

**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SECRETARIA DA EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA
INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO
TOCANTINS**

CAMPUS PALMAS

CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA

LEONARDO ALEX XAVIER DE OLIVEIRA

**Resolução, modelagem e construção gráfica da Equação de Schrödinger
para diversos potenciais**

PALMAS

2021

**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SECRETARIA DA EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA
INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO
TOCANTINS**

LEONARDO ALEX XAVIER DE OLIVEIRA

**Resolução, modelagem e construção gráfica da Equação de Schrödinger
para diversos potenciais**

Trabalho de conclusão de curso submetido ao Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Tocantins – Campus Palmas como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Licenciado em Física.
Orientador: Prof. Me. Ademar Paulo Junior

**PALMAS
2021**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Bibliotecas do Instituto Federal do Tocantins

O48r Oliveira, Leonardo Alex Xavier de
 Resolução, modelagem e construção gráfica da Equação de
 Schrödinger para diversos potenciais / Leonardo Alex Xavier de
 Oliveira. – Palmas, TO, 2021.
 64 p. : il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Física) –
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Tocantins,
Campus Palmas, Palmas, TO, 2021.

Orientador: Me. Ademar Paulo Júnior

1. A ideia de dualidade onda-partícula. 2. Interpretação de
Copenhague. 3. Equação de Schrödinger. I. Paulo Júnior, Ademar. II.
Título.

CDD 530

A reprodução total ou parcial, de qualquer forma ou por qualquer meio, deste documento é autorizada para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica do IFTO com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).



Ministério da Educação
Secretaria de Educação Profissional e Tecnológica
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Tocantins
Campus Palmas

FOLHA DE APROVAÇÃO

TÍTULO: Resolução, modelagem e construção gráfica da Equação de Schrödinger para diversos potenciais

AUTOR: LEONARDO ALEX XAVIER DE OLIVEIRA

ORIENTADOR(A): PROF. ME. ADEMAR PAULO JUNIOR

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Tocantins, Campus Palmas, como parte das exigências para a conclusão do curso de Licenciatura em Física.

Aprovado em 24/08/2021.

Prof. Me. Ademar Paulo Junior
IFTO - Orientador

Prof. Dr. Weimar Silva Castilho
IFTO - Membro

Prof. Me. Francisco Romero Araújo Nogueira
IFTO - Membro



Documento assinado eletronicamente por **Ademar Paulo Junior, Servidor**, em 24/08/2021, às 18:29, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Francisco Romero Araujo Nogueira, Servidor**, em 24/08/2021, às 18:36, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Weimar Silva Castilho, Servidor**, em 24/08/2021, às 18:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.iftto.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1385179** e o código CRC **AA7A55C8**.

Quadra 310 Sul, Lo 5, s/n, esquina com a Avenida NS 10 - Plano Diretor Sul — CEP 77.021-090
Palmas/TO — (63) 3236-4000
portal.iftto.edu.br — reitoria@iftto.edu.br

Resumo

A equação de Schrödinger foi proposta partindo do pressuposto de que em um sistema microscópico, as partículas não se movimentam obedecendo às leis de Newton. Nesse contexto, podemos estudar o comportamento dinâmico e cinemático da partícula por meio da equação de Schrödinger que seria uma generalização para todos os casos. Para dualidade onda-partícula, temos vários efeitos que mostram o comportamento dual da luz em especial o efeito fotoelétrico e o efeito Compton, mais tarde foram propostos que a matéria também tem um comportamento de onda e de partícula. Ela rege o comportamento da função de onda que permite, dentro da interpretação estatística, determinar a probabilidade de obter a posição da partícula, dentro de uma incerteza regida pelo princípio da incerteza de Heisenberg. Portanto, para a partícula livre da ação de potenciais, dentro de uma certa incerteza, para a partícula que interage com potenciais é possível calcular a probabilidade dentro do potencial que a partícula está confinada. Foi feita a resolução para casos da partícula sem ação de potenciais, para o poço quadrado de potencial finito e infinito e a partícula na caixa unidimensional, bidimensional e tridimensional. Após a resolução, utilizou-se o programa *wxMáxima* para construção de gráficos de probabilidade para determinadas regiões. O propósito do trabalho é elucidar as ideias sobre a resolução Schrödinger. A metodologia adotada uma abordagem qualitativa por ser uma pesquisa bibliográfica e qualitativa pela construção dos gráficos. Com esse trabalho foi mostrado modelagem as equações e suas construção gráfica das probabilidades nos casos da partícula na caixa, poço de potencial quadrado finito e infinito.

Palavra-chave: dualidade onda-partícula, Interpretação estatística, Função de onda, gráfico de probabilidade.

Abstract

Schrödinger's equation was proposed based on the assumption that in a microscopic system, particles do not move according to Newton's laws. In this context, we can study the dynamic and kinematic behavior of the particle through the Schrödinger equation, which would be a generalization for all cases. For wave-particle duality, we have several effects that show the dual behavior of light in particular the photoelectric effect and the Compton effect, later it was proposed that matter also has a wave and particle behavior. It governs the behavior of the wave function that allows, within the statistical interpretation, to determine the probability of obtaining the position of the particle, within an uncertainty governed by the Heisenberg uncertainty principle. Therefore, for the particle free from the action of potentials, within a certain uncertainty, for the particle that interacts with potentials, it is possible to calculate the probability within the potential that the particle is confined. The resolution was made for cases of the particle without potential action, for the square well with finite and infinite potential and the particle in the one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional box. After the resolution, the wxMáxima program was used to build probability graphs for certain regions. The purpose of the work is to elucidate the ideas about the Schrödinger resolution. The methodology adopted a qualitative approach as it is a bibliographical and qualitative research for the construction of graphics. With this work it was shown modeling the equations and their graphical construction of the probabilities in the cases of particle in the box, finite and infinite square potential well.

Keyword: wave-particle duality, Statistical interpretation, Wave function, probability plot.

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	6
2.	METODOLOGIA	8
3.	SURGIMENTO DA IDEIA DE DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA	9
4.	INTERPRETAÇÃO DE COPENHAGUE	17
5.	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	21
6.	PARTÍCULA LIVRE	28
7.	POÇO DE POTENCIAL QUADRADO FINITO	31
8.	POÇO DE POTENCIAL QUADRADO INFINITO	42
9.	PARTÍCULA NA CAIXA	47
10.	CONSIDERAÇÕES FINAIS	58
11.	REFERÊNCIAS	59

1. Introdução

A equação de Schrödinger foi proposta partindo do pressuposto de que, em um sistema microscópico, as partículas não se movimentam obedecendo às leis de Newton. De acordo com a teoria do físico francês, Louis de Broglie (1892-1987), as partículas se comportam como ondas, de tal modo que as leis aplicadas a sistemas macroscópicos se tornam obsoletas. Nesse contexto, podemos estudar o comportamento dinâmico e cinemático da partícula por meio da equação de Schrödinger que seria uma generalização para todos os casos (EISBERG E RESNICK 1979).

Ademais, o efeito fotoelétrico, em que afirmou que luz se comporta como partícula, em seguida De Broglie, propôs que a matéria também tem um comportamento ondulatório. Segundo Halliday e Resnick (2012), de Broglie postulou que a matéria também tinha essa dualidade. Dessa forma, de Broglie encontrou uma equação que dava o comprimento de onda da matéria, que ficou conhecido como comprimento de onda de Broglie. Assim, observado o postulado de Broglie, para descrever o comportamento ondulatório da matéria, se fez necessária a equação de Schrödinger.

Mais tarde, foi proposto a interpretação de Copenhague, que assumiu que a partícula está em um estado de superposição, que seria estado de onda-partícula e ela só assumiria um estado assim que ocorresse uma medida e pouco depois da medida a partícula voltaria para estado de superposição (GRIFFITHS, 2011). Essa nova interpretação não foi aceita pela comunidade científica da época principalmente por Einstein e Erwin Schrödinger (1887 – 1961), mas mesmo como seus opositores o pensamento da nova interpretação foi difundido e aceito pela comunidade científica.

A equação de Schrödinger é uma equação de onda diferencial de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço. Ela rege o comportamento da função de onda que permite medir, dentro da interpretação estatística, a probabilidade de obter a posição da partícula com uma incerteza limitada pelo princípio da incerteza de Heisenberg.

De acordo com Eisberg e Resnick (1979), a função de onda dependerá do potencial ao qual está sujeita a partícula e das possíveis interações. Portanto, para a partícula livre da ação de potenciais, o

comportamento ondulatório é descrito em termos da amplitude de probabilidade que permite determinar, dentro de uma certa incerteza, o estado de uma partícula.

A modelagem matemática surgiu de uma necessidade de descrever fenômenos naturais, pois se tem a possibilidade de descrever algum desses fenômenos matematicamente. Esse fato levou a utilização da modelagem para representar as leis naturais (COSTA; IGLIORI, 2018). Com a intenção de entender como funcionam determinadas situações no mundo real (COSTA; IGLIORI, 2018).

O estudo feito nesse trabalho foi uma revisão bibliográfica passando pela dualidade onda-partícula, interpretação de Copenhague, equação de Schrödinger e suas resoluções em diversos potenciais. Assim, este trabalho teve por objetivo o processo de solução da equação de Schrödinger para diferentes potenciais e sua representação e análise por meio de modelagem matemática e produção de gráficos das densidades de probabilidade para esses potenciais estudados.

O trabalho está organizado em 10 capítulos. No primeiro capítulo, foi apresentado uma breve introdução do tema, mostrando os objetivos do estudo e os temas abordado no trabalho. No segundo capítulo, é apresentado a metodologia utilizada no trabalho. No terceiro capítulo, temos a discussão sobre a dualidade da onda-partícula. No quarto capítulo, é apresentado a interpretação de Copenhague e suas bases teóricas. No quinto capítulo, é apresentado a equação de Schrödinger na forma dependente do tempo e independente tempo. No sexto capítulo, é apresentado a solução da partícula com potencial nulo e suas implicações. No sétimo capítulo, é apresentado o caso da partícula confinada em um poço finito com estado de energia maior e menor que poço e suas implicações. No oitavo capítulo, foi apresentado o poço quadrado de potencial infinito e as implicações na partícula confinada. No capítulo, nove apresenta a partícula em uma caixa e solução para uma caixa unidimensional, bidimensional e tridimensional.

2. Metodologia

Esse trabalho de conclusão de curso apresenta uma pesquisa classificada como bibliográfica, pois foi feita através de pesquisa em livros e artigos científico (PIZZANI et al., 2012). Assim a pesquisa pode ser definida como qualitativa, pois o trabalho apresenta a teoria com foco em entender os fenômenos físicos. Pode ser considerado quantitativa pela construção dos gráficos.

A natureza dessa pesquisa pode ser considera como básica, pois o trabalho apresenta o conhecimento sem aplicação e com foco na melhoria da compreensão do tema (GIL, 2008).

A pesquisa bibliográfica feita nesse trabalho foi feita por meio de livros e artigos científico que tratava dos temas: dualidade onda-partícula, interpretação de Copenhague, equação de Schrödinger e soluções da equação de Schrödinger em alguns potenciais. A pesquisa bibliográfica foi importante para mostrar a história da Mecânica Quântica e utilizada para escolha dos potenciais a serem resolvidos.

Este trabalho consiste na solução da equação de Schrödinger independente do tempo para 4 potenciais, onde foi feita uma revisão das soluções da equação de Schrödinger e a construção gráfica das respectivas soluções.

Para resolução desses potenciais foi utilizada a equação de Schrödinger independente do tempo, para poder calcular a função de onda da partícula como uma primeira etapa e, na segunda etapa, utilizou-se o software *wxmaxima* para construção dos gráficos da probabilidade de encontrar a partícula em uma região do espaço. Esse processo foi replicado para todos os potenciais.

3. Surgimento da ideia de dualidade onda-partícula

O problema da dualidade onda partícula começou muito antes dos estudos modernos. Podemos pensar em tal conceito a partir de Sir Isaac Newton (1643 – 1727) que tratava a luz como partícula e Christiaan Huygens (1629 – 1695) que tratava a luz como uma onda (Rocha, 2011).

Huygens mostrou nos seus experimentos as características ondulatórias da luz, que levou o nome de princípio de Huygens. Este princípio diz que uma frente de onda é uma nova fonte luminosa que tem a mesma frequência e velocidade da fonte luminosa inicial, mostrando que a luz tinha característica ondulatória (Rocha, 2011).

Por sua vez, Newton, contemporâneo a Huygens, já tinha uma visão diferente da luz, pois, para ele, ela era um feixe de partículas. Além disso, Newton ainda conseguia explicar os fenômenos luminosos existentes tratando a luz como partícula e com explicações bastantes satisfatórias para os fenômenos luminosos (Rocha, 2011).

Essa discussão, teve mais tarde outros estudos para afirmar que a luz se comporta como uma onda. O experimento de fenda dupla de Thomas Young (1773 – 1829), mostrou que a luz obedece a características ondulatórias e com isso foi substituindo as ideias de Newton de que a luz seria um feixe de partículas. Desse modo, as ideias se consolidaram com as explicações de James Clerk Maxwell (1831 – 1879), onde a luz tem propagação de onda eletromagnética (Halliday, 2009).

Em 1887, Heinrich Rudolf Hertz (1857 – 1894), usando um circuito centelhador, buscava produzir ondas eletromagnéticas e observou que havia um aumento na intensidade e quantidade das centelhas, em comparação a quando não havia incidência de luz (TIPLER; LLEWELLYN, 2014). Assim precisasse de algumas bases teóricas para explicação como a teoria de Planck.

Antes de explicar o efeito fotoelétrico vamos aborda de forma breve a teoria de Planck. Max Karl Ernest Ludwig Planck (1858-1947) em 14 de dezembro de 1900 apresentou seu artigo sobre a distribuição do espectro da luz, onde ele explicava o problema da radiação do corpo negro, em que todo corpo

emite radiação térmica isso ocorre quando o corpo está mais quente que o meio (EISBERG; RESNICK, 1979).

Planck observando experimentos descobriu de forma empírica, que a radiação dos corpos não era uma variável continua e sim uma energia oscilante de cargas, mas só assumia estados de energia quantizados que seria números inteiros (TIPLER; LLEWELLYN, 2014). De forma empírica ele conseguiu chegar na equação da energia

$$E = nhf, \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (3.1)$$

Onde temos na equação da energia de corpos, temos n que é um número inteiro para quantizar energia, temos f e a frequência e h a constante de Planck que é $h = 6,6310^{-34} \text{ m}^2 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$.

Posteriormente, o efeito fotoelétrico foi estudado por outros cientistas que fizeram importantes descobertas. Entre as descobertas podemos citar a não interferência da intensidade da luz emitida na produção de centelhas, mas sim em sua frequência, e que a centelha emitida pelo centelhador são elétrons (TIPLER ; LLEWELLYN, 2014). Logo, os pesquisadores continuaram buscando descobrir os fatores para que ocorre-se a emissão de um elétrons devido à incidência de luz e logo perceberam que cada material tem sua frequência de corte para emissão de luz (TIPLER ; LLEWELLYN, 2014). A frequência de corte¹ corresponde a frequência mínima de luz incidente para a emissão de um elétron (YOUNG; FREEDMAN, 2008). Wilhen Ludwig Franz Hallwachs (1859-1922) e Philipp Eduard Anton Von Lenard (1862-1947) descobriram que quanto maior a frequência da luz maior será emissão de centelhas (YOUNG; FREEDMAN, 2008).

Os resultados observados eram empíricos e contrariavam as previsões da Física Clássica, pois para essa área de estudo os elétrons tinham que escapar com qualquer frequência e no efeito fotoelétrico tinha frequências específicas para os elétrons escaparem (YOUNG; FREEDMAN, 2008). Assim,

¹ Frequência de corte é que determina a frequência mínima da luz para arrancar um elétron de um material, mas cada material teria sua frequência de corte.

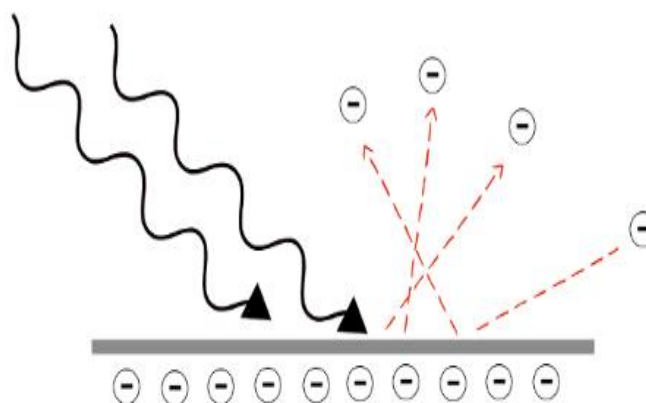
Albert Einstein (1879 – 1955) em 1905 desenvolveu a hipótese de que um feixe de luz era constituído por pacotes de energia e, dependendo da sua frequência, maior era esse pacote de energia dentro desse feixe (TIPLER ; LLEWELLYN, 2014). Para relacionar a frequência com energia, Einstein usou a quantização de energia e adotou características do corpo negro para todos estados da luz (TIPLER ; LLEWELLYN, 2014).

Como observou Einstein, é possível chegar na seguinte expressão

$$eV_0 = \left(\frac{1}{2}mv^2 \right)_{\text{máx}} = hf - \phi \quad (3.2)$$

onde o termo e é carga do elétron e o termo que acompanha ele na expressão é o V_0 a energia potencial de corte. O termo do meio da igualdade é a energia cinética sendo a massa dada por m e a velocidade por v . Os termos finais são, constante de Planck $h = 6,62 \times 10^{-34}$ e f é frequência de onda associada a luz e o ϕ a energia necessária para arrancar um elétron.

Figura 1 – Efeito Fotoelétrico



Fonte: Brasil escola

Link: <https://brasilescola.uol.com.br/o-que-e/Física/o-que-e-efeito-fotoelettrico.htm>

Ainda existia uma peculiaridade, na qual, no processo de emissão de luz para gerar o efeito fotoelétrico, os elétrons ganham toda a energia dos fótons ou não ganham nenhuma, contrariando os princípios da Física Clássica (TIPLER

; LLEWELLYN, 2014). Portanto, o feixe de luz com mesma frequência tem os pacotes de energia iguais independente da sua intensidade luminosa, assim explicando como surge a ideia da frequência de corte e porque não são todos os feixes de luz que arrancam elétrons da placa de metal (YOUNG; FREEDMAN, 2008).

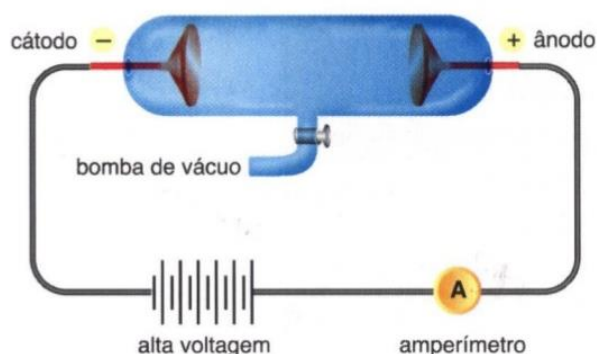
Segundo Yoshimura (2009, p. 57), o efeito fotoelétrico ocorre quando um fóton é absorvido pelo elétron e ele ganha energia para escapar da órbita do átomo, mas isso ocorre quando a energia recebida é maior que energia de ligação entre o elétron e o átomo.

Vale destacar que não foi apenas o efeito fotoelétrico que contribuiu para levantar a hipótese dualidade onda-partícula, tivemos na mesma época a descoberta dos raios x e o efeito Compton.

Os Raios X foram descobertos por Wilhelm Conrad Roentgen (1845 – 1923), enquanto ele trabalhava com tubo de raios catódicos. Roentgen observou que quando os feixes de eletros produzido pelo tubo atingia o vidro, gerava raios que podiam atravessar matérias opacos e apenas em filme fotográfico ou uma tela fluorescente os RAIOS X iria exibir-se (YOUNG; FREEDMAN, 2008).

Um tubo de raios catódicos é conhecido como tubo de Crookes, que é um tubo de vidro que nas suas extremidades possui um anodo e um catodo, no tubo o terminal catodo lança um feixe de elétrons em direção do anodo que possui uma placa de tungstênio, quando o feixe de elétrons atingindo uma placa tungstênio geram os Raios X (TIPLER ; LLEWELLYN, 2014).

Figura 2: Tubo de Crookes



11

Fonte: Estudante Radioativo

Link: <http://josegil-cfq.blogspot.com/2014/10/modelo-atomico-de-thomson-um-cientista.html>

Após a descoberta não se sabia o que era o Raio X e por isso ele ganhou o nome de X, pois era um raio misterioso. Em suas observações, Roentgen percebeu que para os RAIOS X deixarem a sombra do material na tela fluorescente dependia da densidade do material, assim quanto mais denso o material mais escuro a sombra (TIPLER; LLEWELLYN, 2014). Ele usava o raio X na sua mão e percebeu que sombra dos seus ossos da mão apareciam tela e depois dessa descoberta os raios X foram implementados na medicina.

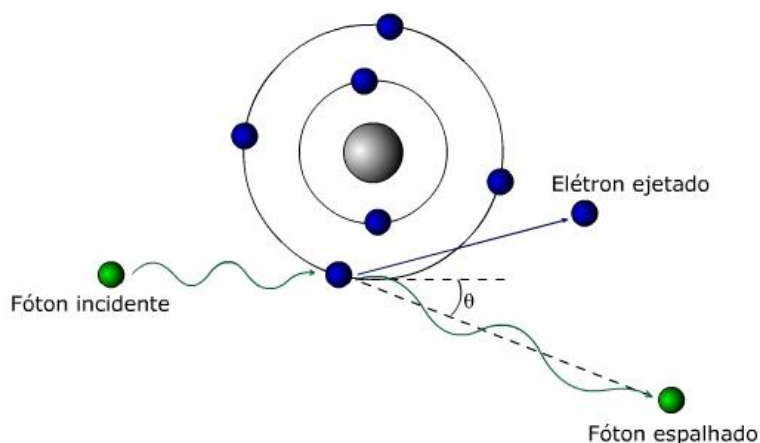
Ainda era desconhecida a natureza dos raios X e, para entender melhor seu comportamento, Max Von Laue (1879 – 1960), fez difração com os Raios X pela fenda em um cristal de 0.1 nm de separação. Difração é um processo em que ondas, passam por uma fenda menor que seu comprimento de onda, e, após passar pela fenda, ocorre um espalhamento da onda, assim fazendo que o orifício da fenda seja uma nova origem (YOUNG; FREEDMAN, 2008). Mais tarde Compton mostrou que os raios x era partículas com o efeito Compton.

O Efeito Compton mostra a natureza corpuscular dos raios X e, mais uma vez, que as ondas eletromagnéticas se comportam de modo dual (YOUNG; FREEDMAN, 2008). O experimento é realizado da seguinte maneira: um feixe de raio X, com um comprimento de onda λ_0 é lançado em uma placa de grafite em vários ângulos diferentes e observa-se que o espalhamento do raio x muda o seu comprimento de onda λ , onde λ é maior que λ_0 (Eisberg; Resnick, 1979). Isso acontece quando há uma colisão entre partículas, em que temos a transferência de energia em colisões que não são cem por cento elásticas, assim tem troca de energia entre raio X e seus ftons e os elétrons, assim mudando o comprimento de onda (Eisberg; Resnick, 1979). Dessa forma, foi feito o deslocamento de Compton $\Delta\lambda = \lambda_0 - \lambda$, e o momento varia conforme o espalhamento do RAIOS X (Eisberg; Resnick, 1979).

O processo ocorre quando o raio-X atinge uma placa de grafite, quando os elétrons que orbitam o átomo de grafite ficam excitados. Os elétrons ganham energia e, caso essa energia seja maior que energia de ligação do átomo com o elétron, ele é ejetado do átomo de grafite (YOUNG; FREEDMAN, 2008). O que faz com que o elétron seja liberado é que o raio X tem pacotes de energia que são chamados de fótons. Assim, quando um fóton colide com um elétron, ele transfere sua energia para ele deixando de existir (YOUNG;

FREEDMAN, 2008). Assim, quando isso ocorre, gera-se uma variação do momento angular (YOUNG; FREEDMAN, 2008). Esse efeito descrito é representado na figura 1.

Figura 3 – Efeito Compton



Fonte: efeito foto elétrico e Compton ²

Essa explicação para o efeito Compton que conhecemos, não foi a utilizada na época, pois ele chegou à outra conclusão. Para Compton, os elétrons absorviam a radiação e emitiam uma radiação quantizada, assim fazendo o efeito de interferência que tornaria o efeito inexplicável sob a base da teoria clássica (SILVA; FREIRE JR, 2014). Compton fez um tratamento quântico para explicar o experimento, que mais tarde seria conhecido como efeito Compton, ele tratou os raios-X como partículas que teriam energia e momento quantizados (SILVA; FREIRE JR, 2014).

Para chegar na equação e assim definir o momento é preciso definir a energia das partículas contidas na radiação, assim pode-se adotar que a energia E do feixe incidente é igual frequência f multiplicada pela constante de Planck (EISBERG; RESNICK, 1979). Portanto, temos

$$E = hf \quad (3.3)$$

² Disponível em: < <https://efeitofotoeletricoecompton.webnode.com.br/efeito-compton/> >

Assim, fazendo as demonstrações matemáticas necessárias que podem ser encontradas no livro Física Quântica (EISBERG; RESNICK, 1979) vamos chegar na equação de Compton dada por:

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta) \quad (3.4)$$

Em que m é a massa do elétron e θ é o ângulo de espalhamento do fóton. Assim a comunidade científica já não sabia se luz era onda ou partícula e isso fez com aparecem diferentes ideias sobre esse fenômeno.

Em 1924, de Broglie, um físico francês, propõe que o comportamento ondulatório também é propriedade da matéria. Como o próprio de Broglie explicou na época:

Depois da primeira guerra mundial, pensei muito a respeito das teorias dos quantas e do dualismo onda-partícula... Tive uma ideia súbita inspiração. O dualismo onda-partícula de Einstein era um fenômeno absolutamente geral, que se estendia a toda natureza. (TIPLER; LLEWELLYN, 2014)

Desse modo, de Broglie postulou que uma partícula se comporta como onda, logo a matéria vai ter um comprimento de onda. Assim, ele propõe que uma partícula livre com velocidade v (tal que $v \ll c$), possui um comprimento de onda λ e o momento linear p , que estão relacionados pela seguinte expressão (YOUNG; FREEDMAN, 2008)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} . \quad (3.5)$$

Após a publicação do seu doutorado em 1925, demoraram alguns anos para saírem estudos relevantes sobre a hipótese de Broglie sobre o comportamento ondulatório das partículas. Essa teoria ficou conhecida mais tarde como Mecânica Quântica, que teve trabalhos de físicos renomados para sua conceituação como Erwin Schrödinger (1887 – 1961), Paul Dirac (1902 –

1984), Max Born (1882 – 1970) e Werner Heisenberg (1901 – 1976) (YOUNG; FREEDMAN, 2008).

A dualidade onda-partícula vem sendo discutida há muito tempo na Física Clássica, a qual determinou que a radiação (luz) era uma onda, assim como foi falado brevemente no começo deste capítulo. Essa questão foi levantada novamente por Einstein com seu artigo de 1905 com o título de “Sobre um Ponto de Vista Heurístico sobre a Emissão e Transformação da Luz” (LIMA; CAVALCANTI; OSTERMANN, 2020). Segundo os autores (LIMA; CAVALCANTI; OSTERMANN, 2020), o primeiro a propor a radiação como algo dual foi Niels Bohr (1885 – 1962), pois o mesmo falava que dependendo da maneira que a luz fosse observada era extremamente aceitável a teoria eletromagnética ou a ideia quântica corpuscular da luz. O mesmo cita, em um artigo, sobre o assunto da seguinte maneira

No que diz respeito à luz, sua propagação no espaço e no tempo é adequadamente expressa pela teoria eletromagnética. Especialmente os fenômenos de interferência no vácuo e as propriedades ópticas dos meios materiais são completamente governados pelo princípio da superposição da teoria das ondas. No entanto, a conservação da energia e do momento durante a interação entre a radiação e a matéria, evidenciada no efeito fotoelétrico e Compton, encontra sua expressão adequada apenas na ideia quântica de luz e proposta por Einstein (N. Bohr, Nature 121, 580, 1928 apud LIMA; CAVALCANTI; OSTERMANN, 2020).

A natureza da luz sempre foi muito debatida pela comunidade científica e teve uma nova visão com adição da dualidade onda-partícula. Assim, mais tarde, N. Bohr, junto com outros cientistas, continuariam a defender a dualidade onda-partícula.

4. Interpretação de Copenhague

O que ajudou para aceitação da interpretação de Copenhague foi a influência dos seus precursores que eram Niels Bohr (1885 – 1962) e Werner Heisenberg (1901-1976), grandes nomes da teoria quântica à época (LEITE; SIMON, 2010). Os dois cientistas começaram a divulgação das ideias do grupo de Copenhague por meio de palestras no mundo inteiro.

Heisenberg fez divulgação por meio de palestras e também escreveu artigos filosóficos sobre o tema, pois o mesmo acreditava que isso levaria a grande aceitação da comunidade científica, mas fez com que pessoas leigas no assunto conhecessem a sua interpretação, passando a adotar apenas essa interpretação do fenômeno quântico (LEITE; SIMON, 2010).

As bases teóricas para a Interpretação de Copenhague são o princípio de Incerteza de Heisenberg e o princípio da Complementaridade de Bohr. Assim, vamos apresentar as bases teóricas da Interpretação de Copenhague.

Segundo YOUNG e FREEDMAN (2008), com a descoberta de Broglie, em que a matéria possui comprimento de onda, a ideia clássica de localidade espacial da visão clássica foi questionada. Mas, com essa descoberta foi feita uma reavaliação do comportamento da matéria a níveis atômicos, quando estudamos a velocidade e posição da partícula não é possível estudar por cinemática, pois a partícula tem comportamento ondulatório.

Max Born propôs a interpretação de probabilidade para a Mecânica Quântica, uma vez que ele estava buscando respostas sobre o espalhamento das partículas, e ele escolheu a interpretação ondulatória por considerar a única adequada (MENESES, 2008).

O princípio da incerteza afirma que um experimento não pode determinar simultaneamente a posição de uma partícula e seu momento (EISBERG; RESNICK, 1979). Vale mencionar que essa indeterminação não significa que os instrumentos não são bons, pelo contrário, ela diz que mesmo que se tenha a medição ideal para a posição ou para o momento da partícula, significa que outra medida ficará imprecisa. Ou seja, quando uma medida de uma das grandezas (momento ou posição) for precisa a outra medida tem a incerteza infinita (EISBERG; RESNICK, 1979). Quantitativamente,

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{h}{2\pi} \quad (4.1)$$

sendo que o desvio padrão em x (posição) σ_x e o desvio padrão do momento σ_p , deve ter seu produto maior ou igual a $\frac{h}{2\pi}$. Essa relação nos mostra que quando uma das duas medidas tender a zero, a outra irá a infinito, o que não permite ter uma precisão em uma sem impactar a outra (GRIFFITHS, 2011).

Além disso, para explicar esse comportamento dual e as observações experimentais, Bohr propõe o princípio da Complementaridade, como se pode ver em Rodrigues (2016):

Este ponto é de grande importância lógica, uma vez que somente a circunstância de o ser apresentada uma escolha entre traçar a trajetória de uma partícula ou observar os efeitos de interferência permite que escapemos da necessidade paradoxal de concluir que o comportamento de um elétron ou de um fóton deve depender da presença de uma fenda no diagrama através da qual se possa provar que ele não passa. Lidamos aqui com um típico exemplo de como os fenômenos complementares aparecem em arranjos experimentais mutuamente excludentes e ficamos diante da impossibilidade, na análise dos efeitos quânticos, de traçar qualquer distinção clara entre um comportamento independente dos objetos atômicos e sua interação com os instrumentos de medida que servem para definir as condições em que os fenômenos ocorrem (BOHR, 1949, p. 59, apud Rodrigues, 2016).

De tal modo que podemos determinar, pelo arranjo experimental da partícula ou do fóton, qual será a característica que elas podem assumir, logo podemos concluir que o ato de medir obriga a partícula a assumir o comportamento de onda ou partícula.

Segundo Rodrigues (2016), para fazer o experimento, ou seja, para medir se o fóton ou partícula tem o comportamento ondulatório ou corpuscular, o ato de observar define a natureza que a partícula ou fóton vai assumir. Sabemos que o experimento pode detectar a característica corpuscular ou ondulatória. Logo, quando se faz uma medição é abdicado de uma dessas características (GRIFFITHS, 2011).

A Interpretação de Copenhague trouxe as ideias que a partícula quando não está sendo medida não está ocupando nenhuma posição. Dessa maneira, a partícula só assume uma posição no espaço quando ela vai ser medida, logo o ato de medir força a partícula a aparecer em um ponto x do espaço (GRIFFITHS, 2011).

Diante dessas considerações, a Interpretação de Copenhague foi aceita na comunidade científica, mas como uma nova teoria recebeu muitas críticas de nomes importantes. Os seus difusores que foram os físicos norte-americanos e na Europa nos polos Copenhague Göttingen e Cambridge (LEITE; SIMON, 2010). Mas como toda nova ideia no meio científico também teve seus opositores, dentre eles, destacam-se: Einstein e Erwin Schrödinger (1887 – 1961) e Max von Laue (1879 – 1960).

Sobre a oposição de Einstein, este criticou duramente a interpretação da forma estatística que, segundo o próprio Einstein:

O esquema matemático da teoria quântica parece propiciar uma descrição perfeitamente adequada no que diz respeito aos atributos estatísticos dos fenômenos atômicos. Mas [...] a interpretação usual não permite a descrição do que realmente acontece independente das observações, ou entre duas delas. Mas alguma coisa deve ter acontecido, sobre isso não há dúvida; essa “alguma coisa” precisa ser descrita, seja em termos de elétrons, ondas ou quanta de luz, mas, a menos que ela seja descrita de alguma maneira, a tarefa da Física não está terminada. Não se pode admitir que essa “alguma coisa” diga respeito somente ao ato de observação. O físico deve postular, em sua ciência, que ele está estudando um mundo que não construiu, o qual estará sempre presente e basicamente inalterado, mesmo em sua ausência (Heisenberg, 1995, p. 109 apud Leite; Simon, 2016).

Schrödinger também era contrário às ideias da interpretação de Copenhague. Com isso, ele criou o exercício mental mais conhecido da Física, que é a proposta do gato de Schrödinger. Segundo Krause (2019) imagine um gato em uma caixa fechada junto com uma amostra de material radioativo que pode decair ou não, mas caso ela decaia o gato morre e caso ela não decaia o gato vive. Essa é a grande ideia de Schrödinger, pois pela Interpretação de Copenhague a partícula só tem um estado definido quando medida e logo a

única forma de saber se o gato morreu é quando se faz a medida do material. Portanto, até o momento antes da medida, o gato está vivo e morto ao mesmo tempo.

Com isso, Schrödinger criou um exercício mental para criticar o fato de a partícula estar em uma sobreposição de estados quânticos. Schrödinger seguia outra linha de interpretação da Mecânica Quântica, que seria a Interpretação Ondulatória.

A interpretação da mecânica ondulatória considerava a função de onda como uma realidade e que as partículas seriam encontradas no seu estado ondulatório ou em uma “potencialidade” (MONTENEGRO; PESSOA JR, 2002). Essa interpretação teve o problema que ela sempre entrava em colapso toda vez que ela interagia com o aparelho de medição. O problema conceitual dos colapsos é que eles não são locais, ou seja, seria como a partícula se mover-se de maneira instantânea, isso gera um problema para interpretação, pois como ela se move de maneira instantânea não seria algo realista (PESSOA JR, 2006).

Existem outras interpretações para Mecânica Quântica, além dessas temos as seguintes interpretações: Corpuscular (realista) e Interpretação Dualista Realista. Pode ser encontrada em um artigo de Pessoa Jr de 2012 e também no epílogo do livro *Mecânica Quântica* (GRIFFITHS, 2011), mas nesse trabalho só iremos abordar a interpretação estatística, pois é a mais aceita pela comunidade científica.

5. Equação de Schrödinger

Nesta seção estudaremos a equação proposta por Schrödinger para explicar o comportamento ondulatório das partículas, as quais ele associou a uma função de onda. A equação de Schrödinger é uma equação diferencial parcial de segunda ordem com dependência nas coordenadas espaciais e temporais, porém vamos estudar nesse capítulo casos que são independentes do tempo, vamos trabalhar com equação diferencial ordinária com dependência apenas nas coordenadas espaciais.

Segundo Eisberg e Resnick (1979), as partículas se movem de maneira ondulatória, mas não obedecem ao movimento ondulatório clássico. Elas estão associadas ao movimento postulado por de Broglie e à uma função de onda, mas a equação de Schrödinger nada mais é que uma generalização que inclui a teoria clássica como caso especial no mundo macroscópico e, assim, ela abrange também o movimento em sistemas quânticos (EISBERG; RESNICK, 1979). O significado físico para equação de Schrödinger é poder descrever o movimento ondulatório das partículas como será sua distribuição no espaço.

A equação de Schrödinger nos dá a forma da função de onda $\Psi(x, t)$ e podemos saber a energia associada à partícula, mas sabemos que no mundo quântico no lugar da força analisamos a energia potencial associada a partícula (EISBERG; RESNICK, 1979). Logo, podemos perceber que a equação clássica do movimento ondulatório tem números diretamente mensuráveis e enquanto a de Schrödinger não, pois possui uma parte imaginária.

Segundo Donangelo e Capaz (2009) a equação de Schrödinger mostra o movimento das partículas, pois no mundo microscópico, as partículas não se movimentam como a mecânica Newtoniana descreve, mas elas têm uma onda associada ao seu movimento. Desse modo, segundo Griffiths (2011) considerando-se uma partícula de massa m , sujeita a um potencial V , de modo que a equação de Schrödinger pode ser dada, no caso unidimensional, por:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) \quad (5.1)$$

Observando os termos da equação pode-se perceber que ela possui parte imaginária. Segundo Donangelo e Capaz (2009) sempre que tivermos um potencial finito $V(x,t)$ teremos uma função de onda $\Psi(x,t)$ contínua e com suas derivadas sendo contínuas também.

O físico Max Born postulou que o módulo da função de onda ao quadrado seria a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula em um intervalo infinitesimal dx (SANTOS, 2009). Sendo que a densidade de probabilidade é um número real, assim em um instante t podemos determinar a probabilidade de encontrar a partícula na região (EISBERG; RESNICK, 1979). A densidade de probabilidade de Born é dada por:

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 \quad (5.2)$$

A probabilidade de encontrar uma partícula em um espaço predeterminado do ponto a ao ponto b é obtida utilizando-se o método de integrais para soma de todas as probabilidades de encontrar a partícula em uma região infinitesimal no instante t . O resultado é um número real, pois a probabilidade não pode ser dada por um número imaginário. Assim, quantitativamente, temos

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx = P \quad (5.3)$$

Como a interpretação estatística apresenta uma indeterminação, podemos conhecer a teoria quântica como um todo, porém não sabemos nunca, com exatidão, onde vamos encontrar a partícula (GRIFFITHS, 2011). O arranjo matemático da equação (4.3) resultará em um número real e positivo.

Para utilizar a função de onda é preciso que ocorra a normalização da função. A normalização se faz necessária para garantir que a soma de

probabilidades seja limitada a 1 dentro da região de integração. Com isso teremos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (5.4)$$

A normalização é importante porque adiciona restrições importantes, em que o resultado da probabilidade tem que ser igual a um, como mostra a equação (4.4).

Nesse trabalho, resolveremos a equação de Schrödinger para potenciais independentes do tempo e, para isso, podemos tomar a separação das variáveis. Utilizando-se o método de separação de variáveis tal que possamos tomar a função de onda como o produto entre funções para a parte temporal e outra para a parte espacial onde $\psi(x)$ representa a parte espacial e $\phi(t)$ representa a parte temporal.

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) \quad (5.5)$$

Substituindo a equação (5.1) dentro da equação (5.5) para escrever os termos dependentes de x e os t separadamente, assim temos a seguinte expressão

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)\phi(t)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\phi(t) = \frac{\hbar d\psi(x)\phi(t)}{dt} \quad (5.6)$$

em que $v(x)$ é o potencial da partícula. Podemos reorganizar a expressão (5.6), tal que temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi(t) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = i\hbar\psi(x) \frac{d\phi(t)}{dt}. \quad (5.7)$$

Vamos organizar a expressão com termos dependentes de x na esquerda e os dependentes t na direita, logo temos

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{1}{\psi(x)}\right)\frac{d^2\psi(x)}{dx} = i\hbar\left(\frac{1}{\phi(t)}\right)\left(\frac{d\phi(t)}{dt}\right) \quad (5.8)$$

Observamos que o lado esquerdo possui apenas termos dependentes de x e lado direito apenas termos dependentes de t , assim variações t ou x não irão afetar o outro lado da igualdade. Assim, podemos igualar os termos dependentes de x com uma constante C e igualar os termos dependentes de t pela mesma constante, assim, temos que (5.8) resulta em

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{1}{\psi(x)}\right)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = C \quad (5.9)$$

$$i\hbar\left(\frac{1}{\phi(t)}\right)\left(\frac{d\phi(t)}{dt}\right) = C \quad (5.10)$$

Utilizaremos a solução geral apenas para equação (5.10), assim temos

$$\phi(t) = e^{iCt/\hbar} \quad (5.11)$$

Está reescrevendo a equação (5.11), utilizado a transformação de Euler³ tal que

$$e^{-ict/\hbar} = \cos\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) - i\sin\left(\frac{Ct}{\hbar}\right) \quad (5.12)$$

Vamos substituir o $\hbar$ na equação (5.12), uma vez que $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ assim a equação fica da seguinte maneira

³ $e^{ix} = \cos(x) + i\sin(x)$

$$\phi(t) = \cos\left(2\pi \frac{C}{h}\right) - i \operatorname{sen}\left(2\pi \frac{C}{h}\right) \quad (5.13)$$

Assim, temos a solução para $\phi(t)$, onde é uma função oscilatório do tempo $\nu = \frac{C}{h}$ (EISBERG; RESNICK, 1979). Usando a relação de Broglie-Einstein da variação da frequência temos a seguinte igualdade $\nu = \frac{E}{h}$, tendo que E é a energia total que pode ser associada a função de onda $\phi(t)$ (EISBERG; RESNICK, 1979). Assim, podemos fazer a substituição de C por E, teremos a seguinte expressão

$$\phi(t) = e^{iEt/\hbar}. \quad (5.14)$$

Sabendo-se que a energia é dada por $\frac{p^2}{2m} + V = E$ e, utilizando-se o postulado de de Broglie, em que temos $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$, assim podemos combinar as duas e teremos a seguinte expressão $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$, logo a expressão (5.9) ficará da seguinte forma:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2 \operatorname{sen}(kx) = -k^2\psi(x) \quad (5.15)$$

Aplicando-se k^2 na equação (5.15) temos:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi(x) \quad (5.16)$$

Isolando a energia da partícula da equação (5.16) chegaremos na seguinte expressão

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x) \quad (5.17)$$

Que é a equação de Schrödinger independente do tempo para um potencial V .

Segundo Tipler e Llewellyn (2014), a equação de Schrödinger, independente do tempo, é uma equação diferencial ordinária (EDO) com uma variável, podendo assumir mais variáveis do espaço, basta estender para demais variáveis.

Os resultados da equação (5.17) vão ser apenas para as componentes do espaço, logo veremos nesse trabalho apenas potenciais não dependentes do tempo. Os potenciais independentes do tempo são conhecidos também como potenciais estacionários.

Segundo Donangelo e Capaz (2009) utiliza-se o caso de potenciais estacionários e unidimensionais, pois muitos fenômenos físicos ocorrem, mesmo em uma dimensão e alguns casos mais complexos podem ser resolvidos análogo à uma dimensão.

A utilização da solução para uma dimensão limita a partícula confinada a uma região no espaço. O valor de E é explícito, assim as combinações lineares só podem satisfazer a equação Schrödinger se todas as combinações resultem no mesmo valor de E (EISBERG; RESNICK, 1979). Neste trabalho resolveremos os casos para potenciais unidimensionais independentes do tempo, tais como a partícula livre, a partícula num poço de potencial (finito e infinito) e numa caixa.

Em três dimensões, a equação é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z)}{\partial z^2} \right) + V\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (5.18)$$

Diferentemente da partícula no caso unidimensional, as derivadas que acompanham os termos são parciais, e para resolver essa equação basta utilizar separação de variáveis em coordenadas cartesianas e esféricas (DONANGELO; CAPAZ 2009). A solução por separação de variáveis cartesianas é análoga à

solução unidimensional, essa solução vai ser abordada mais para à frente nesse trabalho.

6. Partícula Livre

Vamos analisar neste capítulo o comportamento da partícula livre. O primeiro caso que iremos abordar nesse trabalho é com o potencial nulo $V(x) = 0$ (EISBERG; RESNICK, 1974).

O potencial aplicado na partícula livre sempre vai ser nulo. A partícula com potencial nulo é chamada de partícula livre justamente por não depender nenhum potencial e ter uma velocidade constante.

Para obter o comportamento da partícula previsto pela Mecânica Quântica, usaremos a equação de Schrödinger e para o caso em que $E > 0$ adotados esses parâmetros chegaremos a o resultado esperado (EISBERG; RESNICK, 1979).

Para o caso da partícula livre utilizamos a solução da equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo como foi apresentado no capítulo passado por meio da equação (5.17). Partindo-se de um potencial nulo, temos que a equação de Schrödinger se torna:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (6.1)$$

A solução da equação (6.1) é uma solução de uma equação ordinária diferencial de segunda ordem.

O resultado da equação utilizaremos uma constante para massa m e energia E assim vamos utilizar uma constante k para representar as constantes, logo temos que $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, k é uma constante escolhida para deixar a escrita mais fácil, na solução da equação (6.1). Para resolvê-la, utilizamos a solução da EDO de segunda ordem e assim utilizando transformação de Euler, assim temos e^{ikx} e e^{-ikx} . Portanto, a solução geral terá essa forma:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (6.2)$$

Equação (6.1) mostrada acima, mostra o caso da partícula livre, pois ela não apresenta interação com nenhum potencial e temos a solução da equação (6.2).

Quando a partícula está em sentido crescente de x onde temos apenas a componente A, B é igual zero, assim teremos a solução $\psi(x) = Ae^{iKx}$. Quando a partícula tem sentido decrescente em relação a x , utiliza-se o mesmo pensamento só que no sentido contrário. Então, para uma partícula indo da esquerda para a direita, a solução seria apenas $\psi(x) = Be^{-iKx}$. Desse modo, para se chegar em uma solução precisamos sempre analisar a solução da equação de Schrödinger corretamente. Utilizando o caso onde a onda é crescente em x temos seguinte função de onda:

$$\psi(x) = Ae^{-iKx} \quad (6.3)$$

Agora que sabemos analisar a equação, podemos perceber que a partícula livre se comporta como uma onda senoidal, assim como é mostrado no capítulo passado.

De acordo com Eisberg e Resnick (1979), a partícula pode estar se movendo na direção crescente ou na direção decrescente em x e, assim, para cada um desses aspectos utilizamos uma parte da solução para descrever a probabilidade de encontrar a partícula em determinado ponto do espaço pré-determinado para análise.

Como foi mostrado no capítulo anterior, para calcular a densidade de probabilidade da partícula a função tem que ser normalizada, assim surge um problema, uma vez que a função de onda não é normalizável, e, portanto, a integração diverge.

Assim, não podemos definir uma constante de normalização e, no caso da partícula livre, não apresentam-se estados fisicamente realizáveis (Griffiths, 2011). Segundo Griffiths(2011), uma partícula livre não pode ter estados estacionários, o que seria o mesmo de dizer que uma partícula livre não tem energia definida. Para resolver esse problema temos que utilizar a equação de Schrödinger dependente do tempo, mas a solução é uma combinação linear de soluções separáveis.

A solução desse problema é mostrada em Griffiths (2011), em que ela pode ser normalizada utilizando a parte temporal e alguns arranjos matemáticos como teorema de Plancherel e a transformada de Fourier, chegando no seguinte resultado

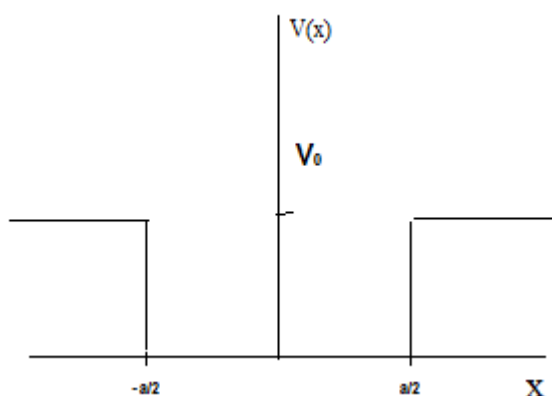
$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (6.4)$$

7. Poço de potencial quadrado finito

O poço de potencial quadrado finito é um estudo que faz parte da Mecânica Quântica, um modelo simples de uma partícula presa em um poço. A partícula circula livremente dentro do poço e, quando tenta sair, tem que “escalar” a parede do poço que é finita (EISBERG; RESNICK, 1979).

“O poço de potencial quadrado é frequentemente utilizado na Mecânica Quântica para representar uma situação na qual uma partícula se move em uma região limitada do espaço sob a influência de forças que a mantêm nesta região. Embora este potencial simplificado perca alguns dos detalhes do movimento, contém a característica básica, de limitar a partícula a uma região de um certo tamanho.” (EISBERG; RESNICK, 1979)

Figura 4 - Poço de potencial quadrado finito



Fonte: Imagem feita pelo autor

A figura 4 representa um poço de potencial quadrado finito que mostra como seria a região antes do poço, dentro do poço e depois do poço. Temos também V_0 que é a energia do poço, em outras palavras, corresponde à profundidade do poço (EISBERG; RESNICK, 1979). O poço de potencial quadrado finito na natureza acontece entre interações de partículas. Um exemplo é o de duas placas de metal com elétrons muito perto uns dos outros, como

também um nêutron no núcleo é uma situação parecida com o caso do poço finito (EISBERG; RESNICK, 1979).

Será apresentado nesse capítulo a partícula em três casos específicos e vamos aprofundar onde a energia da partícula é menor que o poço, onde podemos dizer que partícula “caiu” no poço, o que significa que a partícula ficou confinada em uma região sujeita a um potencial, como foi exemplificado nesse trabalho.

Vamos analisar a partícula em três regiões, que seriam elas antes do poço quadrado finito que a partícula tem comportamento de partícula livre e não interage com poço fica à esquerda do poço, dentro poço e a direita do poço que seria o mesmo caso da partícula antes do poço.

Assim vamos ter seguinte expressão para descrever a partícula antes e depois do poço que teria um potencial V interação e dentro do poço que tem o V_0 , fica da seguinte forma as interações

$$\begin{aligned} V(x) &= V_0, & x < -\frac{a}{2} \\ V(x) &= 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V(x) &= V_0, & x > a/2 \end{aligned} \quad (7.1)$$

V_0 é a constante positiva que define a profundidade do poço e assim vamos ter dois casos que trabalharemos e que são os dois casos do problema. O caso onde a energia da partícula é maior do que a profundidade do poço ($E > V_0$) e o caso que a energia da partícula E é menor ($E < V_0$).

A solução para uma partícula que possui energia maior que o potencial do poço será quase idêntico ao caso da partícula livre, pois para a partícula dentro do poço terá um potencial nulo (DONANGELO; CAPAZ, 2009).

7.1. Primeiro caso $E > V_0$

Tomando-se o caso da partícula fora do poço, temos $k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$. Considerando-se o caso da partícula dentro do poço temos $V(x) = 0$ e, portanto, temos $k' = \sqrt{2mE}$.

Temos uma solução para parte externa do poço finito que gera duas equações, uma à esquerda do poço finito e outra à direita dadas pelas seguintes expressões

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < -\frac{a}{2} \quad (7.2)$$

$$\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \quad x > \frac{a}{2} \quad (7.3)$$

O problema dentro do poço é parecido, mas será utilizado o k' dentro do poço finito assim temos a seguinte expressão

$$\psi(x) = Ee^{ik'x} + Fe^{-ik'x}, \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \quad (7.4)$$

Dentro do poço temos duas ondas, pois quando a partícula incide na parede do poço ela pode refletir ou ser transmitida do poço, assim temos que quando a partícula tem uma reflexão com a parede do poço a energia da partícula diminui.

Dessa forma, temos os casos dentro do poço finito e na parte externa do poço, assim podemos resolver o problema. O primeiro a se fazer é igualar a equação (7.4) com a (7.3), porém será igualado das extremidades do poço finito. Mas na equação (7.3) não temos ondas no sentido decrescente de x , pois após a partícula escapar do poço a onda não é refletida no sentido decrescente, assim como mostrado na equação (7.3) temos os termos C e D , onde D é igual zero por estar representado a onda para esquerda. Temos a seguinte expressão

$$Ee^{ik'a/2} + Fe^{-ik'a/2} = Ce^{ika/2} \quad (7.5)$$

Derivando a equação (7.5) vamos ter uma outra expressão da seguinte forma

$$ik' \left(Ee^{ik'\frac{a}{2}} - Fe^{-ik'\frac{a}{2}} \right) = ikCe^{ika/2} \quad (7.6)$$

Aplicando-se a equação (7.5) em (7.6) temos que

$$ik' \left(E e^{ik' \frac{a}{2}} - F e^{-ik' \frac{a}{2}} \right) = ik \left(E e^{ik' \frac{a}{2}} + F e^{-ik' \frac{a}{2}} \right) \quad (7.7)$$

Rearranjando a equação (7.7) temos:

$$\frac{k'}{k} = \frac{\left(E e^{ik' \frac{a}{2}} + F e^{-ik' \frac{a}{2}} \right)}{\left(E e^{ik' \frac{a}{2}} - F e^{-ik' \frac{a}{2}} \right)} \quad (7.8)$$

Dividindo-se o numerador e denominador de (7.8) por $F e^{\frac{ika}{2}}$ temos:

$$\frac{k'}{k} = \frac{\frac{E}{F} + e^{-ik'a}}{\frac{E}{F} - e^{-ik'a}} \quad (7.9)$$

Isolando-se E/F em (7.8) temos que:

$$\frac{E}{F} = \frac{k' + k}{k' - k} e^{-ik'a} \quad (7.10)$$

Uma vez resolvida a equação para o caso em que $x = +\frac{a}{2}$ vamos agora resolver o caso para $x = -\frac{a}{2}$. Assim, analogamente ao caso anterior, temos:

$$E e^{-ik'a/2} + F e^{ik'a/2} = A e^{-ika/2} + B e^{ika/2} \quad (7.11)$$

Assim, derivando em x e depois substituindo o valor de x, assim temos

$$ik' \left(E e^{-ik' \frac{a}{2}} - F e^{ik' \frac{a}{2}} \right) = ik \left(A e^{-\frac{ika}{2}} - B e^{\frac{ika}{2}} \right) \quad (7.12)$$

Igual ao primeiro caso, iremos utilizar substituição na equação (7.11) e (7.12), assim chegaremos no resultado análogo a $x = \frac{a}{2}$

$$\frac{\frac{E}{F} + e^{ika}}{\frac{E}{F} - e^{ika}} = \frac{k \frac{A}{B} + e^{ika}}{k' \frac{A}{B} - e^{ika}} \quad (7.13)$$

Agora podemos estudar o coeficiente de reflexão e transmissão das partículas. Com esses coeficientes é possível calcular a probabilidade de reflexão e transmissão das partículas. Segundo YOUNG e FREEDMAN (2008) a densidade de probabilidade é proporcional a $|\Psi^2|$, assim podemos relacionar a probabilidade dos feixes refletidos a $|B^2|$, assim temos que densidade probabilidade do feixe de transmissão a $|C^2|$ e a densidade de probabilidade do feixe incidente $|A^2|$. Assim podemos determinar um coeficiente de reflexão R e de transmissão T.

Com as constantes determinadas podemos determinar o coeficiente de reflexão R que é a probabilidade de ocorrer a reflexão da onda, logo temos que R é dado por $\frac{B^2}{A^2}$. Desse modo, para encontrar esses valores basta fazer a mesma resolução da equação (7.5), mas utilizando a equação (7.10) e (7.11). Deixando o quociente de B/A, temos que

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(ka)} \right]^{-1} \quad (7.14)$$

De forma análoga, podemos achar o coeficiente de transmissão T, temos que T é probabilidade de transmissão da onda, é calculado de modo análogo que R logo temos que T é igual $\frac{C^2}{A^2}$. Para chegar nesse coeficiente basta igualar a equação (7.5) com a (7.11) e chegará no resultado com as mesmas resoluções. Assim, os resultados dessas manipulações algébricas são:

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{k^2 k'^2 \sin^2(ka)}{4k^2 k'^2} \right]^{-1} \quad (7.15)$$

Aplicando-se as expressões para k e k' , nas expressões (7.14) e (7.15), teremos as seguintes expressões para R e T

$$R = 1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2(ka)} \quad (7.16)$$

E, para t , temos

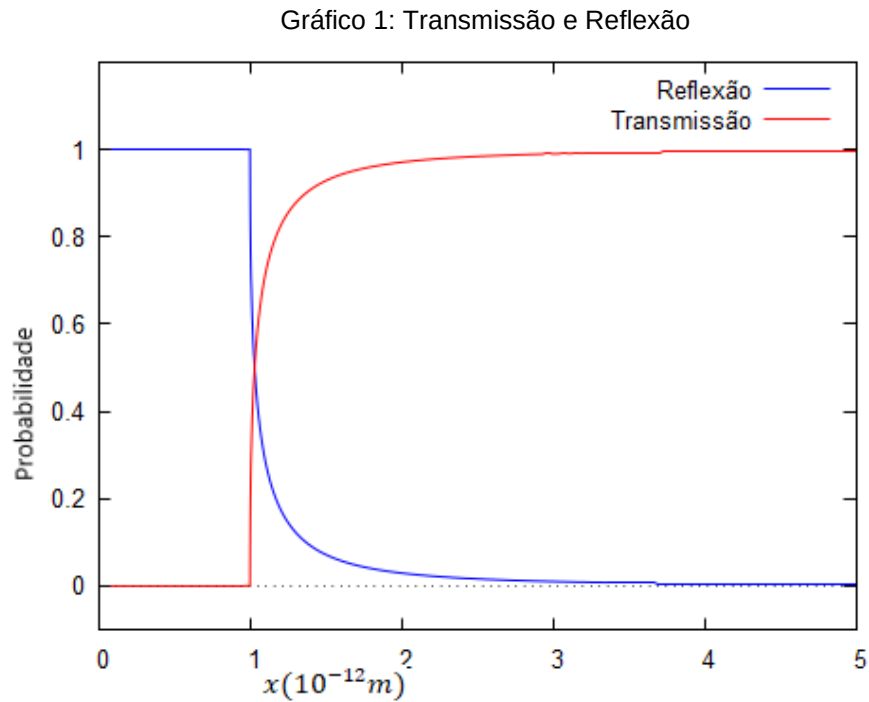
$$T = 1 + \frac{V_0^2 \sin^2(ka)}{4E(E - V_0)} \quad (7.17)$$

Segundo Donangelo e Capaz (2009), o coeficiente de transmissão é menor do que 1 que contradiz a visão clássica, pois nem todas as partículas passam do poço mesmo tendo uma energia maior que a do poço. Portanto, a visão mostra uma leitura diferente para o problema. Segundo YOUNG e FREEDMAN (2008), o esperado no caso clássico é como a energia é maior que do que a energia do poço a taxa de transmissão deveria ser 1, mas na Mecânica Quântica as partículas tem comportamento ondulatório que diferencia do caso clássico, assim algumas partículas são refletidas. Essa transmissão é conhecida como tunelamento quântico.

O microscópio de tunelamento quântico (STM) é utilizado na prática, o microscópio faz uma varredura em superfície atômica e com a taxa de transmissão que é medida pelo aparelho é possível fazer gerar informações para que um computador reproduza uma imagem da superfície atômica.

Mas para caso onde $E > V_0$ todos valores de E são permitidos desde que sejam maiores V_0 .

O gráfico 1 mostra as probabilidades de reflexão e transmissão para uma partícula de massa $m = 1 \cdot 10^{-12} \text{ eV}$ e energia da partícula 2 eV a energia do poço 1 eV , teremos o a igual $1 \cdot 10^{-12}$, assim teremos o seguinte gráfico que mostra a transmissão e reflexão



Fonte: Gráfico produzido pelo autor em xwMaxima

7.2. Segundo Caso $E < V_0$

Para esse caso teremos um $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar$ nas extremidades do poço. Para dentro do poço e $\beta' = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Para o caso onde a partícula está na parte externa do poço teremos as seguintes equações:

$$\psi(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}, \quad x < -\frac{a}{2} \quad (7.18)$$

O termo $e^{-\beta x}$ diverge quando x é igual $-\frac{a}{2}$, nas condições da função de onda o termo tem que ter um valor finito, assim não teremos o componente B da equação (7.18).

$$\psi(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, x > \frac{a}{2} \quad (7.19)$$

Na região onde x é igual $\frac{a}{2}$, é o termo positivo que diverge, logo teremos apenas o termo C da equação (7.19).

Para a solução dentro do poço é análoga ao primeiro caso e assim temos a seguinte expressão

$$\psi(x) = Fe^{i\beta'x} + Ge^{-i\beta'x} \quad (7.20)$$

Será realizada a solução para as extremidades onde $x = -\frac{a}{2}$ e a outra extremidade do poço é $\frac{a}{2}$, para determinar as constantes que acompanham a solução. O primeiro caso a ser trabalhado será para x igual a $-\frac{a}{2}$, cujas equações (7.18) e (7.20) resultam em

$$Ae^{-\frac{\beta a}{2}} = Fe^{-i\beta'\frac{a}{2}} + Ge^{i\beta'\frac{a}{2}} \quad (7.21)$$

$$\beta Ae^{-\frac{\beta a}{2}} = ik(Fe^{-i\beta'\frac{a}{2}} + Ge^{i\beta'\frac{a}{2}}) \quad (7.22)$$

Para chegar na solução é preciso utilizar o método de substituição e isolar os termos G e F, após utilizar o método da substituição chegaremos na seguinte expressão:

$$G = \frac{1}{2} \left(\frac{i\beta'}{\beta} + 1 \right) Ae^{-\frac{\beta a}{2}} e^{-i\beta'\frac{a}{2}} \quad (7.23)$$

$$F = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\beta'}{\beta} \right) A e^{-\frac{ka}{2}} e^{i\beta' \frac{a}{2}} \quad (7.24)$$

A equação para o termo onde x é igual $\frac{a}{2}$ onde teremos uma solução similar ao caso em que $E > V_0$, e apenas alteram-se os sinais dos expoentes na solução e, portanto, $A = 0$ e $D \neq 0$, tal que, as equações são similares à (7.23) e (7.24), e assim

$$D e^{-\frac{\beta a}{2}} = F e^{-i\beta' \frac{a}{2}} + G e^{i\beta' \frac{a}{2}} \quad (7.25)$$

$$k D e^{-\frac{\beta a}{2}} = i k (F e^{-i\beta' \frac{a}{2}} + G e^{i\beta' \frac{a}{2}}) \quad (7.26)$$

Logo, fazendo-se as manipulações algébricas de modo análogo ao caso anterior, temos

$$F = \frac{1}{2} \left(\frac{i\beta'}{\beta} + 1 \right) D e^{-\frac{\beta a}{2}} e^{-ik \frac{a}{2}} \quad (7.27)$$

$$G = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\beta'}{\beta} \right) D e^{-\frac{\beta a}{2}} e^{i\beta' \frac{a}{2}} \quad (7.28)$$

O caso da partícula dentro do poço em que $V_0 = 0$. Logo podemos utilizar a solução geral da equação de Schrödinger, utilizando a transformada de Euler para expressão (7.20), temos a seguinte expressão:

$$\psi(x) = F \sin \beta' x + G \cos \beta' x \quad (7.29)$$

A solução a ser demonstrada em seguida é equivalente para os dois lados. Para resolver, vamos utilizar a função $\text{sen}(\beta x)$ que é uma função ímpar, uma vez que o poço é simétrico. Igualando a equação (7.29) com a (7.18) temos a seguinte equação:

$$F \text{sen} \beta' x = -A e^{\beta x} \quad (7.30)$$

Derivando-se (7.30) em relação à x temos:

$$\beta' F \cos(\beta' x) = -\beta A e^{\beta x} \quad (7.31)$$

Antes de continuar a resolução iremos substituir x por $a/2$ nas equações (7.30) e (7.31).

Portanto dividindo a equação (7.31) pela equação (7.30) a solução será a seguinte expressão:

$$\cot\left(\beta' \frac{a}{2}\right) = -\frac{\beta}{\beta'} \quad (7.32)$$

Para a solução caso a função seja par, utilizamos método análogo ao já utilizado para obter (7.32) de tal modo que temos:

$$\tan\left(\beta' \frac{a}{2}\right) = \frac{\beta}{\beta'} \quad (7.33)$$

Conforme Donangelo e Capaz (2009), todos os casos utilizados para resoluções para o poço finito, podem ser utilizados apenas para valores finitos de E , isso para $E < V_0$, ou seja, os valores de E e V_0 não podem ser infinitos. Como E pode assumir valores finitos diferentes de 0, a partícula pode ser encontrada fora do poço, pelo efeito de transmissão, mas na mecânica clássica a partícula não poderia estar fora do poço, pois assumiria energia negativa.

Para obter a equação normalizada será utilizado a equação (7.29), assim como foi feito anteriormente iremos adotar $G = 0$, assim como mostra no apêndice do livro do Eisberg e Resnick (1979) a função terá essa cara já normalizada:

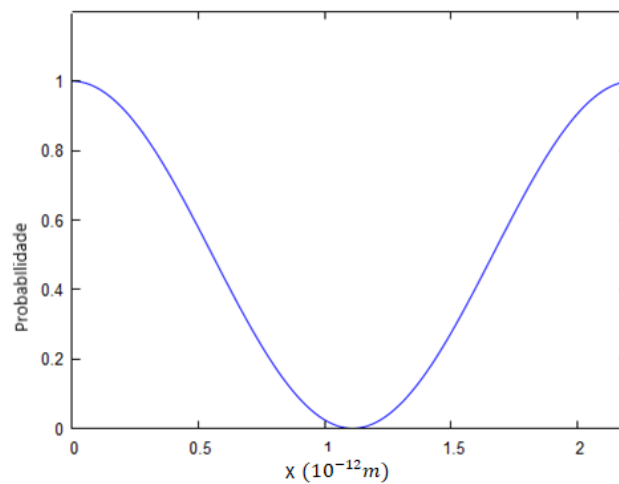
$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \text{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} (x/(a/2))\right) \quad (7.34)$$

Utilizando o modulo ao quadrado da equação (7.34) para construção do gráfico 2

$$\left(\sqrt{\frac{1}{a}} \text{sen}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(\frac{x}{\frac{a}{2}}\right)\right)\right)^2 = 1 \quad (7.35)$$

O gráfico 2 apresenta a probabilidade de encontrar a partícula nas extremidades do poço, vamos adotar a massa da partícula como 1eV, a energia da partícula como 1eV, o valor da energia do poço é igual 2eV e $a = 1 \times 10^{-12}m$.

Gráfico 2: Poço de potencial de quadrado finito

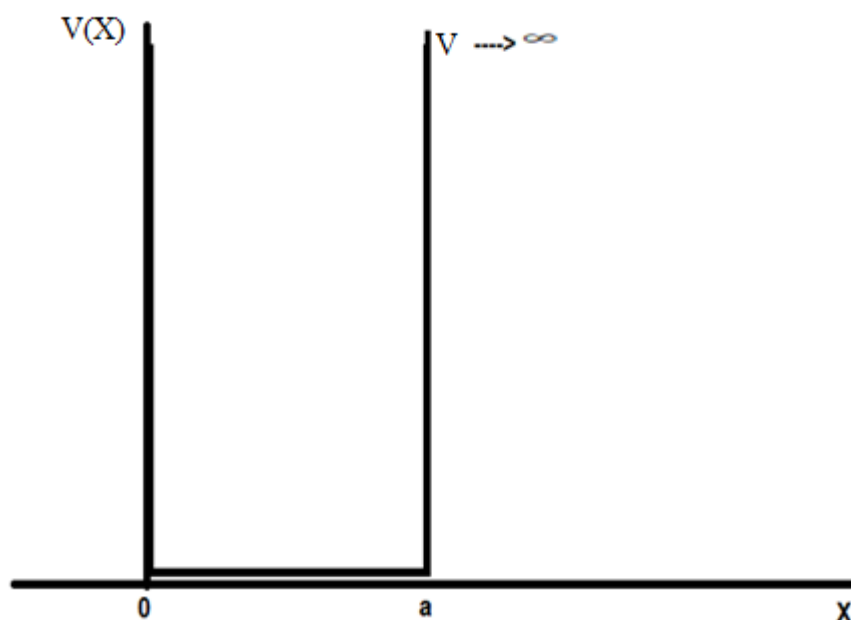


Fonte: Gráfico produzido pelo autor

8. Poço de potencial quadrado infinito

Como diz Griffthis (2011), uma partícula confinada dentro do poço infinito tem comportamento da partícula livre. Porém ela só é livre dentro do poço e longe das suas extremidades, pois quando ela tenta escapar do potencial não consegue. A energia que mantém a partícula no poço é infinita, assim quando a partícula chega na extremidade do poço “bate na parede” que tem característica perfeitamente elástica. Não existe uma parede, mas sim uma energia muito grande nas extremidades que dá esse efeito. A figura 5 mostra a largura do poço que é a região onde a partícula fica confinada, assim temos:

Figura 5. Poço de potencial infinito



Fonte: Acervo do autor

A figura 5 ilustra como é um poço infinito. Logo percebemos que iremos trabalhar nesse caso apenas dentro do poço, pois as partículas não conseguem fugir de dentro do poço infinito. As partículas não são encontradas fora do poço porque a energia na extremidade do poço é tão grande que as partículas não conseguem fugir. Desse modo, torna a solução desse poço um tanto quanto mais simples do que o caso anterior do poço finito.

Vamos resolver o problema para o caso da partícula à esquerda do poço ($x < 0$), dentro do poço ($0 < x < a$) e à direita do poço ($x > 0$). Assim, temos

$$\begin{aligned} V(x)_1 &= +\infty, & x < 0 \\ V(x)_2 &= 0, & 0 < x < a \\ V(x)_3 &= +\infty, & x > a \end{aligned} \quad (8.1)$$

As condições do poço infinito são as regiões externas do poço e dentro do poço, assim podemos adotar a mesma solução para as duas. Como sabemos, a equação Schrödinger pode ser utilizada para verificar a probabilidade de uma partícula ser encontrada em determinada região. Assim, as partículas confinadas no poço infinito não conseguem escapar, pois tem uma repulsão muito grande nos seus extremos, logo, nenhuma partícula escapa para fora do poço então podemos definir que $\psi(x)_1 = \psi(x)_3 = 0$. As partículas não estariam fora do poço.

Dentro do poço, onde temos que $V = 0$, a equação de Schrödinger independente do tempo (5.17)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) \quad (8.2)$$

Que pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = k^2\psi, \quad \text{onde } k \equiv \frac{\sqrt{(2mE)}}{\hbar} \quad (8.3)$$

Temos que a solução para equação de Schrödinger para esse caso é uma solução clássica do oscilador harmônico simples (GRIFFTHIS, 2011). Logo, temos que

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad (8.4)$$

E, para determinar a solução, temos que analisar a continuidade das funções de onda para chegarmos na solução do poço infinito.

$$\psi(x = 0) = \psi(x = a) = 0 \quad (8.5)$$

A equação (8.5) mostra que não teremos partículas na parede do poço quadrado infinito.

Assim sendo, para $x = 0$ na equação (8.4)

$$0 = A\sin(k0) + B\cos(k0) \quad (8.6)$$

Como o cosseno não será nulo, resta que b deve ser igual a zero no segundo termo do lado direito de (8.5) e, portanto, temos que

$$\psi(x) = A\sin(kx) \quad (8.7)$$

Para $x=a$, substituindo o valor de x na equação (8.5), nos leva a

$$0 = A\sin(ka) \quad (8.8)$$

Para que o $A\sin(ka)$ seja igual a zero os termos que acompanham o argumento terão que ser respectivamente múltiplos inteiros de π , tal que $ka = n\pi$. Isolando-se k e substituindo em (8.6), temos

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (8.9)$$

Agora basta encontrar o termo A que é a constante de normalização. Pra isso, usamos a condição de normalização dada pela equação (5.4), tal que:

$$\int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1 \quad (8.10)$$

O resultado da integral da equação (8.10) é igual a

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (8.11)$$

Aplicando-se (8.11) em (8.9), temos que a solução dentro do poço é dada por

$$\psi(x)_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (8.12)$$

Para a equação (8.12) temos que os termos que podem assumir o valor de n tem que ser números inteiros, assim podendo assumir qualquer valor natural. O número quântico n foi adotado para indexar soluções de modos diferentes para equações transcendentais e autofunções correspondentes para cada valor de n e também é utilizado para autovalores correspondentes (EISBERG; RESNICK, 1979). Logo quando maior o valor n maior o estado quântico permitido e assim tendo maior probabilidade de encontrar a partícula.

Por fim, vamos obter a energia para a partícula no poço de potencial infinito uma vez que

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (8.13)$$

Dessa maneira, igualando-se a $k = n\pi/a$ temos

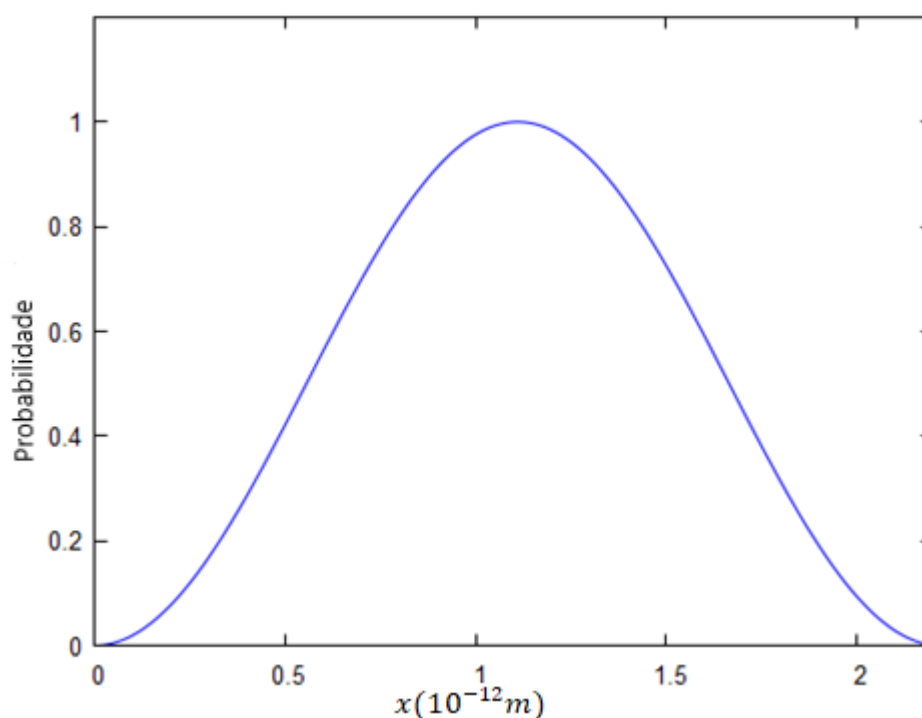
$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad (8.14)$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$, a solução com $n = 0$ não é possível, pois isso implicaria que a função de onda seria 0 para todos valores de x . Os valores negativos não precisam ser considerados, pois são o mesmo resultado dos positivos. Os valores de energia aumentam de forma quadrática, mas sempre na região n . Considerando-se que não temos estados diferentes com a mesma energia,

podemos dizer que os estados, nesse caso, são não-degenerados (DONANGELO E CAPAZ, 2009).

Para a construção do gráfico foi utilizado a equação (8.12) ao quadrado, adotando o valor de a igual $53 \times 10^{-12} m$, n vai ser 1, temos que massa tem valor de $0,938 \times 10^9 eV$ e assim temos o seguinte gráfico

Gráfico 3 – Poço de potencial quadrado infinito



Fonte: Gráfico produzido pelo autor em xwMaxima

O gráfico 3 mostra a partícula presa em um potencial infinito e a probabilidade da partícula estar em determinado ponto dentro do poço infinito, esse é o poço representado na figura 5, onde nas extremidades do poço não existe probabilidade de encontrar partículas, mas dentro do poço infinito as partículas tem comportamento de uma partícula livre.

Encontrá-la em uma dada região delimitada pela incerteza experimental e o princípio da incerteza. Com isso, mesmo as ideias sendo abstratas, com as representações gráficas fica mais claro compreender os temas já abordados.

9. Partícula na Caixa

Nesse capítulo vamos estudar a resolução da partícula presa na caixa, assim estudaremos a partícula na caixa unidimensional, bidimensional e tridimensional.

A solução para a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula dentro de uma caixa quadrada unidimensional de comprimento L é semelhante ao caso da partícula no poço de potencial quadrado infinito.

Onde vamos resolver para uma caixa unidimensional no eixo x e teremos uma resolução igual à do poço infinito. Utilizando equação (5.7) dentro do poço, onde temos que $V = 0$, tal que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x) . \quad (9.1)$$

A solução da equação (9.1) é dada por

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad (9.2)$$

Em que $k = \frac{\sqrt{(2mE)}}{\hbar}$, como já vimos anteriormente, e, portanto, temos que para uma caixa unidimensional de comprimento L , a solução da equação de schrödinger independente do tempo resulta em

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (9.3)$$

Agora vamos quantizar a energia da caixa sabendo que $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ e, de (9.3), onde $k = \frac{n\pi}{L}$, isolando-se o termo E temos a seguinte expressão

$$(9.4)$$

$$E = \frac{(n^2 \pi^2 \hbar^2)}{2mL^2}$$

A equação (9.4) apresenta os estados de energia que a partícula pode assumir, quase todos os termos são fixos, porém o valor de n é variável podendo assumir todos valores dos números naturais exceto 0, quando maior o valor de n maior o nível de energia da partícula.

Conforme Donangelo e Capaz (2009), vamos utilizar nesse caso a equação de Schrödinger independente do tempo e neste caso bidimensional, a solução desse caso é possível, pois é possível utilizar separação de variáveis para deixar o caso mais simples. Assim temos a seguinte expressão para duas variáveis,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \psi(x,y)}{dx^2} + \frac{d^2 \psi(x,y)}{dy^2} \right) + V\psi(x,y) = E\psi(x) \quad (9.5)$$

Cuja solução pode ser dada por:

$$\psi(x,y) = \psi(x)\psi(y). \quad (9.6)$$

Assim a equação (9.6) temos as duas funções separadas, assim podemos reescrever a equações (9.5) para cada um dos termos, ficando da seguinte forma:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} &= E_1 \psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dy^2} &= E_2 \psi(y) \end{aligned} \quad (9.7)$$

Agora, temos algo conhecido para fazer a solução da equação de Schrödinger e usaremos o termo k que já foi utilizado anteriormente a energia apresentada é igual para caixa simétricas, mas a energia total do conjunto é a soma de $E_1 + E_2$. Portanto, temos

$$\psi(x) = A_x \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (9.8)$$

$$\psi(y) = A_y \sin(ky) + B \cos(ky)$$

Com isso, para chegar ao resultado basta usar o mesmo princípio utilizado para partícula em uma dimensão e teremos o mesmo resultado, assim temos:

$$\psi(x) = A_x \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \quad (9.9)$$

$$\psi(y) = A_y \sin\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)$$

Por conseguinte, para chegar ao resultado vamos utilizar novamente a equação (9.6) com o resultado encontrado na equação (9.9). Desse modo, teremos a solução completa da partícula presa em uma caixa quadrada bidimensional de comprimento L, dada por

$$\psi(x, y) = C \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \quad (9.10)$$

Em que $A_x A_y = C$.

Para concluir, temos que achar a constante de normalização C, utilizando equação (5.4). Aplicando-se a equação (9.10) temos:

$$\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} C^2 \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin^2\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) dx dy = 1 \quad (9.11)$$

Teremos que solução para constante de normalização é dada por $C = \frac{2}{L}$ e, portanto, temos que (9.10) resulta em:

$$\psi(x, y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \quad (9.12)$$

Análogo à equação (9.4) podemos chegar na equação de energia para duas variáveis, chegando na seguinte expressão:

$$E = E_1 + E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) \quad (9.13)$$

A partícula na caixa com mais de uma dimensão simétrica tem degenerescência, pois para valores iguais n_x e n_y , mas elas têm duas funções de onda conforme a equação (9.8), ou seja, corresponde a dois estados distintos da partícula quântica (DONANGELO E CAPAZ, 2009). Assim o resultado da equação (9.13) pode ser calculado por $E = E_1 + E_2$, mas lembrando que no caso da partícula unidimensional não é encontrado degenerescência, (Pois tem apenas um valor para n).

Para mostrar a degeneração será feito uma tabela para diversos n para construir a tabela 1 foi utilizada a equação (9.13), assim definimos a massa como $0,938 \times 10^9 eV$ e definimos os L como $53 \times 10^{-12} m$, assim foi gerada a tabela 1 degeneração de energia:

Tabela 1 – Tabela de degeneração de energia

n_x	n_y	$E(eV)$
1	1	1,43
1	2	3,56
2	1	3,56
2	2	5,71
3	1	7,13
1	3	7,13
3	2	9,28
2	3	9,28
3	3	12,85

Fonte: Tabela elaborada pelo autor

Segundo Donangelo e Capaz (2009), quanto maior a simetria de potencial maior será degenerescência dos níveis de potencial associado a ele.

A partir do exposto, trabalharemos com a partícula em três dimensões, nas quais a partícula terá os seguintes limites dentro da caixa:

$$\begin{aligned}
0 &\leq x \leq L_x \\
0 &\leq y \leq L_y \\
0 &\leq z \leq L_z
\end{aligned} \tag{9.14}$$

Assim, a equação de Schrödinger no caso da caixa tridimensional é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} \right) + V\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \tag{9.15}$$

Para resolver, utilizaremos a mesma técnica de separação de variáveis utilizada na caixa em duas dimensões e chegaremos no resultado final. Primeiramente, teremos

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= A_x \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \\
\psi(y) &= A_y \sin\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \\
\psi(z) &= A_z \sin\left(\frac{n\pi z}{L_z}\right)
\end{aligned} \tag{9.16}$$

Vamos trabalhar com a partícula no cubo, logo adotamos o mesmo valor de L para as três dimensões, mas conforme já foi citado nesse trabalho a caixa não precisa ser simétrica, mas nos casos que ela não é simétrica os valores de L são diferentes. Nesse trabalho vamos trabalhar com partícula no cubo e por isso os valores de L são iguais.

Agora basta achar a normalização que vai ser igual à partícula em uma dimensão:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \\
\psi(y) &= \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \\
\psi(z) &= \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)
\end{aligned} \tag{9.17}$$

Faremos a junção das variáveis e teremos o resultado para a partícula livre, mas teremos o seguinte termo surgindo quando formos juntar as equações que é $\sqrt{\frac{2}{L_x}} \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sqrt{\frac{2}{L_z}} = \sqrt{\frac{8}{V}}$ onde $V = L_x L_y L_z = L^3$ vai ser o volume do cubo:

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right) \tag{9.18}$$

Assim chegamos, ao resultado da partícula confinada em um cubo, faltando apenas quantizar a energia, porém será igual a quantização de duas dimensões só com termo z a mais.

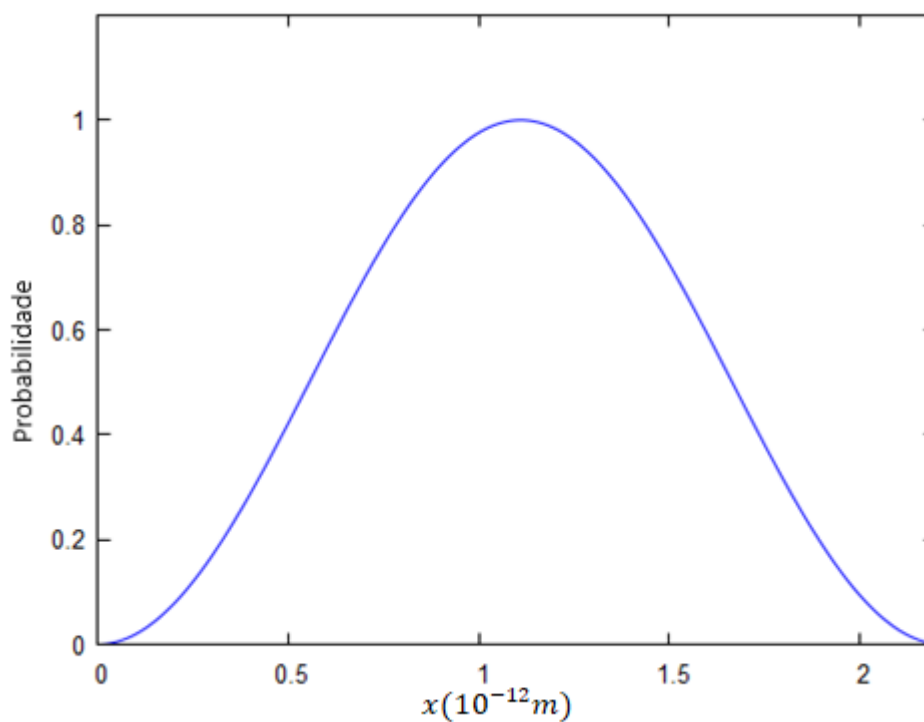
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} * \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \tag{9.19}$$

Dessa forma, demostramos o caso da partícula presa na caixa nas 3 dimensões e mostrando que o estado de energia da partícula é quantizado. Conforme o caso da partícula em duas dimensões esse caso em três dimensões ocorre degenerescência nos níveis de energia.

Para mostra o gráfico de probabilidade dá partícula na caixa unidimensional usaremos a equação (9.2), mas utilizaremos apenas um dos termos da equação, pois conforme foi explicado no capítulo da partícula livre sabendo a direção que a partícula se desloca outro termo é zerado.

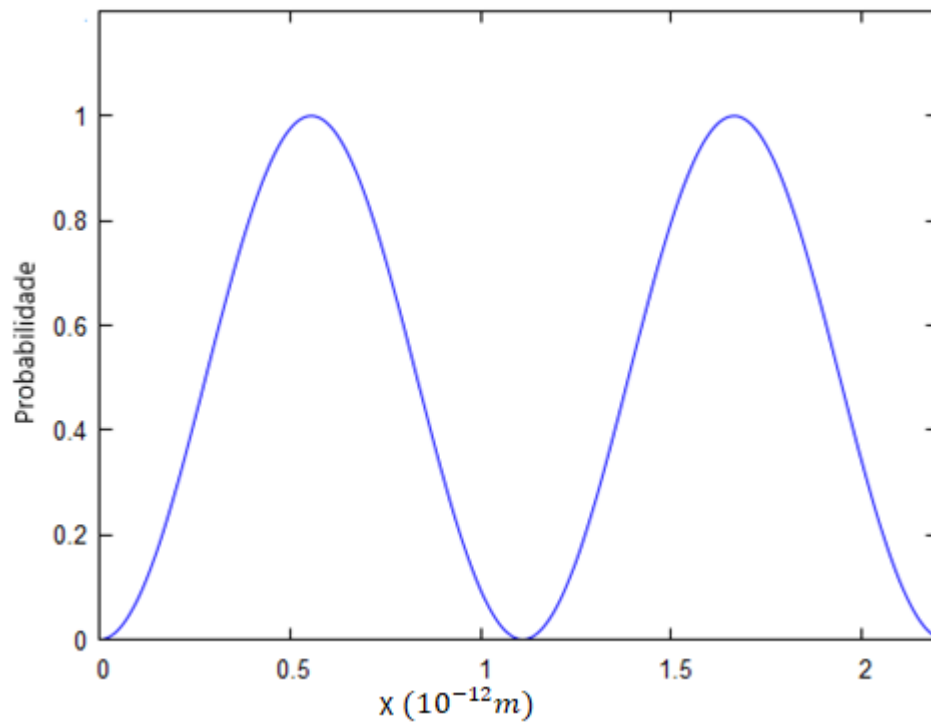
O gráfico 4 mostra a densidade de probabilidade que é dada pelo módulo ao quadrado de (9.18) cujos valores atribuídos vão ser apenas os das dimensões do cubo, vamos adotar a massa com $0,938 \times 10^9 \text{ eV}$ e o valor de L igual a $53 \times 10^{-12} \text{ m}$, assim foi gerado o seguinte gráfico para $n = 1$:

Gráfico 4 – Partícula na caixa unidimensional



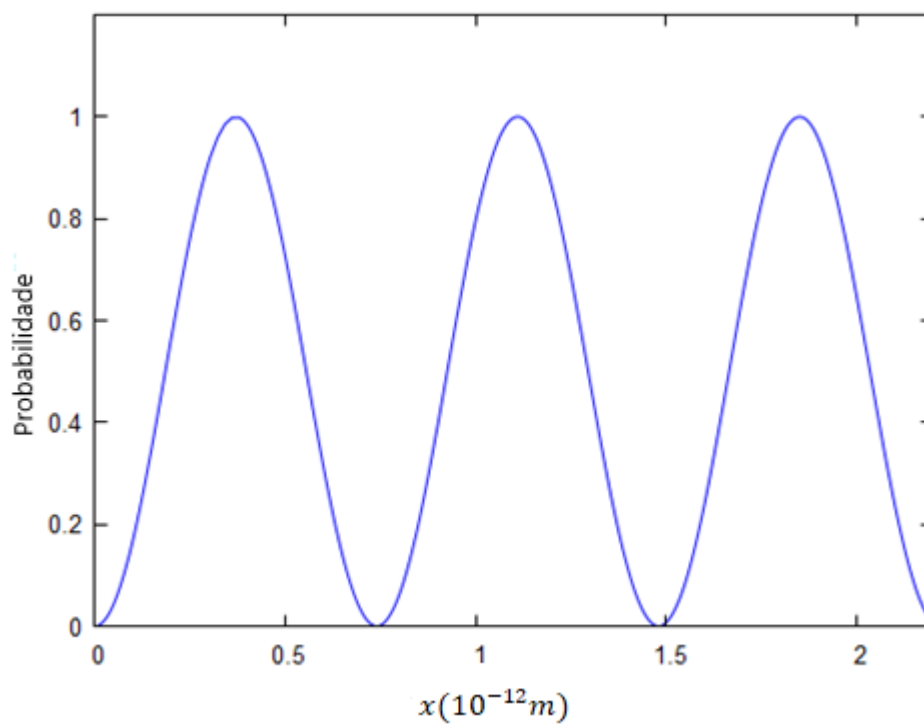
Fonte: Acervo do autor

Os gráficos seguintes representam as densidades de probabilidade para $n = 1, 2, 3$ e 4.

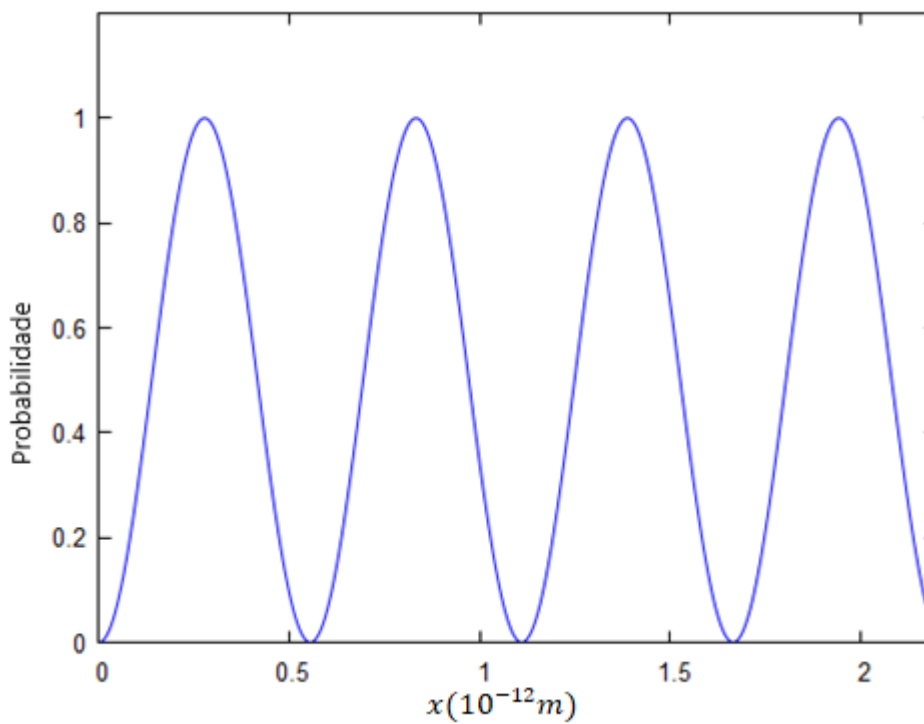
Gráfico 5 – Partícula na caixa unidimensional $n = 2$ 

Fonte: Acervo do autor

Mostrando que para um $n = 2$ teremos dois pontos dentro da caixa que existe a probabilidade máxima de encontrar partículas.

Gráfico 6 – Partícula na caixa unidimensional $n = 3$ 

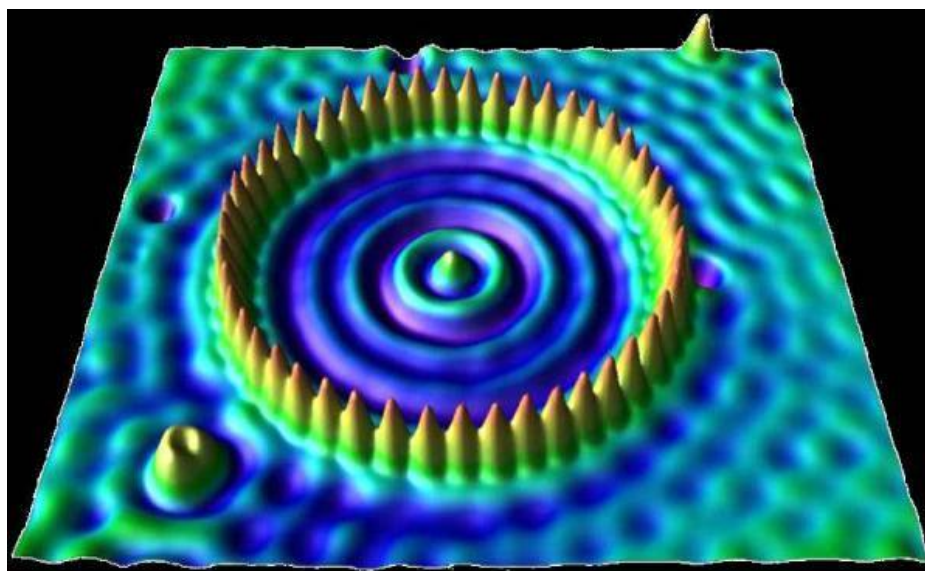
Fonte: Acervo do autor

Gráfico 7 – Partícula na caixa unidimensional $n = 4$ 

Fonte: Acervo do autor

Os gráficos 4, 5, 6 e 8 apresentam as mesmas características, que nenhuma partícula vai ser encontrada nas extremidades, mas a partícula na caixa seria uma partícula presa em uma placa de ferro e fica encurralada naquele espaço, como se fosse um curral da partícula (YOUNG; FREEDMAN, 2008). A figura 6 ilustra com seria um curral quântico temos elétron sobre superfície do cobre confinados em uma estrutura fechada por 48 átomos de ferro. Observando a figura 6 percebemos picos que formam um círculo que são os átomos de ferro sobre a superfície plana de cobre, assim observamos, no centro, o elétron confinado e essa estrutura é chamada de 'curral quântico'

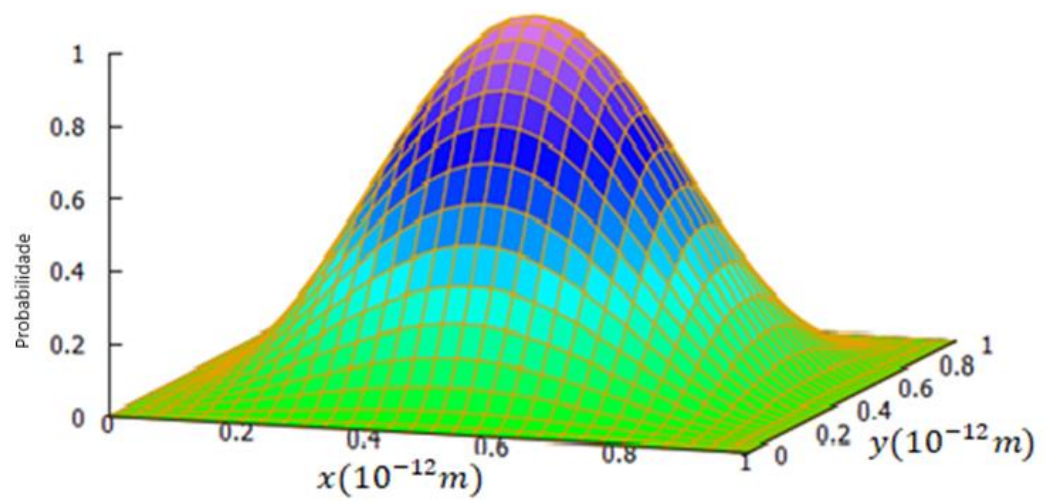
Figura 6 – Curral quântico



Fonte: site da UFG imagem feita por um microscópio de tunelamento disponível < https://www.if.ufg.br/semanas_da_Fisica/semana2003/imagem.html>

O Gráfico VII foi construído para mostrar o dimensionamento na caixa onde x e y representam a largura da caixa e o eixo z representa a probabilidade de encontrar a partícula em determinado ponto da caixa. O gráfico foi construído com a equação (9.10) ao quadrado e usando a massa da partícula como 1 e o L adotado com 1, adotando n_x e n_y como 1, assim temos o seguinte gráfico:

Gráfico 8– Partícula na caixa bidimensional



Fonte: Acervo do autor

10. Considerações finais

O trabalho apresenta uma breve contextualização sobre a história da Mecânica Quântica, assim podemos observar que certas discussões vêm desde Newton e tiveram o entendimento total apenas na Física Moderna e na Mecânica Quântica. Mostrando no trabalho que a ideia de comportamento dual da luz foi estendida para toda natureza e com a equação de Schrödinger podemos descrever o comportamento ondulatório e probabilidade de encontrar a partícula em um espaço determinado.

Este trabalho teve como intenção mostrar as soluções da equação Schrödinger em determinados casos e, com isso, ajudar no entendimento das soluções da equação Schrödinger.

O trabalho apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre diversos temas para o entendimento das bases da Mecânica Quântica até chegar nos primórdios da Mecânica Quântica com equação de Schrödinger e os estados quânticos das partículas.

O trabalho apresenta a solução da equação Schrödinger com objetivo de elucidar as ideias sobre a solução da equação Schrödinger para alguns potenciais, assim apresentar a representação gráfica da probabilidade da partícula nesses casos. As representações gráficas foram feitas com o objetivo de facilitar a compreensão do leitor sobre a ideia de probabilidade.

Assim, como propósito desse trabalho de conclusão de curso é que o aluno de licenciatura possa ter um contato um pouco mais aprofundado da solução da equação de Schrödinger e alguns conceitos da Mecânica Quântica em geral e Física Moderna.

11. Referências

- COSTA, FELIPE DE ALMEIDA; IGLIORI, SONIA BARBOSA CAMARGO. **Estudo da periodicidade a partir da modelagem matemática à luz da Teoria da Aprendizagem Significativa**. Revista de Produção Discente em Educação Matemática, [s. l.], v. 7, ed. 1, 2018. DOI 2238-8044. Disponível em: <https://revistas.pucsp.br/emd/article/viewFile/29005/20276>. Acesso em: 26 jan. 2021.
- DONANGELO, Raul José; CAPAZ, Rodrigo Barbosa. **Introdução à Mecânica Quântica**. 2. ed. Rio de Janeiro: Fundação CECIERJ, 2009. 120 p. v. 1.
- DONANGELO, Raul José; CAPAZ, Rodrigo Barbosa. **Introdução à Mecânica Quântica**. 2. ed. Rio de Janeiro: Fundação CECIERJ, 2009. 162 p. v. 2.
- EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas**. 1. ed. São Paulo: GEN LTC, 1979.
- GIL, Antonio Carlos. **Métodos e técnicas de pesquisa social**. 6. ed. Editora Atlas SA, 2008.
- GRIFFTHIS, David J. Equação de Schrodinger Independente do Tempo. *In*: GRIFFTHIS, David J. **Mecânica Quântica**. 2. ed. São Paulo: Pearson Universidades, 2011. v. 1, cap. 2, p. 17 - 61.
- GRIFFTHIS, David J. A Função de onda. *In*: GRIFFTHIS, David J. **Mecânica Quântica**. 2. ed. São Paulo: Pearson Universidades, 2011. v. 1, cap. 1, p. 1-14.
- KRAUSE, Décio. **O gato de Schrödinger não está vivo e morto antes da medição: sobre a interpretação dos resultados quânticos**. *In*: ALMEIDA, Edgar; COSTA-LEITE, Alexandre; FREIRE, Rodrigo (org.). Seminário Lógica no Avião. 1. ed. Brasília: PPGFIL/UnB, 2019. v. 1, cap. 2, p. 104 - 123.

Disponível em: <https://philarchive.org/archive/EDGSLN>. Acesso em: 1 fev. 2021.

LEITE, Anderson; SIMON, Samuel. **Werner Heisenberg e a Interpretação de Copenhague**: a filosofia platônica e a consolidação da teoria quântica. *Scientiae studia*, São Paulo, v. 8, ed. 2, p. 213 - 241, 2010.

LIMA, Nathan; CAVALCANTI, Cláudio; OSTERMANN, Fernanda. **Concepções de Dualidade Onda-Partícula: Uma proposta didática construída a partir de trechos de fontes primárias da Teoria Quântica**. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, Rio Grande do Sul, v. 43, n. e20200270, p. 1-16, 31 out. 2020. DOI <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2020-0270>. Disponível em: <https://www.scielo.br/pdf/rbef/v43/1806-9126-RBEF-43-e20200270.pdf>. Acesso em: 18 mar. 2021.

MENESES, Ramiro D. B. **A Probabilidade segundo Max Born: da Mecânica Quântica à Filosofia**. *Eikasia*, Portugal, v. 98, p. 200-224, 2008. Disponível em: <https://www.revistadefilosofia.org/19-06.pdf>. Acesso em: 21 mar. 2021.

MONTENEGRO, Roberto Luiz; PESSOA JR, Osvaldo. **INTERPRETAÇÕES DA TEORIA QUÂNTICA E AS CONCEPÇÕES DOS ALUNOS DO CURSO DE FÍSICA**. *Investigações em Ensino de Ciências*, Rio Grande do Sul, v. 7, ed. 1, p. 107-126, 2002. Disponível em: <https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&ved=2ahUKEwicuuD0t8nvAhWxGbkGHYzEALAQFjAAegQIAxAD&url=https%3A%2F%2Fwww.if.ufrgs.br%2Fcref%2Fojs%2Findex.php%2Fienci%2Farticle%2Fdownload%2F564%2F356&usg=AOvVaw3d1d6gYJkrnqu7aU0W-lix>. Acesso em: 23 mar. 2021

PESSOA JR, Osvaldo. **Mapa das Interpretações da Teoria Quântica**. *Física: Estudos Filosóficos e Históricos*, São Paulo, v. 1, 2006. DOI ISBN: 85-904198-2-7. Disponível em: <http://opessoa.ffe.usp.br/sites/opessoa.ffe.usp.br/files/Inter-AFHIC-47.pdf>. Acesso em: 23 mar. 2021.

PESSOA JR, Osvaldo. **Interpretações Básicas da Teoria Quântica**. Adaptado do Encontro no Hades – IFUSP, São Paulo, ano 1-3, v. 1, n. 1, ed. 1, 2012. Disponível em: <http://opessoa.fflch.usp.br/sites/opessoa.fflch.usp.br/files/FMQ-16-Interpretacoes.pdf>. Acesso em: 8 maio 2021.

PIZZANI, Luciana; SILVA, Rosemary Cristina da; BELLO, Suzelei Faria; HAYASHI, Maria Cristina Piumbato Innocentin. **A ARTE DA PESQUISA BIBLIOGRÁFICA NA BUSCA DO CONHECIMENTO**. Revista Digital de Biblioteconomia e Ciência da Informação, São Paulo, ano ISSN 1678-765X, v. 10, n. 1, ed. 1, p. 53-66, Jun/Dez 2012. DOI 025.52. Disponível em: https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&ved=2ahUKEwjfXlGcme_xAhW-ppUCHd9OBzEQFjABegQIAhAD&url=https%3A%2F%2Fperiodicos.sbu.unicamp.br%2Ffojs%2Findex.php%2Frdhci%2Farticle%2Fdownload%2F1896%2Fpdf_28%2F2549%23%3A~%3Atext%3DEntende%252Dse%2520por%2520pesquisa%2520bibliogr%25C3%25A1fica%2Cda%2520Internet%2520entre%2520outras%2520fontes.&usq=AOvVaw3ecP4-_ZxliJoAJCVxlQww. Acesso em: 3 jul. 2021.

RODRIGUES, Weiller Vilela. **BOHR E O PRINCÍPIO DA COMPLEMENTARIDADE: SUBSÍDIOS PARA MATERIAIS EDUCACIONAIS NUMA ABORDAGEM HISTÓRICA**. Orientador: Andreia Guerra de Moraes. 2016. 62 f. Dissertação (Pós-graduação em Ciência, Tecnologia e Educação) - CEFET, Rio de Janeiro, 2016. Disponível em: <http://dippg.cefet-rj.br/ppcte/attachments/article/81/2016%20%20BOHR%20E%20O%20PRINCÍPIO%20DA%20COMPLEMENTARIDAD~.pdf> Acesso em: 20 set.

SANTOS, Priscila Sarcinelli. **Estudo dos mecanismos de formação das espécies PN e NS no meio interestelar, em cometas e atmosferas planetárias**. Orientador: André Silva Pimentel. 2009. 96 f. Dissertação (Pós-graduação em Química) - Puc - Rio, Rio de Janeiro, 2009.

SILVA, Indianara; FREIRE JR, Olival. **A descoberta do efeito Compton: De uma abordagem semiclássica a uma abordagem quântica**. Revista Brasileira de Ensino de Física, Bahia, ano 1601, v. 36, n. 1, p. 01-14, 6 fev. 2014. Disponível em:
https://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172014000100026. Acesso em: 17 mar. 2021.

TIPLER , Paul A.; LLEWELLYN, Ralph A. **Física Moderna**. 6. ed. atual. Rio de Janeiro: LTC, 2014. 500 p. v. 1.

Rocha, José Fernando M. (2011). **Origens e evolução das ideias da Física**. Salvador: LTC, 2011. 203 p.

YOUNG, Hugh D; FREEDMAN, Roger A. **Física IV: Óptica e Física moderna**. 12. ed. São Paulo: Pearson Universidades, 2008. 522 p. v. 4.

YOSHIMURA1, Elisabeth Mateus. **Física das Radiações**: interação da radiação com a matéria. 1. 2009. Disponível em:
<<http://www.rbfm.org.br/rbfm/article/view/35/v3n1p57>>. Acesso em: 30 ago. 2020.

Apêndice

Os demais gráficos da partícula na caixa bastam variar os valores n

```
→ /*Partícula numa caixa de tamanho L*/;

→ Lx: 53$;
Ly: 53$;
Lr: 53·10^-12$; /* Raio do Átomo de Hidrogênio */
nx: 1$;
ny: 1$;
nz: 1$;
Ax: sqrt(2/Lx)$;
Ay: sqrt(2/Ly)$;
hcut: 4.13566743·10^-15/(2·%pi)$; /* Constante de Plank em Elétrons-Volts */
Me: 0.938·10^9$; /* Massa do Protón em Elétrons-Volts */
psix: Ax·sin((nx·%pi·x)/Lx)$;
psixy: Ax·sin((nx·%pi·x)/Lx)·Ay·sin((ny·%pi·y)/Ly)$;

→ /* Função de onda*/;

→ wxplot2d(psix,[x,0,2·Lx],[xlabel, "X·10^-12m"],[ylabel, "Y"],[title, "Função de onda de X"]);
```

Função de onda de X

Código partícula na caixa

```
Mathemat...
1/2 2 3 √ i
3 3 = ∞ 6
\ 3 3 =
r 3 c 3
V 3 3 α 3

/*(15) nx:1$ ny:1$ a:1$
psi(x,y):=sin(nx·%pi·x/a)·sin(ny·%pi·y/a);
plot3d(psi(x,y)^2,[x,0,a],[xlabel, "X·10^-12m"],[y,0,a])$
wxplot3d(psi(x,y)^2,[x,0,a],[y,0,a],[gnuplot_preamble,
"set pm3d at b"])$
```

```
Histórico
plot3d(psi(x,y)^2,[x,0,a],[xlabel, "X·10^-12m"],[y,0,a])
psi(x,y):=sin(nx·%pi·x/a)·sin(ny·%pi·y/a)
a:1
ny:1
nx:1
plot3d(psi(x,y)^2,[x,0,a],[xlabel, "X·10^-12m"],[y,0,a])
nc1/v 1 - sin(nv·%pi·x/a)·sin(mu·%pi·y/a)
```

Código partícula na caixa 3d

```
→ if numer#false then numer:false else numer:true;
/*maxima_tempdir: "C:/maxima-5.41.0a";*/
(%o1) true

→ /*Poço infinito de limite a*/;

→ Lx: 53$;
a: 53·10^-12$; /* Raio do Átomo de Hidrogênio */
nx: 1$;
Ax: sqrt(2/Lx)$;
hcut: 4.13566743·10^-15/(2·%pi)$; /* Constante de Plank em Elétrons-Volts */
Me: 0.5109989461·10^6$; /* Massa do Elétron em Elétrons-Volts */
psix: Ax·sin((nx·%pi·x)/Lx)$;
```

Código partícula poço infinito

```

T:=4*sqrt(1-V1/x)/(1+sqrt(1-V1/x))^2;

R1: 1;
T1: 0;
R0: if x<1 then R1 else R;
T0: if x<1 then T1 else T;
wxplot2d([R0, T0], [x, 0, 5], [y, -0.1, 1.2], [legend, "Reflexão", "Transmissão"], [ti

(1017) 
$$\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{1}{x}}}{\left(\sqrt{1 - \frac{1}{x}} + 1\right)^2}$$

(1018) 
$$\frac{4 \sqrt{1 - \frac{1}{x}}}{\left(\sqrt{1 - \frac{1}{x}} + 1\right)^2}$$

(1019) 
$$\frac{1}{0}$$

(1020) 
$$\frac{1}{0}$$

(1021) 
$$\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{1}{x}}}{\left(\sqrt{1 - \frac{1}{x}} + 1\right)^2}$$

(1022) if x<1 then 1 else 
$$\frac{4 \sqrt{1 - \frac{1}{x}}}{\left(\sqrt{1 - \frac{1}{x}} + 1\right)^2}$$

(1023) if x<1 then 0 else 
$$\frac{1}{\left(\sqrt{1 - \frac{1}{x}} + 1\right)^2}$$


```

Código transmissão e reflexão

```

(%i18) m: 1;
V: 2;
E: 1;
h: 1;
a: 1;
A: 1/a;
k: sqrt(2*m*E)/h;
K: sqrt(2*m*(V-E))/h;
p1: A^2*(cos(k*x-a/2))^2;
p2: 2*A^2*(cos(a/2))^2*exp(-2*K*x);
p3: (16/9)*A^2;
psi: if x<0 then p1 else p2;

y1: -5;
y2: 0;
y: if x<0 then y2 else y1;
b: 2;

wxplot2d([psi,y], [x, -10, 10], [xlabel, "x"], [ylabel, "p"], [legend, "Probabilidade
plot2d([b,y], [x, -10, 10], [xlabel, "x"], [legend, "Energia Particula Incidente", "D

```

Partícula no poço de potencial quadrado finito