Notas de Aula de Física Quântica (BCK0103)

Prof. Dr. Marcelo Augusto Leigui de Oliveira

Poço quadrado infinito

I. POÇO INFINITO UNIDIMENSIONAL

A energia de uma partícula (elétron, próton, átomo, ...) confinada numa região do espaço por um potencial é quantizada. O poço infinito unidimensional é o protótipo de problemas que apresentam esta propriedade.

A. *Confinamento na região* $0 \leq x \leq L$:

Seja, inicialmente, uma função potencial dada por:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L; \\ +\infty, & x \leq 0 \text{ ou } x \geq L. \end{cases} \tag{1}$$

As funções de onda devem ser da partícula livre dentro e zero fora da região de confinamento:

$$\psi(x) = \begin{cases} \text{livre}, & 0 < x < L; \\ 0, & x \leq 0 \text{ ou } x \geq L. \end{cases} \tag{2}$$

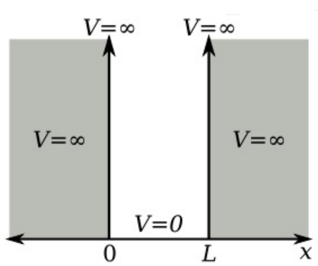

Figura 1: Poço infinito unidimensional (caso A).

Para a partícula livre, a equação de Schrödinger fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x), \tag{3}$$

onde definimos $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

A solução geral para esta equação diferencial é dada pela função:

$$\psi(x) = A\,\text{sen}(kx) + B\ \cos(kx), \tag{4}$$

contudo, temos que satisfazer às condições de contorno das equações 2:

- Em $x = 0,\ \psi(0) = 0$, impondo $B = 0$ e reduzindo a solução para $\psi(x) = A\,\text{sen}(kx)$.
- Em $x = L$, a condição de contorno leva a:

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow A\,sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi,$$

ou seja, o número de onda k é quantizado e, por conseguinte, o comprimento de onda λ:

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \boxed{\lambda_n = \frac{2L}{n}}, \text{ onde } n = 1, 2, 3, ... \text{ (série harmônica)} \tag{5}$$

Esta condição de quantização está representada na figura 5, no padrão correspondete às *ondas estacionárias*:

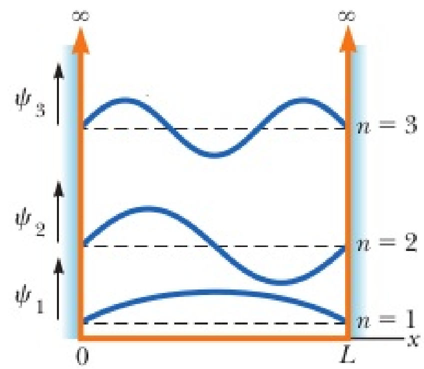

Figura 2: Padrão de ondas estacionárias do poço infinito unidimensional.

As soluções $\psi_n(x)$ e as densidades de probabilidade para se localizar a partícula $|\psi_n(x)|^2$ estão dadas na figura 3, para os três primeiros níveis de energia:

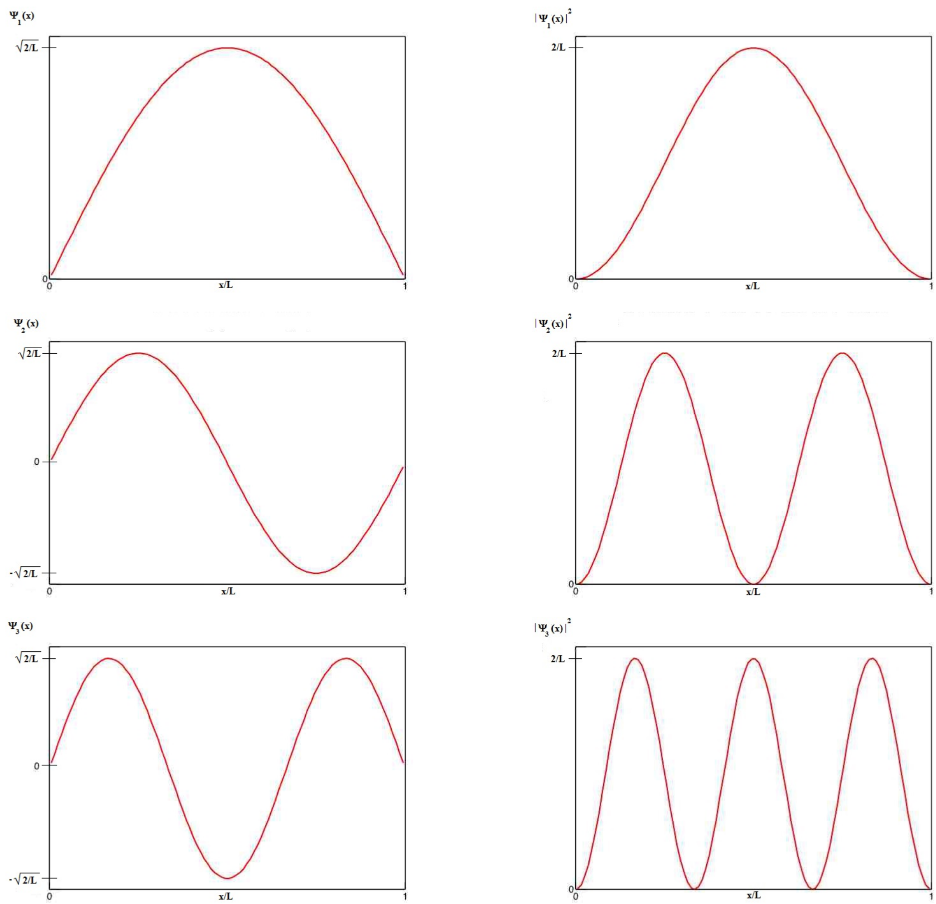

Figura 3: As três primeiras soluções ($n = 1, 2, 3, ...$) do poço infinito unidimensional, para o caso A (confinamento entre $0 \leq x \leq L$).

B. *Confinamento na região $-L/2 \leq x \leq L/2$:*

Seja, agora, uma função potencial dada por:

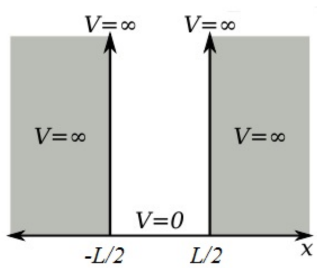

Figura 4: Poço infinito unidimensional (caso B).

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -L/2 < x < L/2; \\ +\infty, & x \leq -L/2 \text{ ou } x \geq L/2. \end{cases} \tag{6}$$

As funções de onda devem ser da partícula livre dentro e zero fora da região de confinamento:

$$\psi(x) = \begin{cases} \text{livre}, & -L/2 < x < L/2; \\ 0, & x \leq -L/2 \text{ ou } x \geq L/2. \end{cases} \tag{7}$$

Teremos, para a partícula livre, a mesma equação de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x),$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. E a solução geral também é a mesma:

$$\psi(x) = A\,\text{sen}(kx) + B\,\cos(kx), \tag{8}$$

mas temos que satisfazer agora às condições de contorno descritas em 7:

- Em $x = -L/2$:

$$A\,\text{sen}(-kL/2) + B\,\cos(-kL/2) = 0 \Rightarrow -A\,\text{sen}(kL/2) + B\,\cos(kL/2) = 0 \tag{9}$$

- Em $x = L/2$:

$$A\,\text{sen}(kL/2) + B\,\cos(kL/2) = 0 \tag{10}$$

Somando-se e subtraindo-se as equações acima, vêm:

$$\begin{aligned} &\text{(9)+(10):} \quad 2B\,\cos(kL/2) = 0 \Rightarrow \text{ ou } B = 0 \text{ ou } \cos(kL/2) = 0 \\ &\text{(9)-(10):} \quad -2A\,\text{sen}(kL/2) = 0 \Rightarrow \text{ ou } A = 0 \text{ ou sen}(kL/2) = 0 \end{aligned}$$

- Escolhendo-se $B = 0$ e $A \neq 0$:

$$\text{sen}(kL/2) = 0 \Rightarrow \frac{kL}{2} = n\pi \Rightarrow k = \frac{2n\pi}{L} = \frac{m\pi}{L},$$

onde m só pode assumir valores pares: $m = 2, 4, 6, ...$

- Escolhendo-se $A = 0$ e $B \neq 0$:

$$\cos(kL/2) = 0 \Rightarrow \frac{kL}{2} = \frac{m\pi}{2} \Rightarrow k = \frac{m\pi}{L}, \tag{11}$$

onde m só pode assumir valores ímpares: $m = 1, 3, 5, ...$

Generalizando:

$$k_n = \frac{n\pi}{L},\ n = 1, 2, 3, ...,\ \text{ onde: } \begin{cases} \psi(x) = A\ \text{sen}(k_n x), & n \text{ par;} \\ \psi(x) = B\ \cos(k_n x), & n \text{ ímpar.} \end{cases} \tag{12}$$

Novamente, temos o número de onda k e o comprimento de onda λ quantizados:

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \boxed{\lambda_n = \frac{2L}{n}}, \text{ onde } n = 1, 2, 3, ... \text{ (série harmônica)}, \tag{13}$$

que geram o mesmo padrões semelhantes de ondas estacionárias.

C. Níveis de energia

Uma vez que obtivemos, nos casos A e B, números de onda quantizados e já que estes são dados em função da energia ($p_n = \hbar k_n = \sqrt{2mE_n}$), consequentemente, os níveis de energia são quantizados:

$$k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow \frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}},\ n = 1, 2, 3, ..., \tag{14}$$

e têm os mesmos valores para as duas regiões de confinamento estudadas.

Representamos no diagrama abaixo os três primeiros níveis de energia:

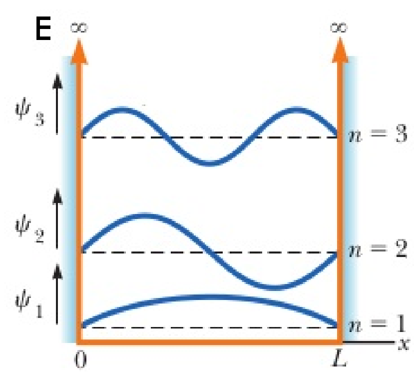

Figura 5: Soluções e níveis de energia para os 3 primeiros níveis do poço infinito unidimensional.

As soluções $\psi_n(x)$ e as densidades de probabilidade para se localizar a partícula $|\psi_n(x)|^2$ estão dadas na figura 6, para os três primeiros níveis de energia:

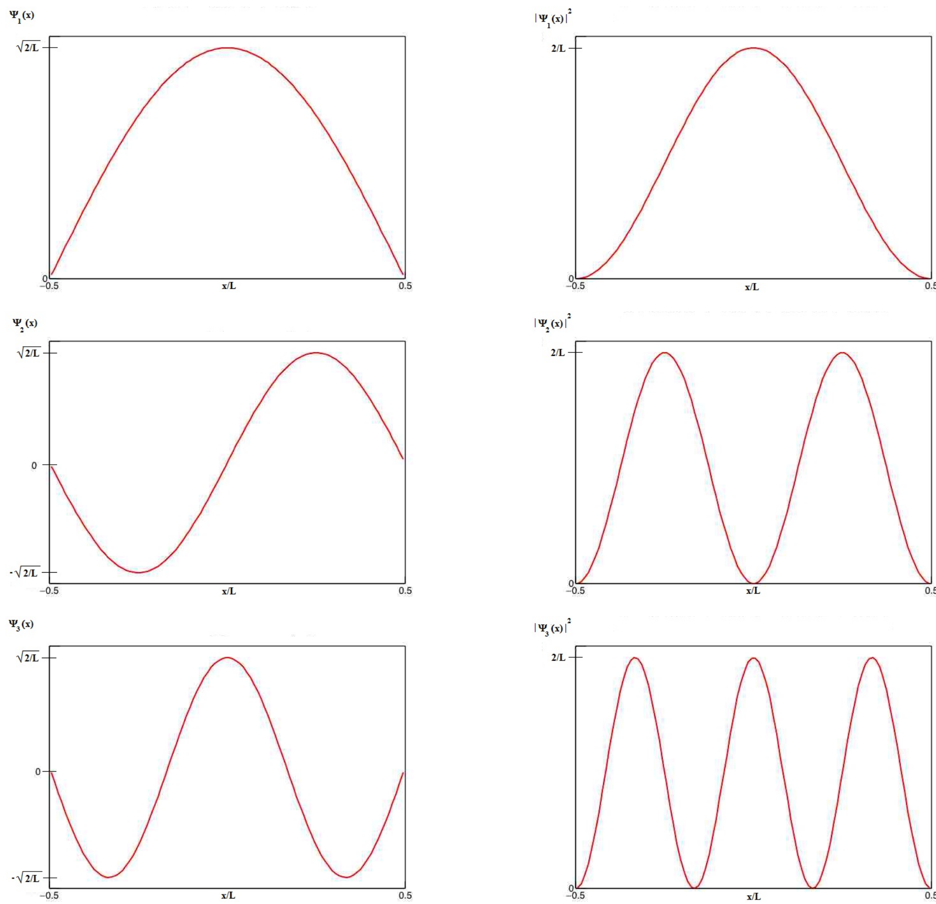

Figura 6: As três primeiras soluções ($n = 1, 2, 3, ...$) do poço infinito unidimensional, para o caso B (confinamento entre $-L/2 \leq x \leq L/2$).

D. Normalização das soluções (caso A)

Falta determinar a constante A para cada modo n, por isso, vamos denotá-las por A_n:

$$\psi_n(x) = A_n \text{sen}\, k_n x.$$

Impondo a condição de normalização, temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = A_n^2 \int_0^L \text{sen}^2 k_n x\, dx = 1$$

a integral acima pode ser calculada por partes:

$$\int_0^L \text{sen}^2 k_n x\, dx = \int_0^L \text{sen} k_n x\, \text{sen} k_n x\, dx = -\left(\cancel{\text{sen} k_n x} \frac{cos\, k_n x}{k_n}\right)\Bigg|_0^L + \frac{\cancel{k_n}}{\cancel{k_n}} \int_0^L \cos^2 k_n x\, dx = \int_0^L (1 - \text{sen}^2 k_n x)\, dx \Rightarrow$$

$$2\int_0^L \text{sen}^2 k_n x\, dx = L \Rightarrow \int_0^L \text{sen}^2 k_n x\, dx = \frac{L}{2} \Rightarrow$$

$$A_n^2 \int_0^L \text{sen}^2 k_n x\, dx = A_n^2 \left(\frac{L}{2}\right) = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}, \text{ independente de } n.$$

Então:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}\, \frac{n\pi x}{L}} \tag{15}$$

E incluindo-se a parte temporal, a solução completa fica:

$$\boxed{\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}\, (k_n x) e^{-i\omega t}} \tag{16}$$

Obs.: as constantes de normalização para o caso B (A_n para n par e B_n para n ímpar) têm cálculo análogo e dão exatamente o mesmo resultado. Deixaremos como exercício para o leitor.

II. EXERCÍCIOS

1. Verifique que a função
$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A\text{sen}(4\pi x/a)e^{-iEt/\hbar} & , -a/2 < x < a/2; \\ 0 & , x \leq -a/2 \text{ ou } x \geq a/2 \end{cases}$$
é uma solução da equação de Schrödinger na região $-a/2 < x < a/2$ para uma partícula que se move livremente, mas confinada nesta região. Determine a energia associada ao estado cuja função é descrita pela função de onda acima e encontre a constante de normalização.

2. Um elétron está confinado num poço de potencial finito com largura 1,0 nm e altura 2,0 eV. Existe um estado ligado correspondente a $n = 3$ para este caso? Justifique.

3. Um elétron está confinado na região entre $x = 0$ e $x = L$, onde pode mover-se livremente. Fora desta região o potencial é infinito.
   (a) Determine a função de onda normalizada do estado fundamental para este elétron em todo o espaço;
   (b) Qual a probabilidade de encontrar o elétron na região entre 0 e $L/3$, quando este está no primeiro estado excitado?

4. Considere um elétron aprisionado num poço de potencial unidimensional infinito com largura 3 Å. Qual é a probabilidade de encontrar o elétron no primeiro estado excitado na região entre $x = 0,5\,L$ e $x = 0,75\,L$?

5. Considere uma partícula de massa m confinada no intervalo $-a/2 < x < a/2$, onde o potencial é nulo. Fora desta região o potencial é infinito.
   (a) Resolva a equaçao de Schrödinger para esse sistema e mostre que as funções de onda resultantes são de dois tipos: pares, $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$, e ímpares, $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$;
   (b) Mostre que essas funções de onda são equivalentes às obtidas para o caso em que a partícula está confinada no intervalo $0 < x' < a$. Dica: aplique uma translação na origem para $x' = x + a/2$.

Respostas:

1. $E = \frac{8\pi^2\hbar^2}{ma^2}$; $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$.
2. demonstração; não existe.
3. (a) demonstração;
   (b) 0,402.
4. 0,25.
5. (a) $\sqrt{2/a}\,\text{sen}(n\pi x/a)$ para n par e $\sqrt{2/a}\,\cos(n\pi x/a)$ para n ímpar;
   (b) demonstração.