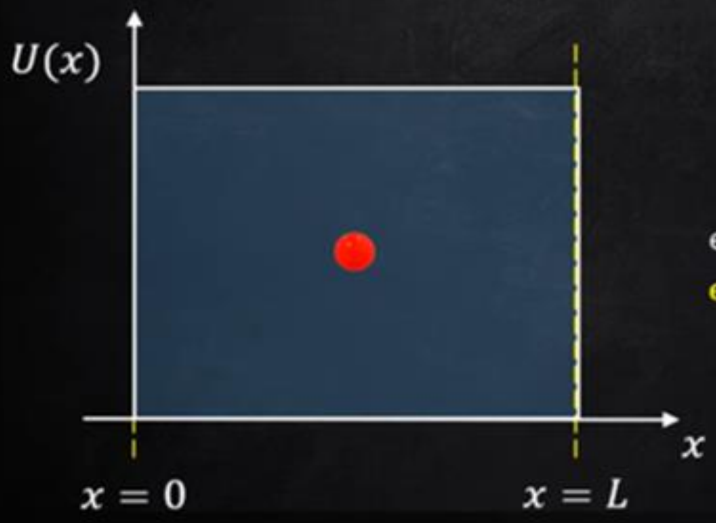
POÇO QUADRADO INFINITO

Trabalho apresentado ao Profº. Drº. Pieter Willem Westera
Para critérios de avaliação na disciplina PEF - 103 - Mecânica Quântica

Eric Ramos Flaminio RA 22202310154
Francisco das Chagas de Sousa RA 22202310155
Mestrado Nacional Profissional em Ensino de Física – MNPEF
Universidade Federal do ABC- UFABC
Santo André – SP
Março/2024

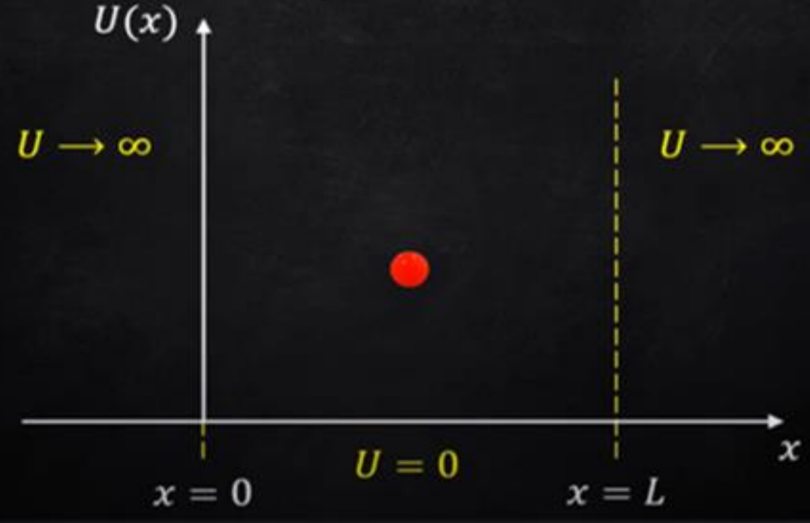
Poço Quadrado Infinito (Parte 1)

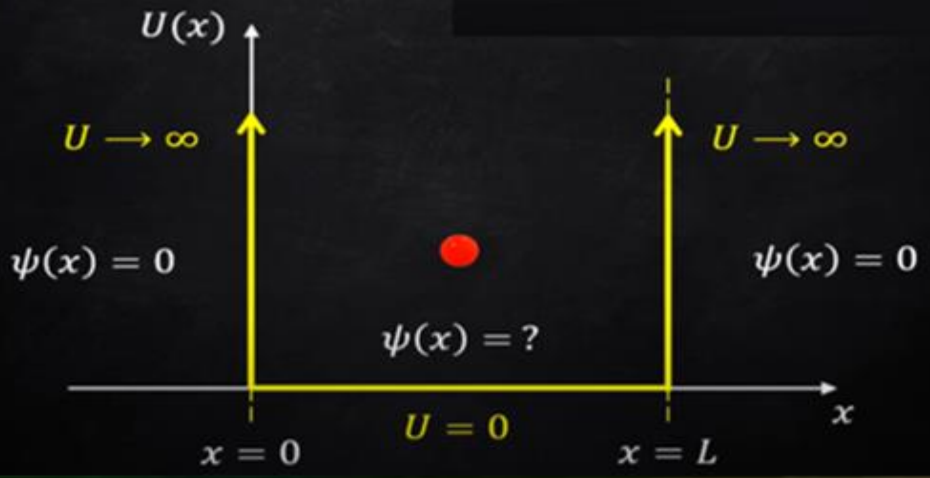
Partícula em uma caixa



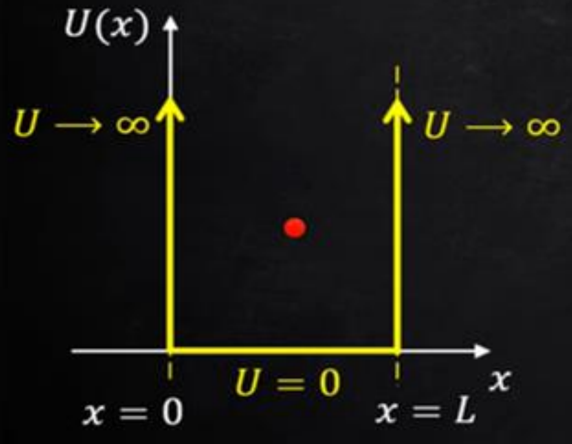
Quanticamente, esta situação é uma primeira aproximação para entender o que pode ocorrer com a **energia** de uma partícula confinada, como por exemplo, **elétrons num átomo** ou **prótons no núcleo**.

Poço de potencial





Como $U(x)$ não depende do tempo, podemos utilizar a **equação de Schrödinger independente do tempo** para encontrar $\psi(x)$.



$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & x \leq 0 \;\; e \;\; x \geq L \end{cases}$$

Dentro do poço de potencial (caixa):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\,\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi$$

Utilizando a relação de De Broglie:

$$\frac{h}{p} = \lambda = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow k = \frac{2\pi p}{h} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\,\psi$$

Que possui como **solução geral**:

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

Como $\psi(0) = 0$:

$$0 = A\,\text{sen}\,(0) + B\cos(0)$$

$$B = 0$$

Como $\psi(L) = 0$:

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

$$A\,\text{sen}\,(kL) = 0$$

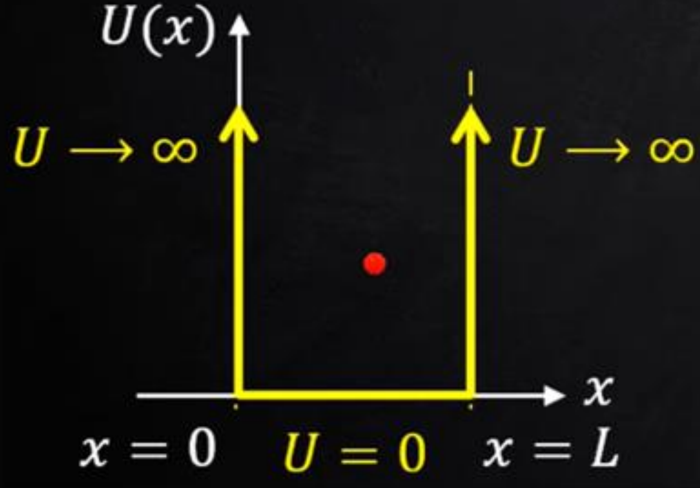
$$A\,\mathrm{sen}\,(kL) = 0$$

$A = 0$ não é uma solução aceitável, pois dessa forma $\psi(x)$ seria zero dentro da caixa.

$$A \neq 0$$

$$k_n L = n\pi \implies k_n = n\frac{\pi}{L} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = n\frac{\pi}{L} \implies \lambda_n = \frac{2L}{n} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

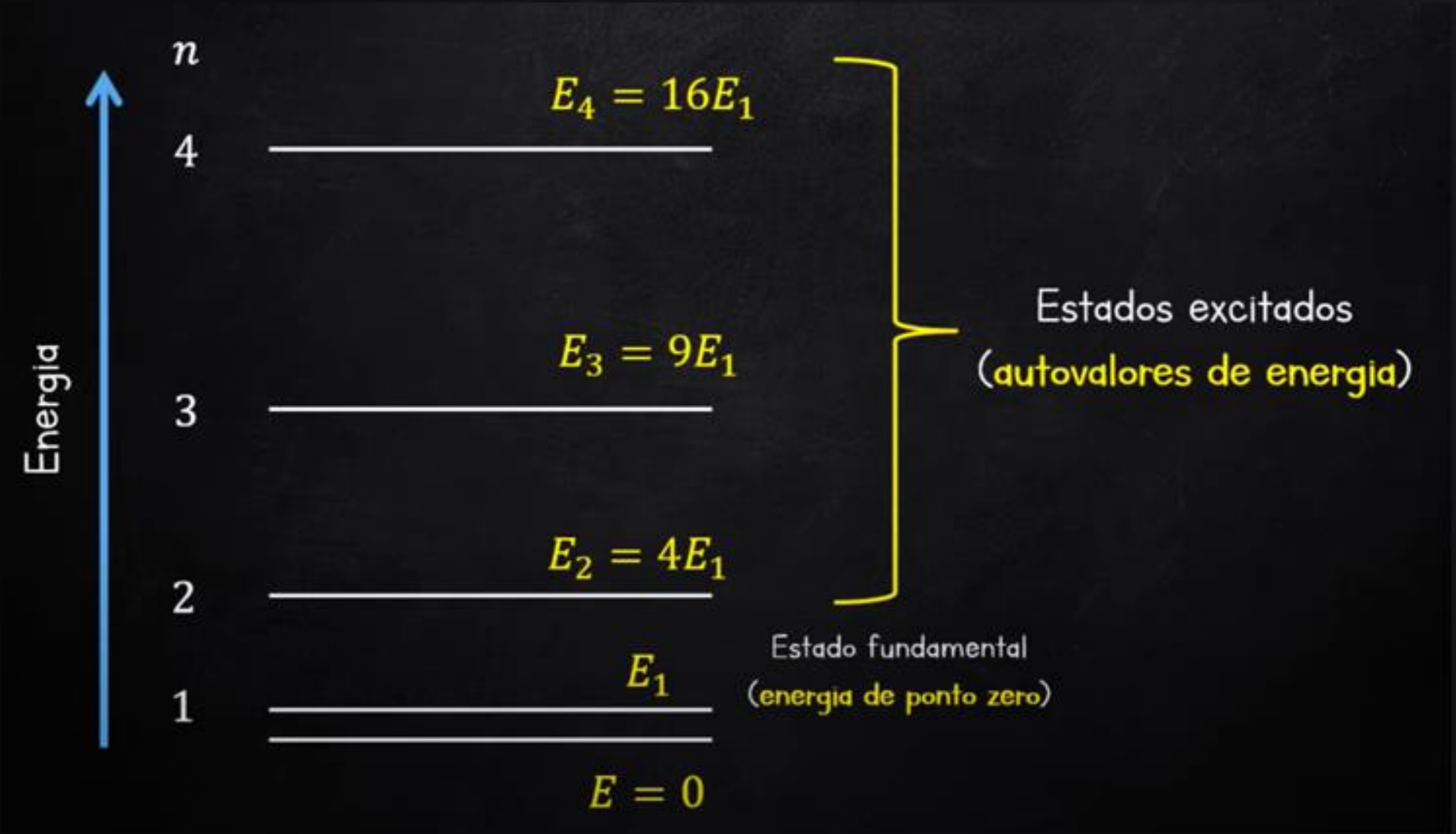


$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_n^2}$$

$$\lambda_n = \frac{2L}{n} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\boxed{E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = n^2 E_1} \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

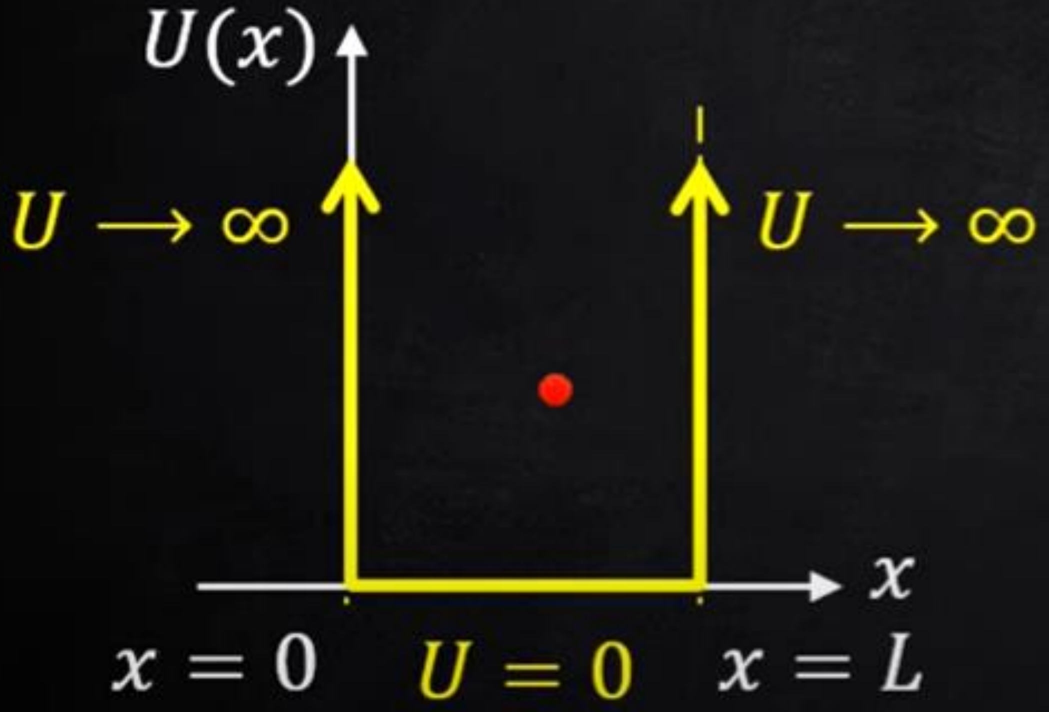
$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$



Energia
n
4
$E_4 = 16E_1$
3
$E_3 = 9E_1$
2
$E_2 = 4E_1$
1
E_1
$E = 0$
Estados excitados
(autovalores de energia)
Estado fundamental
(energia de ponto zero)

Poço Quadrado Infinito
(Parte 2)

Função de Onda e Probabilidade

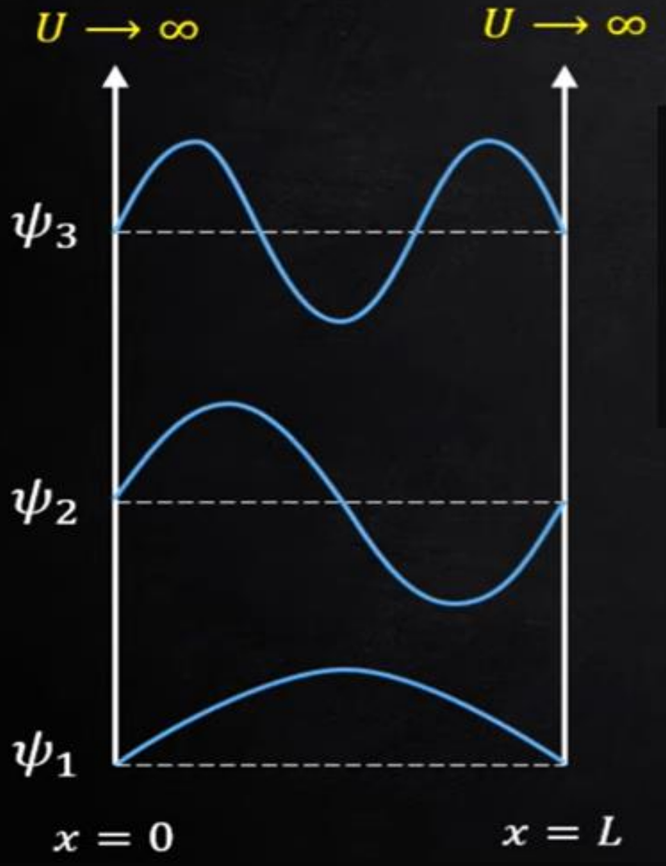


$$\psi_n(x) = A \operatorname{sen} k_n x$$

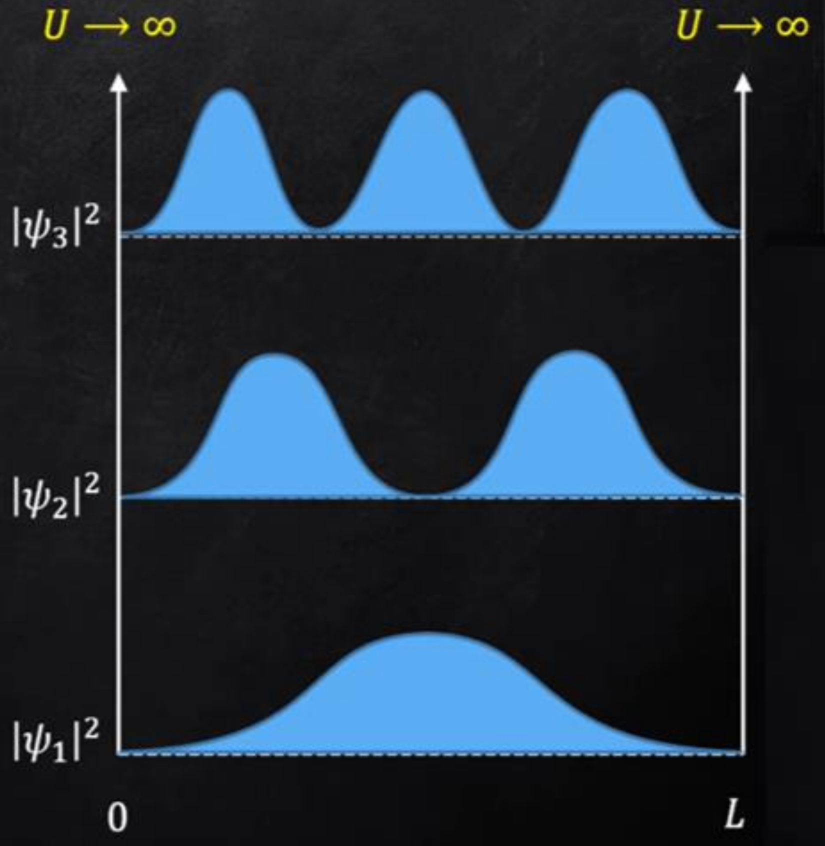
$$\psi_n(x) = A \operatorname{sen}\left(\frac{n\,\pi\,x}{L}\right)$$

Para $0 < x < L$, e $n = 1, 2, 3, \ldots$

Poço Quadrado Infinito



Como a partícula se desloca de um lugar para outro?



Poço Quadrado Infinito

Normalização da função de onda

$$\psi_n(x) = A \,\mathrm{sen}\left(\frac{n\,\pi\,x}{L}\right)$$

?

Para $0 < x < L$, e $n = 1, 2, 3, \ldots$

O valor de A tem que ser tal, que a soma de todas as probabilidades seja igual a unidade.

$$\psi_n(x) = A \,\mathrm{sen}\left(\frac{n\,\pi\,x}{L}\right)$$

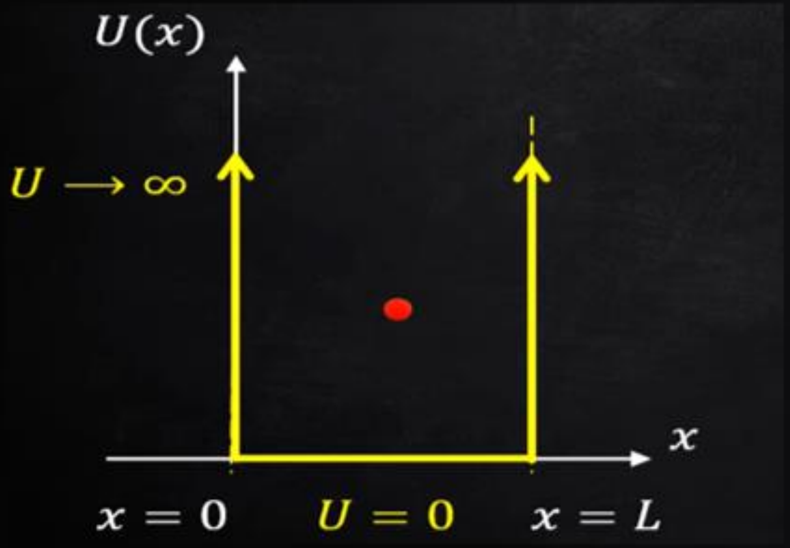
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2\, dx = A^2 \int_0^L \mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1$$

Utilizando a identidade trigonométrica: $2\,\mathrm{sen}^2\theta = 1 - \cos 2\theta$

$$A^2 \int_0^L \mathrm{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{A^2}{2} \int_0^L \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right] dx = 1$$

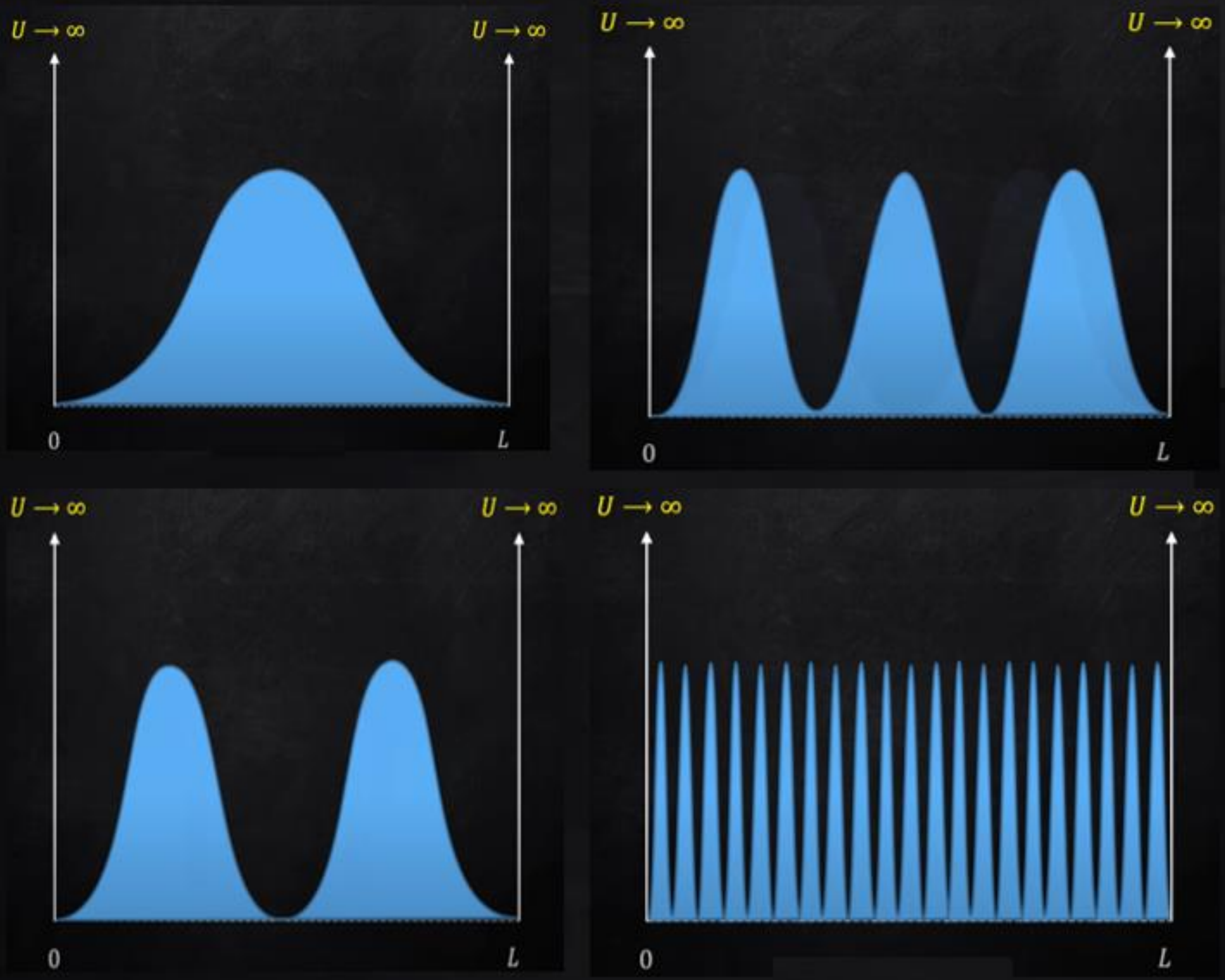
$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Poço Quadrado Infinito

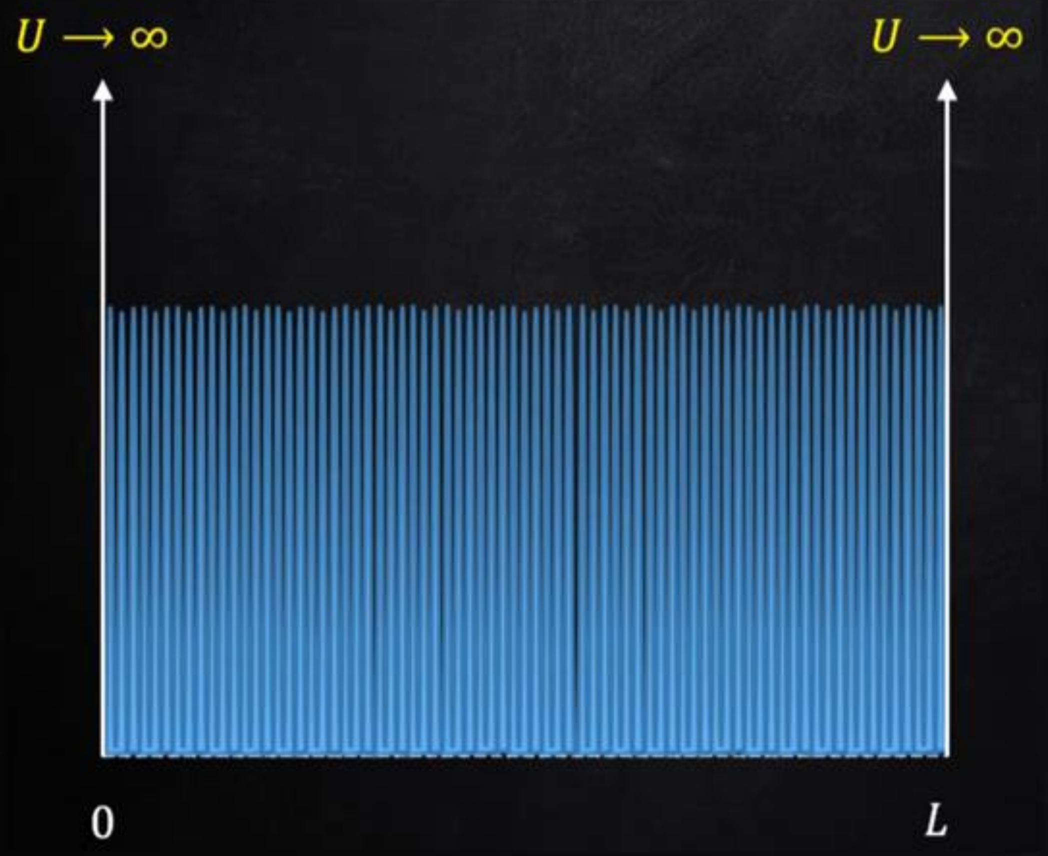


$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Para $0 < x < L$, e $n = 1, 2, 3, \ldots$



Poço Quadrado Infinito



Princípio da correspondência:

A Física Quântica deve coincidir com a Física Clássica no limite no qual os números quânticos que especificam o estado do sistema, se tornam muito grandes (números quânticos $\longrightarrow \infty$).

EXERCICIO – 1

O comprimento de onda da luz emitida por um laser de rubi é 694,3 nm. Se a emissão de um fóton com este comprimento de onda estivesse associada à transição de um elétron do nível $n = 2$ para o nível $n = 1$ de um poço quadrado infinito, qual seria a largura L do poço?

$$\lambda = 694{,}3 \times 10^{-9}\,m = 6{,}94 \times 10^{-7}\,m$$

$$n_i = 2 \Rightarrow n_f = 1$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \Rightarrow \Delta E_n = E_2 - E_1$$

$$\Delta E_n = \frac{h^2 (2)^2}{8mL^2} - \frac{h^2 (1)^2}{8mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2}(4-1)$$

$$\Delta E_n = \frac{3h^2}{8mL^2}$$

$$\Delta E_n = hf = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \frac{3h^2}{8mL^2} = \frac{hc}{\lambda}$$

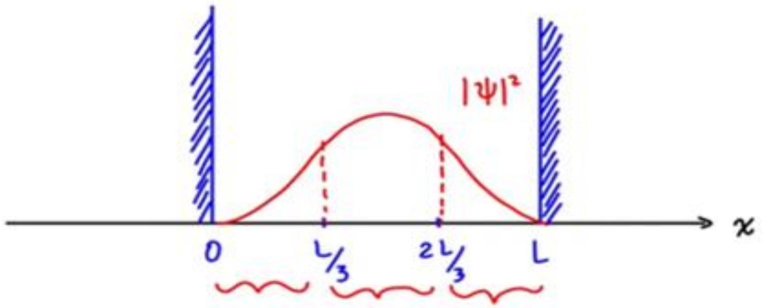
$$L^2 = \frac{3h^{\cancel{2}}\lambda}{8m\cancel{h}c} = \frac{3h\lambda}{8mc} \Rightarrow L = \sqrt{\frac{3h\lambda}{8mc}}$$

$$L = \sqrt{\frac{3 \times 6{,}63 \times 10^{-34}\,J.s \times 6{,}94 \times 10^{-7}\,m}{8 \times 9{,}1 \times 10^{-31}\,Kg \times 3 \times 10^{8}\,m/s}} \Rightarrow \boxed{L \approx 0{,}795\,nm}$$

$$L = \sqrt{6{,}32 \times 10^{-19}\,\frac{\cancel{Kg}\,m^2/\cancel{s^2} \cdot \cancel{m} \cdot \cancel{s}}{\cancel{Kg} \cdot \cancel{m}/\cancel{s}}}$$

EXERCICIO – 2

Uma partícula está presa em um poço unidimensional infinito de largura L. Se a partícula está em seu estado fundamental, avalie a probabilidade de encontrar a partícula (a) entre $x = 0$ e $x = L/3$; (b) entre $x = L/3$ e $x = 2L/3$; (c) entre $x = 2L/3$ e $x = L$.



$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\ \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

a) $n = 1, \ 0 < x < \frac{L}{3}$:

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{L}}\ \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right) \Rightarrow P = \int_0^{L/3} |\psi_1|^2 dx$$

$$P = \int_0^{L/3} \left(\frac{2}{L}\right) \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L}\int_0^{L/3} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

$$\text{Sen}^2(x) = \frac{1}{2}\left[1 - \cos(2x)\right]$$

$$\text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) = \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right]$$

$$P = \frac{\cancel{2}}{L}\int_0^{L/3} \frac{1}{\cancel{2}}\left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right] dx$$

$$P = \frac{1}{L}\left[\int_0^{L/3} dx - \int_0^{L/3} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx\right]$$

$$P = \frac{1}{L}\left[\int_0^{L/3} dx - \int_0^{L/3} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx\right]$$

$$P = \frac{1}{L}\left[\left(\frac{L}{3}\right) - \frac{L}{2\pi}\ \text{sen}\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\Big|_0^{L/3}\right]$$

EXERCICIO – 2

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left[\operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{\cancel{L}}\cdot\frac{\cancel{L}}{3}\right) - \cancel{\operatorname{sen}(0)}^{\,0}\right]$$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \Rightarrow \boxed{P \approx 0{,}195 \text{ ou } 19{,}5\%}$$

b) $n = 1$, $\frac{L}{3} \leq x \leq \frac{2L}{3}$:

$$P = \frac{2}{L}\int_{L/3}^{2L/3} \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)dx = \frac{1}{L}\left[\int_{L/3}^{2L/3} dx - \int_{L/3}^{2L/3}\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)dx\right]$$

$$P = \frac{1}{L}\left[\left(\frac{2L}{3} - \frac{L}{3}\right) - \frac{L}{2\pi}\operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\Bigg|_{L/3}^{2L/3}\right]$$

$$P = \frac{1}{L}\left\{\frac{L}{3} - \frac{L}{2\pi}\left[\operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{L}\cdot\frac{2L}{3}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{L}\cdot\frac{L}{3}\right)\right]\right\}$$

$$P = \frac{1}{\cancel{L}}\left\{\frac{\cancel{L}}{3} - \frac{\cancel{L}}{2\pi}\left[\operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{\cancel{L}}\cdot\frac{2\cancel{L}}{3}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{\cancel{L}}\cdot\frac{\cancel{L}}{3}\right)\right]\right\}$$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left[\operatorname{sen}\left(\frac{4\pi}{3}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{3}\right)\right]$$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left[-\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}\right] = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \approx 0{,}61$$

$$\boxed{P \approx 0{,}61 \text{ ou } 61\%}$$

EXERCICIO – 2

b) $n = 1$, $\frac{2L}{3} \leq x < L$:

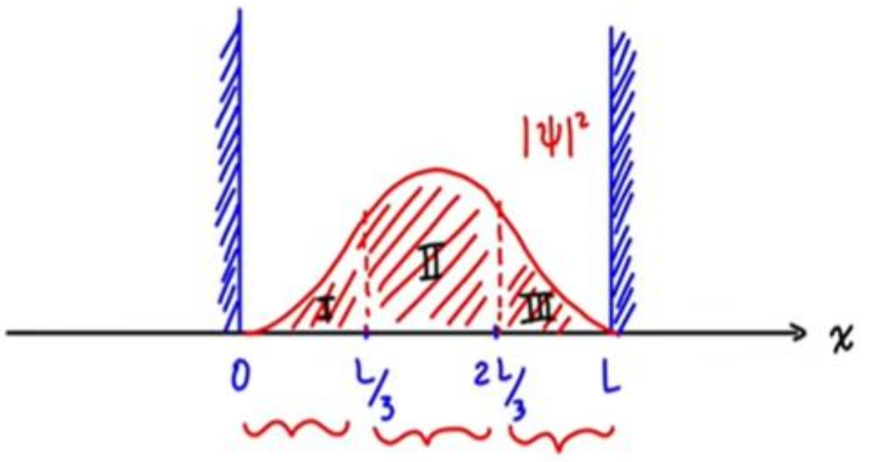
$$P = \frac{2}{L}\int_{2L/3}^{L} \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)dx = \frac{1}{L}\left[\int_{2L/3}^{L} dx - \int_{2L/3}^{L}\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)dx\right]$$

$$P = \frac{1}{\cancel{L}}\left[\left(\cancel{L} - \frac{2\cancel{L}}{3}\right) - \frac{\cancel{L}}{2\pi}\,\text{sen}\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\Big|_{2L/3}^{L}\right]$$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left[\cancelto{0}{\text{sen}\left(\frac{2\pi}{\cancel{L}}\cdot\cancel{L}\right)} - \text{sen}\left(\frac{2\pi}{\cancel{L}}\cdot\frac{2\cancel{L}}{3}\right)\right]$$

$$P = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left[-\text{sen}\left(\frac{4\pi}{3}\right)\right] = \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left[\frac{\sqrt{3}}{2}\right]$$

$$\boxed{P \approx 0{,}195 \text{ ou } 19{,}5\%}$$



$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Referências Bibliográficas

[1] – EISBERG, ROBERT e RESINICK, ROBEST, Física Quântica; editora Elsevier, 35ºed., Rio de Janeiro, 1979. p,275.

[2] - TIPLER, P. A., MOSCA. G. Física para cientistas e engenheiros; editora LTC, 5ºed., Rio de Janeiro, 2006. P,38.