Poço quadrado finito

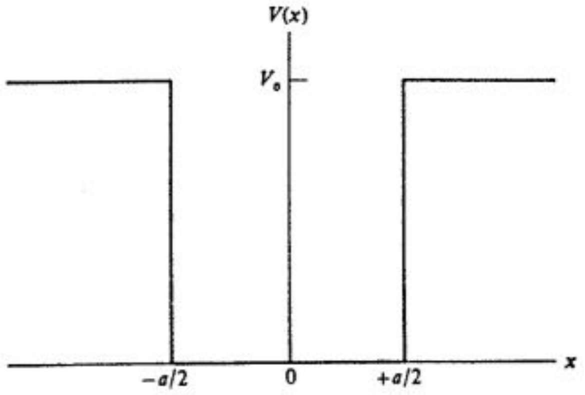
Luciana Aparecida da Silva Gomes

PEF 103 - MECÂNICA QUÂNTICA

2024

O poço de potencìal quadrado finito ou poço de potencial quadrado,   é freqüenlemcnte 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, ele contém a característica básica, de limitar a partícula â uma região de um certo tamanho.

,



A ilustração acima indica a origem de seu nome. Se uma partícula tem energia total E maior Vo, então segundo a **mecânica clássica** ela pode estar somente na região -a/2 x 1+dl2 (dentro do poço). A partÍcula está limitada a esta região e oscila entre os extremos da região com momento de módulo constante mas com sentidos alternados. Além disso, qualquer valor"' E > O para a energia total é possível. No entanto, segundo a mecânica quântica apenas certos valores da energia total separados discretamente são possíveis

Vamos iniciar nosso tratamento considerando, qualitativamente, a forma das autofunções são soluções da equação de Schroedinger independente do tempo para o poço de potencial quadrado de (6.58).

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \text{ ou } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases}$$

Como nas seções anteriores, o problema se decompõe em três regiões: 1-a/2 (à esquerda do poço), -a/2 1x 1+a/2 (dentro do poço) e x) *a12 (à direita do A chamada solução geral da equação na região dentro do poço é:

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad \text{onde} \qquad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad -a/2 < x < +a/2 \qquad (6\text{-}59)$$

0 primeiro termo descreve ondas se propagando no sentido x crescente, e o segundo,ondas propagando no sentido de x decrescente. A descrição clássica da partícula oscilando dentro do poço sugere que a auto função nesta região deve corresponder a uma mistura igual de ondas se movendo nos dois sentidos. As duas ondas de mesma amplitude se propagando em sentidos opostos vão se combinar, formando uma onda estacioná¡ia. Podemos obter este comportamento igualando as duas constantes arbitrárias, de forma que A = B. Isto dá:

$$\psi(x) = B(e^{ik_1x} + e^{-ik_1x})$$

que podemos escrever como:

$$\psi(x) = B' \frac{e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}}{2}$$

onde B' é uma nova constante arbitrária, defînida pela relação B' = 2B. Mas esta combinação de exponenciais complexas nos dá simplesmente:

$$\psi(x) = B' \cos k_1 x \quad \text{onde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{6-60}$$

Esta autofunção descreve uma onda estacionária, já que uma inspeção na função de onda associada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ mostra que ela tem nós em posições fîxas, onde cos k¡x = 0. Podemos obter tåmbém uma onda estacionária fazendo -A = B 'isto dá

$$\psi(x) = A(e^{ik_1 x} - e^{-ik_1 x})$$

que podemos escrever como:

$$\psi(x) = A' \frac{e^{ik_1 x} - e^{-ik_1 x}}{2i}$$

Onde A’ é uma nova constante arbitrária, definida por definida por: A’ = 2iA. Mas isso é exatamente:

$$\psi(x) = A' \operatorname{sen} k_1 x \qquad \text{onde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (6\text{-}61)$$

como tanto (6-60) quanto (6-61) especificam soluções da equação de Schroedinger independente do tempo para o mesmo valor de E, e como a equação diferencial é linear em $\psi(x)$, sua soma:

$$\psi(x) = A' \operatorname{sen} k_1 x + B' \cos k_1 x \qquad \text{onde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad -a/2 < x < +a/2 \qquad (6\text{-}62)$$

Pode-se também usar uma solução, por substituição direta. Na verdade, esta é uma solução geral da equação diferencial para a região dentro do Poço, porque ela contém duas constantes arbitrárias - é tão geral quanto a solução (6-59). Matematicamente, as duas são completamente equivalentes. No entanto, é mais conveniente utilizar (6-62) em problemas que envolvem o movimento de partículas ligadas. Fisicamente podemos pensar em (6-62) como descrevendo uma situação na qual uma partÍcula se move de forma tal que se conhece precisamente o módulo de seu momento $p = \hbar k_1 = \sqrt{2mE}$ entido pode ser tanto o de x crescente quanto o de x decrescente.

$$\psi(x) = Ce^{k_{II}x} + De^{-\kappa_{II}x} \qquad \text{onde} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \qquad x < -a/2 \quad (6\text{-}63)$$

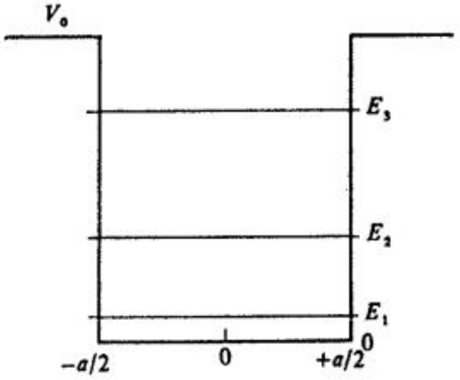
e

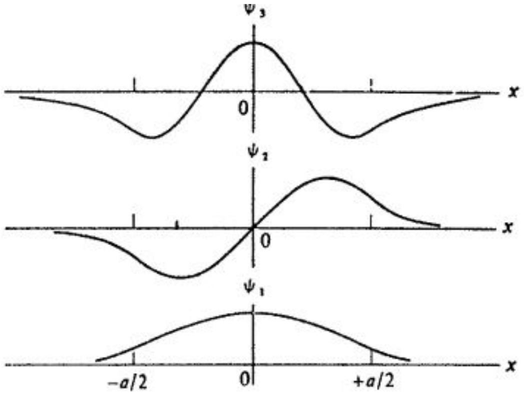
$$\psi(x) = Fe^{k_{II}x} + Ge^{-k_{II}x} \qquad \text{onde} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \qquad x > +a/2 \quad (6\text{-}64)$$

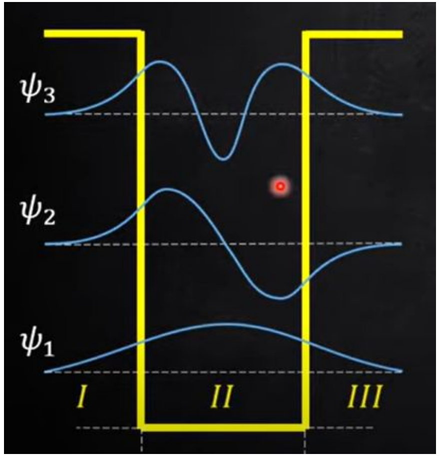
As duas formas de Psi(x) descrevem ondas estacionárias na região fora do poço, já que na função de onda associada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ as dependências em x e t ocorrem como fatores separados. Esta ondas estacionária não têm nós, mas elas serão ajustadas às ondas estacionárias dentro do poço, que têm nós.

Pode-se obter autofunções válidas para todos os x unindo ås formas consideradas, em cada uma das três regiões de x, para soluções gerais da equação de Schroedinger independente do tempo. Estas três formas envolvem seis constantes arbitrárias: A', B', C, D, F e G. Mas como uma autofunção aceitável deve se manter sempre finita, podemos ver imediatamente que devemos fazer D=0 e F=0. Se isto não fosse feito, a segunda exponencial em (6-63) faria Psi(x) indo para o infinito e x - infinito , e a primeira exponencial em (6-64) faria(x) indo para o infinito e x + infinito .Mais quatro equações podem ser obtidas exigindo-se que $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ sejam contínuas nos dois limites entre as regiões, **x = -a/2 e x = +a/2**, como é necessário para que a auto função seja aceitável, (Elas já são unívocas)

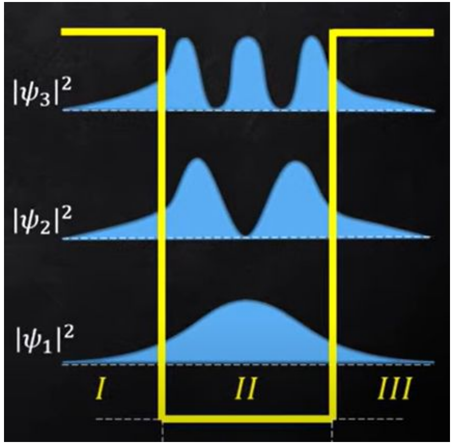
Mas não podemos permitir que todas as quatro constantes arbitrárias que sobram sejam especificadas por estas quatro equações. Uma delas deve se manter não especificada, de forma tal que amplitude da autofunção possa ser arbitrária. Exige-se que a amplitude seja arbitrária porque a equação diferencial é linear em relação à auto função Psi(x). Assim, parece haver uma discrepância entre o número de equações que devem ser satisfeitas e o número de constantes que podem ser ajustadas, mas isto é resolvido considerando-se a energia total E. mo uma constante adicional que pode ser ajustada, se necessário. Veremos que Esse procedimento funciona, mas apenas para certos valores de E. Isto é, vai surgir um certo conjunto de valores possíveis da energia total E, e assim a energia total será quantizada, com um conjunto de auto-valores. s. Apenas para estes valores da energia total é que a equação de Schroedinger tem soluções aceitáveis.







Funções de onda



Densidades de probabilidade

Referencias:

FÍSICA QUANTICA Atomos, Moléculâs, Sólidos, Núcleos e Partículas ROBERT EISBERG e ROBERT RESNICK

https://www.youtube.com/watch?v=TpAyJIdNeXE