

Poço quadrado 1D finito

Thaís Victa Trevisan – thaistre@ifi.unicamp.br

Nesse exercício, estudaremos os estados estacionários de uma partícula de massa m e energia E num poço de potencial quadrado finito unidimensional de largura $2a$ e profundidade V_0 . Isto é,

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{se } -a \leq x \leq a \\ 0, & \text{se } x > a \text{ ou } x < -a \end{cases}.$$

Analisaremos duas situações distintas: (a) o caso $E > 0$, onde há um contínuo de estados e (b) a situação em que $-V_0 < E < 0$, onde temos estados ligados, com energias quantizadas.

Notação:

- “Região I”: região correspondente a $x < -a$. Denotaremos a função de onda da partícula nessa região por $\psi_I(x)$;
- “Região II”: região correspondente a $-a \leq x \leq a$. Denotaremos a função de onda da partícula nessa região por $\psi_{II}(x)$;
- “Região III”: região correspondente a $x > a$. Denotaremos a função de onda da partícula nessa região por $\psi_{III}(x)$;

1 PRIMEIRO CASO: $E > 0$

Nas regiões I e III, $V(x) = 0$ e a equação de Schrödinger independente do tempo é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x). \quad (1.1)$$

Ambas as funções $e^{i\rho x}$ e $e^{-i\rho x}$, com

$$\rho = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (1.2)$$

satisfazem (1.1), de modo que as soluções são combinações lineares de $e^{i\rho x}$ (que representa uma onda plana propagando da esquerda para a direita) e $e^{-i\rho x}$ (que representa uma onda plana propagando da direita para a esquerda):

$$\psi_I(x) = A_1 e^{i\rho x} + B_1 e^{-i\rho x} \quad (1.3)$$

e

$$\psi_{III}(x) = A_3 e^{i\rho x} + B_3 e^{-i\rho x}. \quad (1.4)$$

É importante notar que, uma vez escolhido que a partícula desloca-se da esquerda para a direita¹ o primeiro termo do lado direito da equação (1.3) representa a onda incidente no poço, enquanto que o segundo termo representa a componente refletida pelo poço. Já em (1.3), o primeiro termo do lado direito da equação nos dá a onda transmitida pelo poço e, assumindo que a partícula não sofre mais nenhuma reflexão nessa última região, devemos ter $B_3 = 0$.

Já na região II , $V(x) = -V_0$ e a equação de Schrödinger independente do tempo fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = E \psi(x). \quad (1.5)$$

Nesse caso, a solução é dada por

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{i\tilde{\rho}x} + B_2 e^{-i\tilde{\rho}x}, \quad (1.6)$$

onde

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}. \quad (1.7)$$

Juntando as equações (1.3), (1.4) e (1.6) encontramos a forma geral da função de onda de uma partícula com $E > 0$ num poço quadrado finito:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{i\rho x} + B_1 e^{-i\rho x}, & \text{se } x \leq -a \\ A_2 e^{i\tilde{\rho}x} + B_2 e^{-i\tilde{\rho}x}, & \text{se } -a \leq x \leq a \\ A_3 e^{i\rho x}, & \text{se } x \geq a \end{cases}. \quad (1.8)$$

Para determinarmos os coeficientes A_1 a B_3 de (1.8), precisamos usar as condições de continuidade da função de onda e sua primeira derivada: $\psi(x)$ é uma função contínua e bem comportada (não diverge) em todo o espaço, logo ela deve ser contínua em $x = a$ e em $x = -a$:

- em $x = a$:

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow A_2 e^{i\tilde{\rho}a} + B_2 e^{-i\tilde{\rho}a} = A_3 e^{i\rho a}; \quad (1.9)$$

- em $x = -a$:

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \Rightarrow A_1 e^{-i\rho a} + B_1 e^{i\rho a} = A_2 e^{-i\tilde{\rho}a} + B_2 e^{i\tilde{\rho}a}. \quad (1.10)$$

Do mesmo modo, para a primeira derivada de $\psi(x)$:

- em $x = a$:

$$\left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{III}(x)}{dx} \right|_{x=a} \Rightarrow A_2 e^{i\tilde{\rho}a} - B_2 e^{-i\tilde{\rho}a} = \frac{\rho}{\tilde{\rho}} A_3 e^{i\rho a}; \quad (1.11)$$

- em $x = -a$:

$$\left. \frac{d\psi_I(x)}{dx} \right|_{x=-a} = \left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=-a} \Rightarrow A_1 e^{-i\rho a} - B_1 e^{i\rho a} = \frac{\tilde{\rho}}{\rho} [A_2 e^{-i\tilde{\rho}a} - B_2 e^{i\tilde{\rho}a}]. \quad (1.12)$$

As equações (1.9), (1.10), (1.11) e (1.12) definem um sistema de equações, cuja solução pode ser facilmente encontrada após um pouco de álgebra:

$$A_1 = A_2 \frac{e^{i(\tilde{\rho}-\rho)a}}{2\rho(\tilde{\rho}+\rho)} [4\tilde{\rho}\rho \cos(2\tilde{\rho}a) - 2i(\tilde{\rho}^2 + \rho^2) \sin(2\tilde{\rho}a)], \quad (1.13)$$

¹Alternativamente, poderíamos escolher uma partícula incidente que se mova da direita para a esquerda. Os passos que seguem seriam análogos, mas nesse caso, teríamos $A_1 = 0$ ao invés de $B_3 = 0$.

$$B_1 = iA_2 e^{i(\tilde{\rho}-\rho)a} \sin(2\tilde{\rho}a) \left(\frac{\tilde{\rho}-\rho}{\rho} \right), \quad (1.14)$$

$$B_2 = A_2 e^{2i\tilde{\rho}a} \left(\frac{\tilde{\rho}-\rho}{\tilde{\rho}+\rho} \right) e \quad (1.15)$$

$$A_3 = A_2 e^{i(\tilde{\rho}-\rho)a} \left(\frac{2\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}+\rho} \right). \quad (1.16)$$

Uma vez encontrados os coeficientes (1.13) a (1.16), podemos calcular os coeficientes de reflexão e transmissão do poço, os quais estão relacionados, respectivamente, com as probabilidades da partícula, vindo de $x \rightarrow -\infty$, ser refletida pelo poço ou atravessá-lo.

1.1 COEFICIENTE DE TRANSMISSÃO (T)

O coeficiente de transmissão é dado

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 \quad (1.17)$$

e levando (1.13) e (1.16) em (1.17), obtemos

$$T = \frac{4\tilde{\rho}^2 \rho^2}{4\tilde{\rho}^2 \rho^2 + (\tilde{\rho}^2 - \rho^2)^2 \sin^2(2\tilde{\rho}a)}. \quad (1.18)$$

1.2 COEFICIENTE DE REFLEXÃO (R)

O coeficiente de reflexão é dado por

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 \quad (1.19)$$

e levando (1.13) e (1.14) em (1.19), obtemos

$$R = \frac{(\tilde{\rho}^2 - \rho^2)^2 \sin^2(2\tilde{\rho}a)}{4\tilde{\rho}^2 \rho^2 + (\tilde{\rho}^2 - \rho^2)^2 \sin^2(2\tilde{\rho}a)}. \quad (1.20)$$

Note que $R + T = 1$, conforme esperado.

2 SEGUNDO CASO: $-V_0 < E < 0$

Vamos agora supor que a energia da partícula é negativa, $E = -|E|$, com $0 < |E| < V_0$. Nesse caso, aparecerão estados nos quais a partícula encontra-se aprisionada no poço, os *estados ligados*. Veremos que os níveis de energia dos estados ligados são quantizados. Os passos para o cálculo da função de onda da partícula nesse caso são análogos àqueles mostrados na seção anterior, de modo que não serão esmiuçados novamente aqui.

Resolvendo a equação de Schrödinger em cada uma das três regiões (regiões *I*, *II* e *III*) do potencial, encontramos a seguinte forma geral para os estados estacionários com $-V_0 < E < 0$:

$$\varphi(x) = \begin{cases} C_1 e^{kx} + D_1 e^{-kx}, & \text{se } x \leq -a \\ C_2 e^{i\tilde{k}x} + D_2 e^{-i\tilde{k}x}, & \text{se } -a \leq x \leq a, \\ C_3 e^{kx} + D_3 e^{-kx}, & \text{se } x \geq a \end{cases}$$

com

$$k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad (2.1)$$

$$\tilde{k} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}} \quad (2.2)$$

e C_1, C_2, C_3, D_1, D_2 e D_3 , constantes a serem determinadas. Como a função de onda não pode divergir nos limites $x \rightarrow \infty$ e $x \rightarrow -\infty$, devemos ter, **necessariamente** $D_1 = 0$ e $C_3 = 0$. Portanto,

$$\varphi(x) = \begin{cases} C_1 e^{kx} \equiv \varphi_I(x), & \text{se } x \leq -a \\ C_2 e^{i\tilde{k}x} + D_2 e^{-i\tilde{k}x} \equiv \varphi_{II}(x), & \text{se } -a \leq x \leq a. \\ D_3 e^{-kx} \equiv \varphi_{III}(x), & \text{se } x \geq a \end{cases} \quad (2.3)$$

Das condições de continuidade de $\varphi(x)$ e sua primeira derivada $\frac{d\varphi(x)}{dx}$ tanto em $x = a$ quanto em $x = -a$, encontramos o seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} C_1 e^{-ka} = C_2 e^{-i\tilde{k}a} + D_2 e^{i\tilde{k}a} \\ C_2 e^{i\tilde{k}a} + D_2 e^{-i\tilde{k}a} = D_3 e^{-ka} \\ C_1 e^{-ka} = \frac{i\tilde{k}}{k} [C_2 e^{-i\tilde{k}a} - D_2 e^{i\tilde{k}a}] \\ C_2 e^{i\tilde{k}a} - D_2 e^{-i\tilde{k}a} = \frac{i\tilde{k}}{k} D_3 e^{-ka} \end{cases},$$

cuja solução nos dá

$$C_1 = C_2 e^{(k-i\tilde{k})a} \left(\frac{2i\tilde{k}}{k+i\tilde{k}} \right), \quad (2.4)$$

$$D_2 = -C_2 e^{2i\tilde{k}a} \left(\frac{k+i\tilde{k}}{k-i\tilde{k}} \right) = -C_2 e^{-2i\tilde{k}a} \left(\frac{k-i\tilde{k}}{k+i\tilde{k}} \right), \quad (2.5)$$

$$D_3 = -C_2 e^{(k+i\tilde{k})a} \left(\frac{2i\tilde{k}}{k-i\tilde{k}} \right) \quad (2.6)$$

e, como podemos concluir por (2.5), uma equação transcendental que relaciona k e \tilde{k} :

$$e^{4i\tilde{k}a} = \left(\frac{k-i\tilde{k}}{k+i\tilde{k}} \right)^2 \Rightarrow e^{2i\tilde{k}a} = \pm \left(\frac{k-i\tilde{k}}{k+i\tilde{k}} \right). \quad (2.7)$$

Na próxima seção, vamos estudar as soluções de (2.7). O coeficiente C_2 , por sua vez, é determinado normalização da função de onda,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\varphi(x)|^2 = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{-a} dx |\varphi_I(x)|^2 + \int_{-a}^a dx |\varphi_{II}(x)|^2 + \int_a^{\infty} dx |\varphi_{III}(x)|^2 = 1. \quad (2.8)$$

2.1 ESTUDO DOS ESTADOS LIGADOS

A equação (2.7) nos dá as energias dos estados ligados da partícula. Para tal, temos que resolver-la graficamente, já que se trata de uma equação transcendental. Vamos dividir nossa análise em dois casos: (a) solução de (2.7) com o sinal positivo e (b) com o sinal negativo.

- **sinal positivo:**

Nesse caso, (2.7) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{cases} \sin(2\tilde{k}a) = -\frac{2\tilde{k}k}{k^2 + \tilde{k}^2} \\ \cos(2\tilde{k}a) = \frac{k^2 - \tilde{k}^2}{k^2 + \tilde{k}^2} \end{cases},$$

ou, equivalentemente

$$\tan(\tilde{k}a) = -\frac{\tilde{k}}{k}. \quad (2.9)$$

Primeiramente, vamos deixá-la apenas em função de \tilde{k} : de (2.1) e (2.2), segue que

$$\tilde{k}^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2,$$

de modo que, usando a notação

$$k_0 \equiv \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad (2.10)$$

podemos reescrever a equação (2.9) da seguinte maneira

$$\tan(\tilde{k}a) = -\frac{\tilde{k}}{\sqrt{k_0^2 - \tilde{k}^2}}. \quad (2.11)$$

Vamos chamar de $f(\tilde{k})$ o primeiro membro de (2.11) e de $g(\tilde{k})$, o segundo. Serão soluções da equação (2.11) os valores de \tilde{k} para os quais $f(\tilde{k})$ e $g(\tilde{k})$ interceptam-se. A figura 2.1 traz as soluções gráficas de (2.11).

Levando (2.11) em (2.4), (2.5) e (2.6) encontramos $D_2 = -C_2$ e $C_1 = -D_3$, de modo que $\varphi_{II}(0) = 0$ e $\varphi_I(x) = -\varphi_{III}(x)$. Ou seja, $\varphi(x) = -\varphi(-x)$ e a função de onda é ímpar. Assim, as soluções da equação (2.11) nos dão os níveis de energia dos estados ligados ímpares.

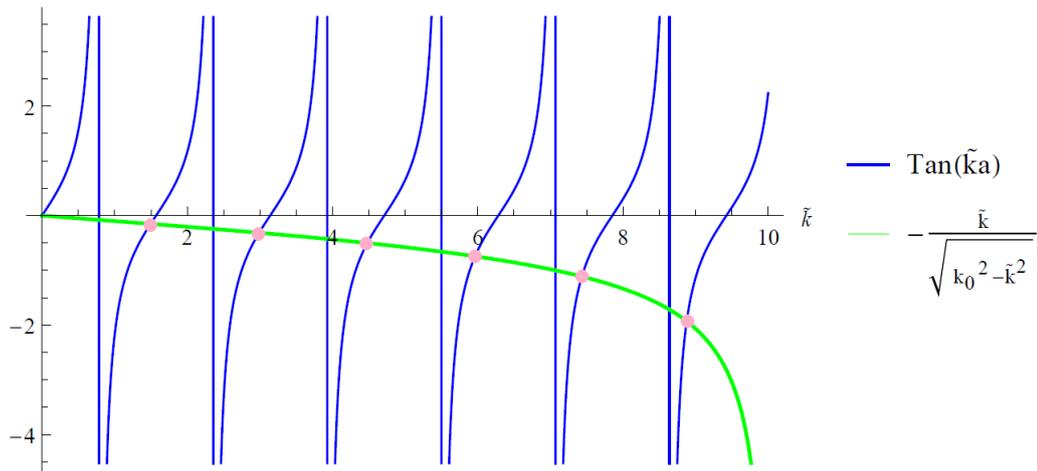


Figura 2.1: Solução gráfica de (2.11) com $k_0 = 10$ e $a = 1$. Os pontos coloridos marcam as soluções.

• **sinal negativo:**

Nesse caso, (2.7) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{cases} \sin(2\tilde{k}a) = \frac{2\tilde{k}k}{k^2 + \tilde{k}^2} \\ \cos(2\tilde{k}a) = -\frac{k^2 - \tilde{k}^2}{k^2 + \tilde{k}^2} \end{cases},$$

ou, equivalentemente

$$\tan(\tilde{k}a) = \frac{k}{\tilde{k}} = \frac{\sqrt{k_0^2 - \tilde{k}^2}}{\tilde{k}}. \quad (2.12)$$

A figura 2.2 traz as soluções gráficas de (2.12). Levando (2.12) em (2.4), (2.5) e (2.6) encontramos $D_2 = C_2$ e $C_1 = D_3$ e a função de onda é par. Assim, as soluções da equação (2.12) nos dão os níveis de energia dos estados ligados pares.

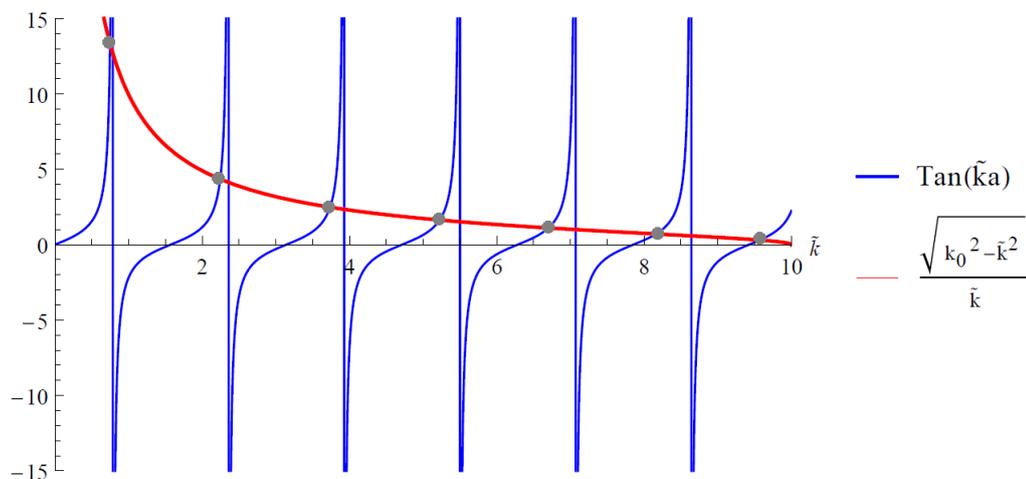


Figura 2.2: Solução gráfica de (2.12) com $k_0 = 10$ e $a = 1$. Os pontos coloridos marcam as soluções.

Na figura 2.3, colocamos as curvas das figuras 2.1 e 2.2 no mesmo plano e podemos ver os pontos de intersecção que se verificam para a e V_0 fixados. Ou seja, todos os estados discretos do poço

quadrado. Como $-V_0 < E < 0$, \tilde{k} pode assumir valores $0 < \tilde{k} < K_0$, portanto, a intersecção com o menor valor de \tilde{k} nos dará a energia do estado fundamental, o próximo nos informará a energia do primeiro estado excitado e assim por diante. Observando a figura 2.3, podemos ver claramente que o estado fundamental é par, enquanto que o primeiro estados excitado é ímpar, o segundo é par, o terceiro volta a ser ímpar e assim por diante. Ou seja, estados ligados do poço quadrado finito 1D alternam em paridade.

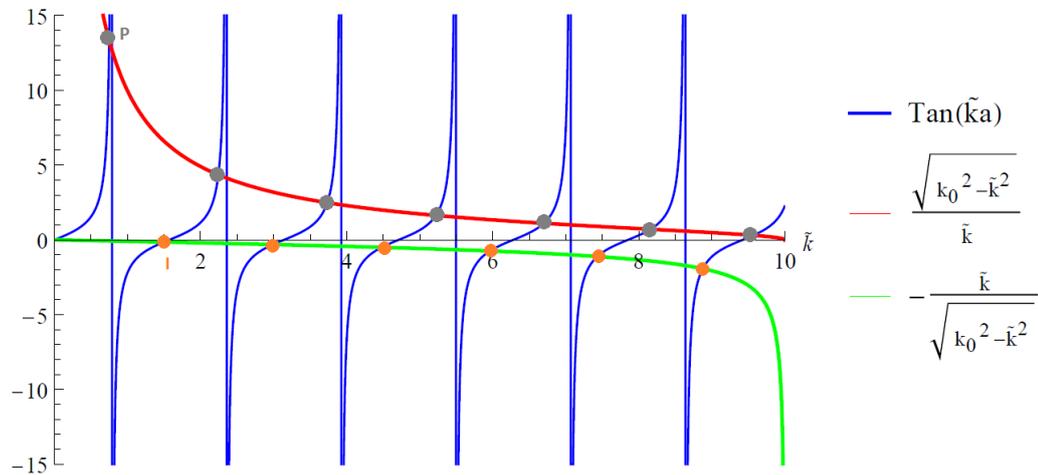


Figura 2.3: Solução gráfica de (2.11) e (2.12) com $k_0 = 10$ e $a = 1$. Os pontos coloridos marcam as soluções.