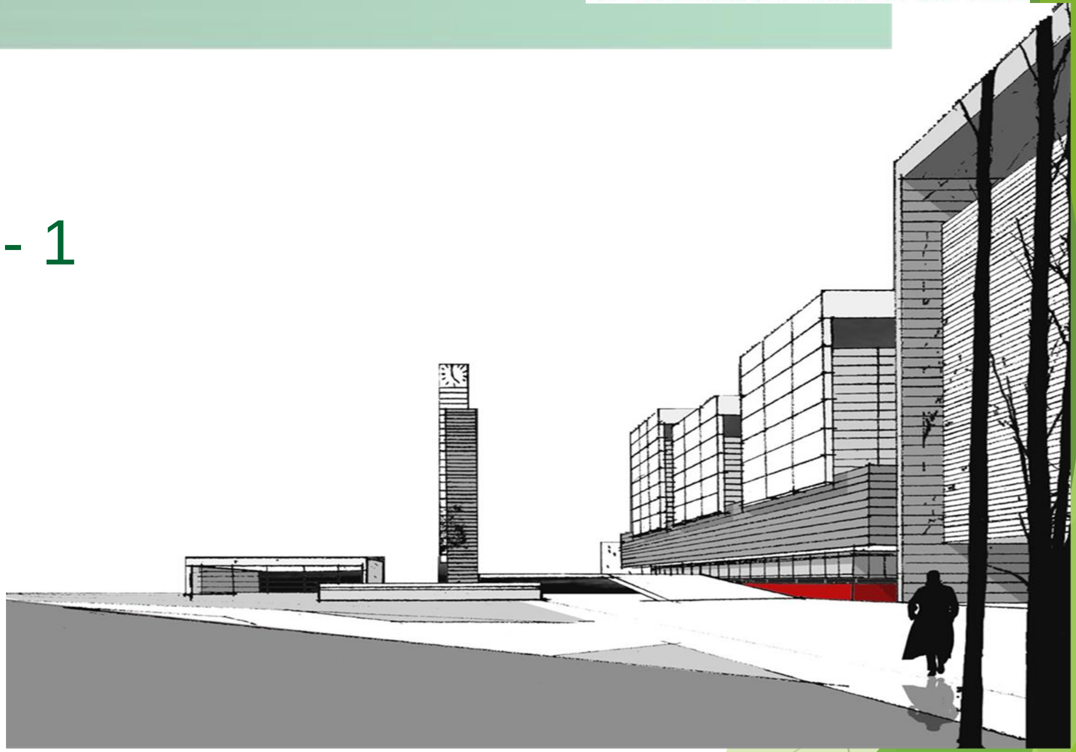
Universidade Federal do ABC (UFABC)

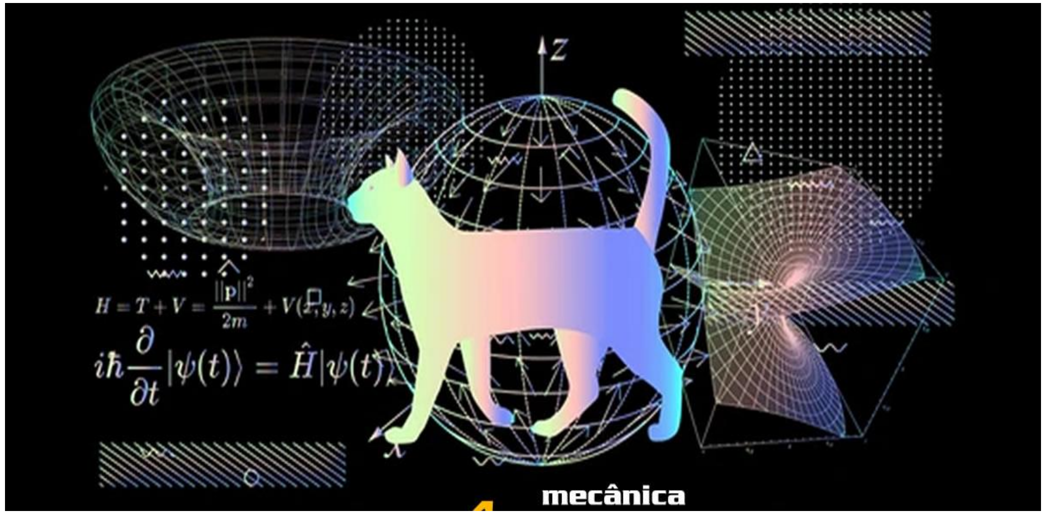
Universidade Federal do ABC



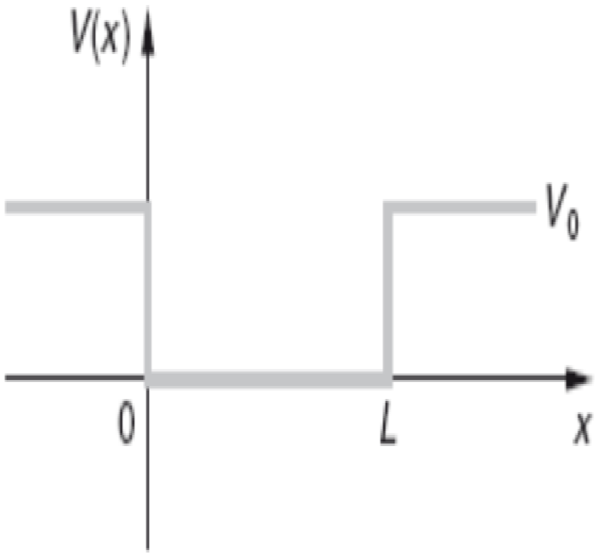
Mecânica Quântica 2024 - 1

Poço Quadrado finito

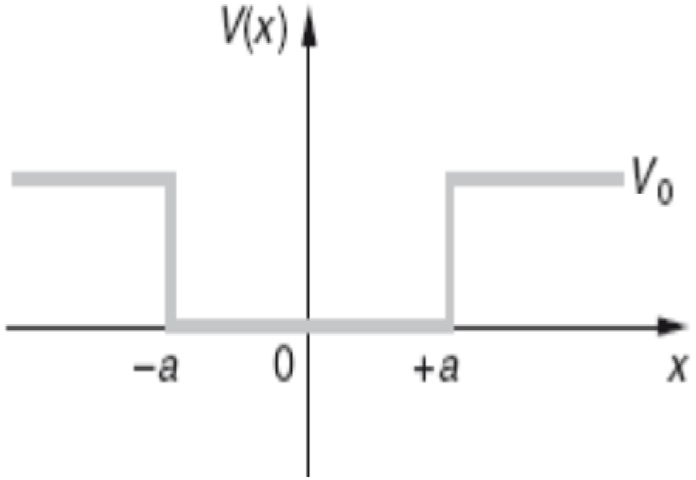
Adalberto Oliveira



- Potencial de um poço quadrado finito.



- O mesmo potencial, com a origem dos eixos coordenados no centro do poço.



$$V(x)=\begin{cases} -V_0 & \text{para } -a \le x \le a, \\ 0, & \text{para } |x| > a, \end{cases}$$

Na região $x < -a$, o potencial é zero, e, portanto, a equação de Schrödinger diz que

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

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \qquad [2.146]$$

é real e positiva. A solução geral é $\psi(x) = A\exp(-kx) + B\exp(kx)$, mas o primeiro termo diverge (conforme $x \to -\infty$), assim a solução fisicamente admissível (isso já aconteceu antes; veja a Equação 2.119) é

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad \text{para } x < -a. \qquad [2.147]$$

Na região $-a < x < a$, $V(x) = -V_0$, e a equação de Schrödinger diz que

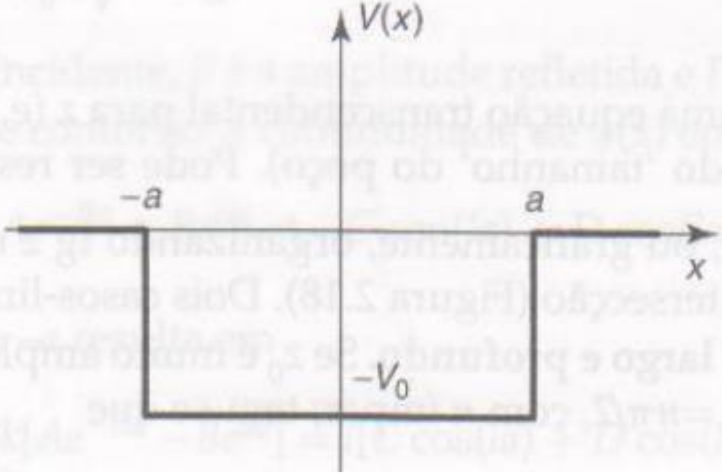
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi, \quad \text{ou} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi,$$

na qual

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}. \qquad [2.148]$$

Embora E seja negativa, para os estados ligados, ela deve ser maior do que $-V_0$ pelo antigo teorema $E > V_{min}$ (Problema 2.2); assim, l é, também, real e positivo. A solução geral é[39]

$$\psi(x) = C\,\mathrm{sen}(lx) + D\cos(lx), \quad \text{para } -a < x < a, \tag{2.149}$$



A solução geral envolve senos e cossenos (Equação 6-28). No caso que estamos estudando, não é necessário que $\psi(x)$ seja nula nos limites da região central, como no caso do poço infinito, mas apenas que $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ sejam contínuas nesses pontos. Do lado de fora do poço, isto é, para $0 > x > L$, a Equação 6-18 se torna

$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) - \alpha^2\psi(x) \qquad \textbf{6-33}$$

em que

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \qquad \textbf{6-34}$$

A quantização da energia que encontramos para uma partícula em um poço quadrado infinito é um resultado geral associado à solução da equação de Schrödinger para qualquer partícula confinada em uma região do espaço.

No interior do poço, $V(x) = 0$ e a equação de Schrödinger independente do tempo (Equação 6-18) se reduz à Equação mesma de um poço infinito:

$$\psi''(x) = -k^2\psi(x) \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

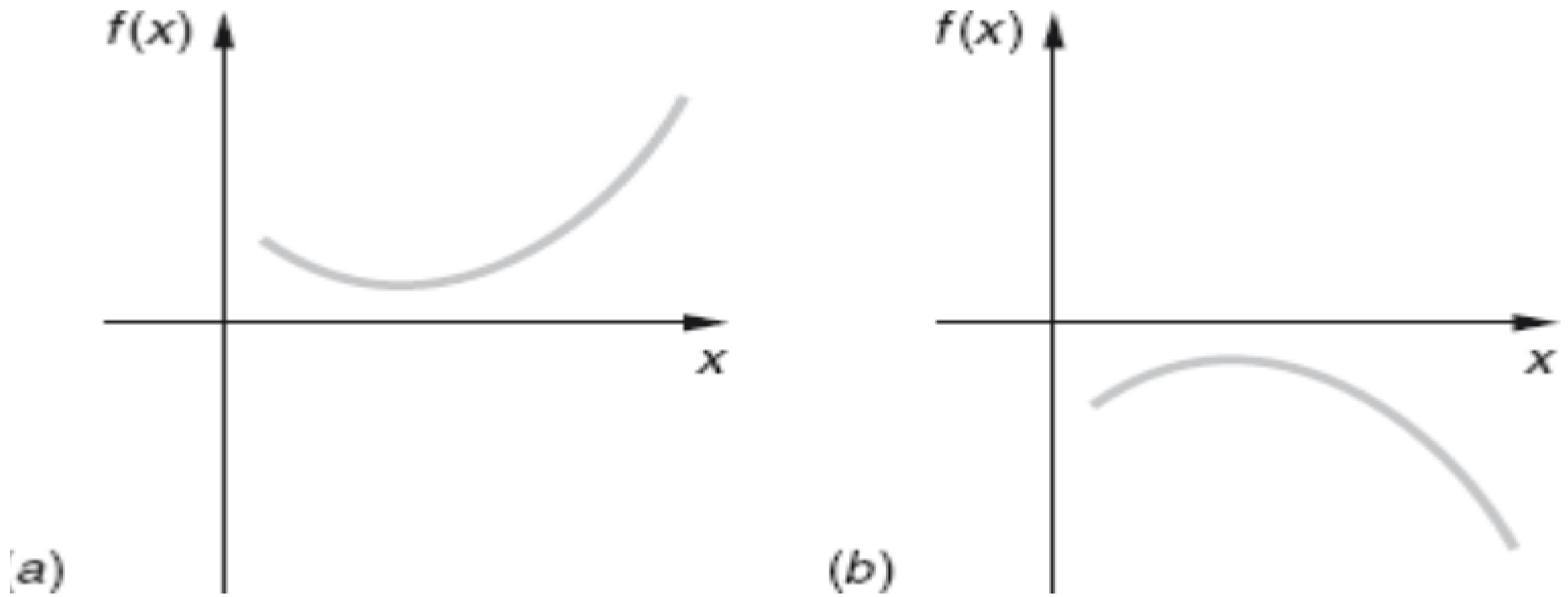
No caso que estamos estudando, não é necessário que ψ(x) seja nula nos limites da região central, como no caso do poço infinito, mas apenas que ψ(x) e ψ′(x) sejam contínuas nesses pontos. Do lado de fora do poço, isto é, para 0 > x > L.

$$\psi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) - \alpha^2\psi(x)$$

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0$$

Este comportamento é diferente do observado no interior do poço, ou seja, na região $0 < x < L$. Nessa região, ψ e ψ'' têm sinais opostos e, portanto, ψ sempre se aproxima do eixo dos x.

Funções desse tipo, embora satisfaçam a equação de Schrödinger, não são funções de onda apropriadas porque não podem ser normalizadas.



Referências

Griffiths David J. Mecânica Quântica 2a ed Edição | Física.

Novaes, Marcel, Nelson, Studart. Mecânica quântica básica / São Paulo: Editora Livraria da Física, 2016. – (Série MNPEF)

Paul A., Tipler, 1933- Física moderna A. Llewellyn; tradução e revisão técnica Ronaldo Sérgio de Biasi. – 6°. ed. - [Reimpr.]- Rio de Janeiro : LTC, 2017.