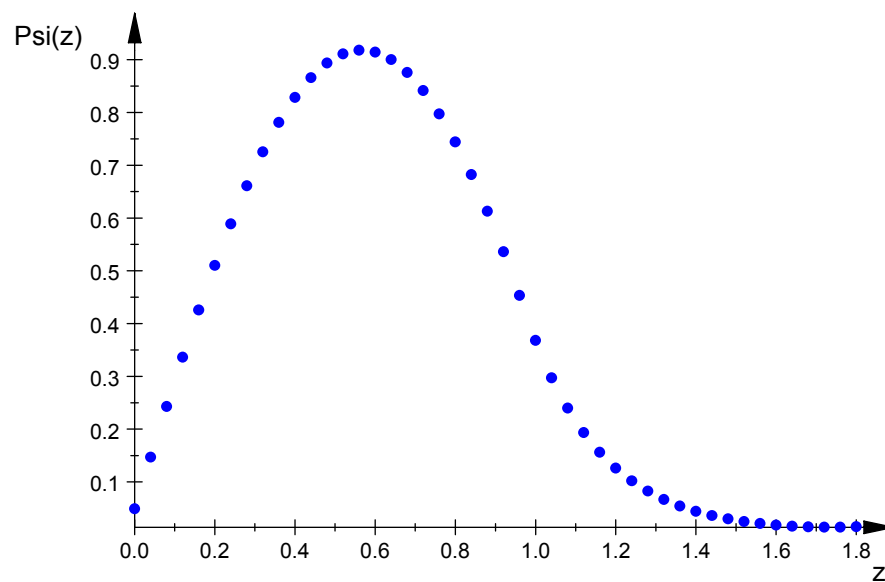


Fig. 7

No caso  $n = 4$ , com  $y'(0) = 0.864 \cdot 5.226 = 4.515$ , obtemos

```
0.1, 0.43123, 3.9124
0.2, 0.74734, 2.2653
0.3, 0.86395, 0.013587
0.4, 0.74993, -2.2418
0.5, 0.43572, -3.8987
```

Normalização: 0.49906

O fator de normalização deveria dar o valor 0.5 (não foi calculada a parte da curva no lado esquerdo que daria igualmente 0.5). A pendente inicial,  $y'(0)$ , foi calculada derivando  $\psi_c'$ .

Para  $n = 2$  resulta  $y'(0) = i 2A \alpha_2 \cos(\alpha_2 x)$  com  $x = 0$ , ou seja  $y'(0) = i 0,918 \cdot 2,6786 = 2,459 i$ . Já que devemos desprezar  $i$ , temos como valor inicial da pendente no programa  $y'(0) = v = 2,459$ . Somente com este valor obtemos um valor de normalização correto.

Um método simples, mas com precisão limitada, é o método de Euler que utilizamos para o mesmo caso  $n = 2$ . Vale a pena de comparar os resultados com o método de Runge-Kutta. Observe como a curva começa a separar-se do eixo-z a partir de  $z \approx 1,7$ .

- ```
reset()//Euler
Euler:=proc(h,passos)
begin
t:=0:i:=0:g:=1:
y:=0:v:=2.459:w:=0.1993:e:=36://n = 2
DIGITS:=5:
f:=(t,y)->-F*y(t):
for i from 0 to passos do
if t>g-h then F:=e*(w-1)else F:=e*w end_if:
Y(i):=y:T(i):=t:
if (i=0)or (modp(i,20)=0)then
print("t= ",t,"y= ",y,"y'= ",v,"y'' ",f(t,y)):
end_if:
```

```

a:=f(t,y)//Psi''
y:=y+v*h//Psi
v:=v+a*h//Psi'
t:=t+h:
end_for:
p:=plot::Point2d(T(i),Y(i),Color=RGB::Red)$ i=1..passos
step 2:
plot(p,AxisTitles=["z","Psi(z)"]):
end_proc:
Euler(0.01,200):

          "t= ", 0, "y= ", 0, "y'= ", 2.459, "y'' ", 0
3.3857    "t= ", 0.2, "y= ", 0.47188, "y'= ", 2.1299, "y'' ", -
          "t= ", 0.4, "y= ", 0.81745, "y'= ", 1.1951, "y'' ", -
5.865     "t= ", 0.6, "y= ", 0.93738, "y'= ", -0.090351, "y'' ", -
6.7255    "t= ", 0.8, "y= ", 0.79458, "y'= ", -1.3689, "y'' ", -
5.701     "t= ", 1.0, "y= ", 0.42555, "y'= ", -2.2797, "y'' ",
12.266    "t= ", 1.2, "y= ", 0.14231, "y'= ", -0.74974, "y'' ",
4.102     "t= ", 1.4, "y= ", 0.050541, "y'= ", -0.23069, "y'' ",
1.4569    "t= ", 1.6, "y= ", 0.026284, "y'= ", -0.025386, "y'' ",
0.75763   "t= ", 1.8, "y= ", 0.035817, "y'= ", 0.13708, "y'' ",
1.0324    "t= ", 2.0, "y= ", 0.089008, "y'= ", 0.45956, "y'' ",
2.5657

```

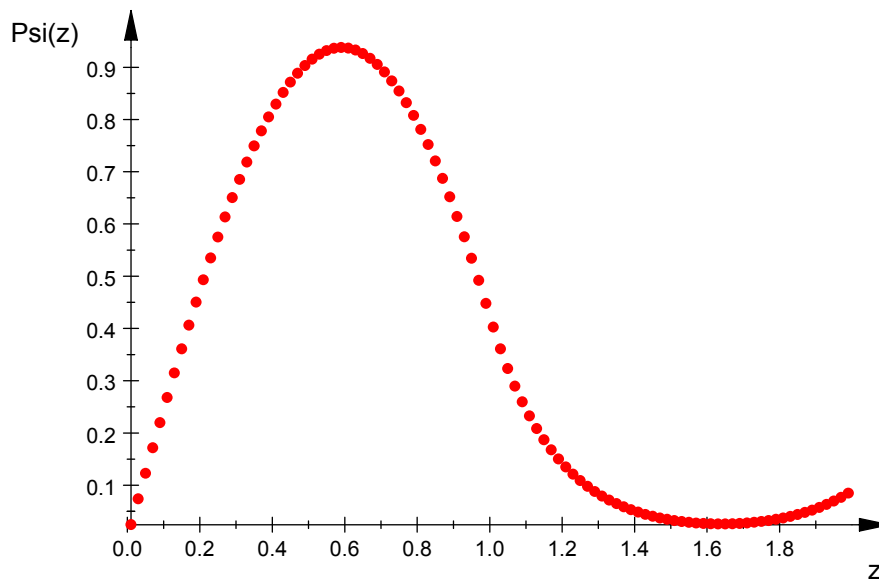


Fig. 8

#### 4.5.4 Simetria e normalização das funções de onda

As figuras mostraram que as funções de onda têm ou simetria par ( $n = 1, 3$ ) ou ímpar ( $n = 2, 4$ ). Queremos mostrar agora em forma geral que as funções (17) têm paridade par ou ímpar e que se pode fazer  $\psi_n$  real escolhendo  $A$  apropriadamente. Mas quero primeiro explicar o que se entende por paridade.

As funções  $\psi_1, \psi_3, \psi_5 \dots$  são funções pares de  $x$ , isto é  $\psi(-x) = \psi(x)$ , ou seja, trocando  $x$  por  $-x$  não tem influência sobre autofunções de índices ímpares. Na mecânica quântica, diz-se que estas funções têm paridade positiva ou par. As autofunções  $\psi_2, \psi_4, \psi_6 \dots$  são funções ímpares de  $x$ , ou seja  $\psi(-x) = -\psi(x)$  e são ditas de paridade negativa ou ímpar.

Isso significa, geometricamente, que no caso de paridade positiva a função de onda é simétrica com respeito à reta  $x = 0$ . No caso de paridade negativa, a autofunção é simétrica relativo à origem.

O fato de as autofunções ter paridade definida (ou positiva ou negativa) é uma consequência da simetria do potencial (com a escolha de origem que fizemos,



o potencial é uma função par  $U(-x) = U(x)$ . Se redefinirmos a origem do eixo-x, as autofunções não terão mais paridade definida.)

Na Eq. 17, n ímpar leva a autofunções pares e n par a autofunções ímpares.

Temos aqui outra vez as três partes da autofunção  $\psi_n$  (17)

$$\psi_n = A(\exp(-i\alpha_n a) \pm \exp(i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha+x)), \text{ para } x \leq -a \quad (\text{I})$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n x) \pm \exp(-i\alpha_n x)), \text{ para } -a \leq x \leq a \quad (\text{II}) \quad (17)$$

$$\psi_n = A(\exp(i\alpha_n a) \pm \exp(-i\alpha_n a)) \cdot \exp(\beta_n(\alpha-x)), \text{ para } a \leq x \quad (\text{III})$$

Tomemos I e troquemos x por -x no caso do signo positivo. Obtemos III com signo positivo.

Quando trocamos na função (II) de signo positivo x por -x, a equação não muda.

Se fazemos o mesmo com III de signo positivo, resulta I.

Então, se mudamos nas três funções com signo positivo x por -x, obtemos III, II, I.

Mas, com o mesmo procedimento, tomando o signo negativo, resultam -I, -II, -III. O que significa que  $\psi_n$  é par se se usa o signo positivo,  $\psi_n$  é ímpar com o signo negativo.

Se A é real,  $\psi_n$  é complexa usando o signo negativo. Usando o signo positivo,  $\psi_n$  resulta real (fórmula de Euler). Tomando A imaginária,  $A = e^{i\phi}$ , então  $\psi_n$  é real quando tomamos I, II, III com signo negativo.

Falta agora o cálculo do fator A. O resultado já foi comunicado na Eq. (22):

$$A = (a + 1/\beta)^{-1/2}/2 \quad (22)$$

O cálculo consta em avaliar a condição de normalização:  $\int_{-\infty, +\infty} \psi_n^* \psi_n dx = 1$ .

$$\int_{-\infty, +\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty, -a} |\psi_e|^2 dx + \int_{-a, +a} |\psi_c|^2 dx + \int_{+a, \infty} |\psi_d|^2 dx = 1$$

Substituindo, obtemos

$$A^2 \{ (2 \pm e^{2i\alpha a} \pm e^{-2i\alpha a}) e^{2\beta a} [ \int_{-\infty, -a} e^{2\beta x} dx + \int_{a, \infty} e^{-2\beta x} dx ] + \\ + \int_{-a, a} 2dx \pm \int_{-a, a} e^{2i\alpha a} dx \pm \int_{-a, a} e^{-2i\alpha a} dx \} = 1$$

Integrando:

$$A^2 \{ (2 \pm e^{2i\alpha a} \pm e^{-2i\alpha a}) e^{2\beta a} [ e^{2\beta x} / 2\beta |_{-\infty, -a} + e^{-2\beta x} / -2\beta |_{+a, +\infty} ] + \\ + (2x |_{-a, a} \pm e^{2i\alpha x} / 2i\alpha |_{-a, +a} \pm e^{-2i\alpha x} / -2i\alpha |_{-a, +a} ) \} = 1$$

Substituindo os limites e simplificando:

$$A^2 \{ (2 \pm e^{2i\alpha a} \pm e^{-2i\alpha a}) e^{2\beta a} / 2\beta (e^{-2\beta a} + e^{-2\beta a}) + 4a \pm (e^{2i\alpha a} - e^{-2i\alpha a}) / i\alpha \} = 1$$

$$A^2 (4a + 2/\beta \pm (e^{2i\alpha a} + e^{-2i\alpha a})/\beta \pm (e^{2i\alpha a} - e^{-2i\alpha a})/i\alpha) = 1$$

Neste ponto vamos introduzir as condições estipuladas pela Eq. (15)

$$(\beta + i\alpha) / (\beta - i\alpha) \cdot \exp(2i\alpha a) = -/+ 1 = (\beta - i\alpha) / (\beta + i\alpha) \cdot \exp(-2i\alpha a) \quad (15a)$$

Obtemos

$$e^{2i\alpha a} = -/+ (\beta - i\alpha) / (\beta + i\alpha)$$

$$e^{-2i\alpha a} = -/+ (\beta + i\alpha) / (\beta - i\alpha)$$

$$e^{2i\alpha a} + e^{-2i\alpha a} = -/+ [ (\beta - i\alpha) / (\beta + i\alpha) + (\beta + i\alpha) / (\beta - i\alpha) ] = -/+ (\beta^2 - \alpha^2) / (\beta^2 + \alpha^2)$$

$$e^{2i\alpha a} - e^{-2i\alpha a} = -/+ [ (\beta - i\alpha) / (\beta + i\alpha) - (\beta + i\alpha) / (\beta - i\alpha) ] = \pm 4i\alpha\beta / (\alpha^2 + \beta^2)$$

Com estes resultados obtemos

$$A^2 [ 4a + 2/\beta \pm (-/+ 2/\beta (\beta^2 - \alpha^2) / (\alpha^2 + \beta^2)) \pm (\pm 4i\alpha\beta / i\alpha (\alpha^2 + \beta^2)) ] = 1$$

$$A^2 [ 4a + 2(1 - (\beta^2 - \alpha^2) / (\alpha^2 + \beta^2)) / \beta \pm 4\beta / (\alpha^2 + \beta^2) ] = 1$$

$$\text{Utilizando o signo positivo, resulta } A^2 (4a + 4\beta^{-1} (\alpha^2 + \beta^2) / (\alpha^2 + \beta^2)) = 1$$

$$\text{ou seja } |A| = 0.5 (a + \beta^{-1})^{-1/2}, \text{ o que é nossa Eq. 22}$$

### 4.5.5 Outra vez a partícula numa caixa

Foi na seção 2.2, onde estudamos o problema de uma partícula numa caixa unidimensional com paredes infinitamente altas.

Podemos considerar o problema da seção 2.2 como um caso limite da partícula numa caixa finita, veja Fig. 1, de largura  $2a$  para  $U_0 \rightarrow \infty$ . Neste caso, a Eq. 14 se transforma em

$$\operatorname{tg}[2a(2mE/\hbar^2)^{1/2}] = 0 \quad (23)$$

ou seja 
$$2a(2mE/\hbar^2)^{1/2} = n\pi.$$

Isso significa para as energias possíveis da partícula encaixada

$$E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 8a^2 m = n^2 h^2 / (32a^2 m), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (24)$$

Para  $n = 0$ ,  $\psi_0$  seria igual a zero, o que significaria a ausência da partícula na caixa.