

# Física Quântica

## Aula 10

### Poço de potencial finito: caso unidimensional

Alex Gomes Dias

24 de março de 2016

- Condições a serem satisfeitas pela função de onda.

Passemos agora a avaliar situações mais gerais.

As condições de contorno para as soluções da equação de Schrödinger unidimensional e independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

são:

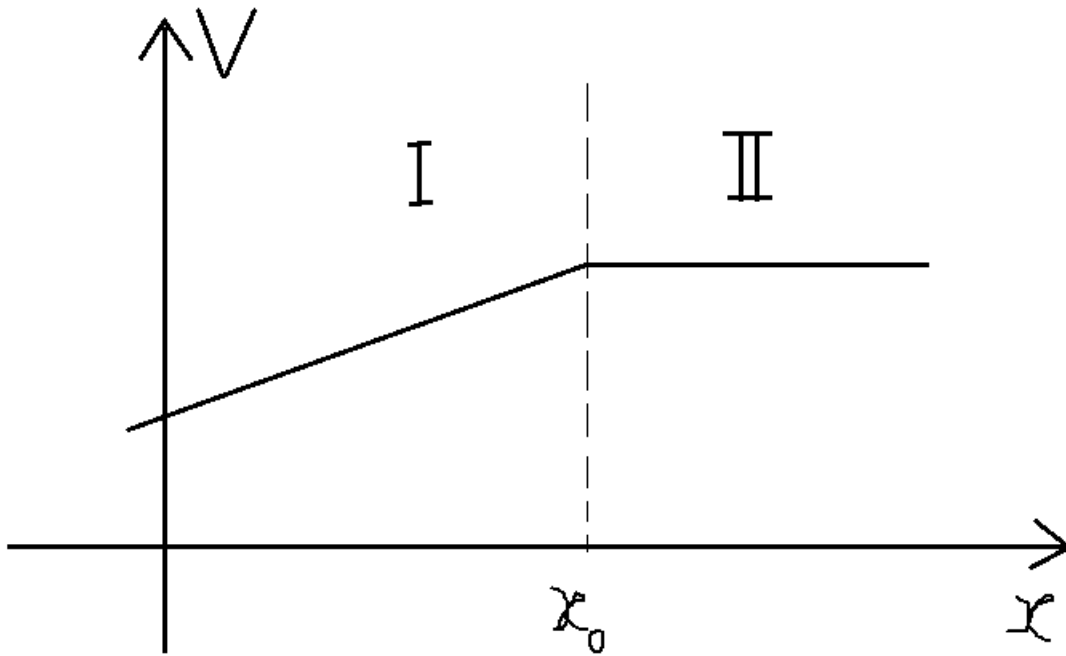
- 1-  $\psi(x)$  deve ser contínua.

A equação de onda requer essa continuidade. Além disso, a interpretação probabilística também requer continuidade da densidade de probabilidade  $P(x) = |\psi(x)|^2$ .

- 2-  $\frac{d}{dx} \psi(x)$  deve ser contínua.

A equação de onda contém a derivada de  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  de modo que essa função deve ser contínua.

A condição de continuidade da primeira derivada vem do fato da equação de Schrödinger ser de segunda ordem. Ao se integrar a equação de Schrödinger em torno do ponto  $x_0$ , tomado como fronteira entre as regiões *I* e *II* tem-se



$$-\frac{\hbar}{2m} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x) \psi(x) dx = E \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi(x) dx$$

Para um potencial regular (que não seja uma função delta de Dirac localizada em  $x = x_0$ ) a integral de  $V(x) \psi(x)$  é nula no limite  $\epsilon \rightarrow 0$ ,

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x) \psi(x) dx &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0} V_I(x) \psi_I(x) dx \\ &+ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0}^{x_0+\epsilon} V_{II}(x) \psi_{II}(x) dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

Da mesma forma, a integral  $E \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi(x) dx$  é nula no limite  $\epsilon \rightarrow 0$ . Assim, resta que

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \\ &= \frac{d\psi_{II}}{dx}(x_0) - \frac{d\psi_I}{dx}(x_0) = 0 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

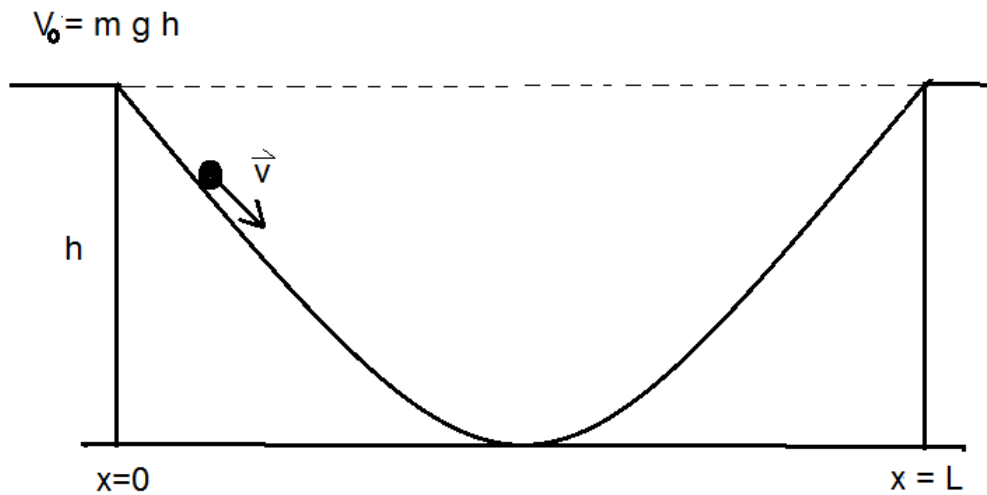
$$\frac{d\psi_I}{dx}(x_0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(x_0)$$

Além disso  $\psi(x)$  deve ser finita e unívoca.

As quantidades físicas observáveis (ex. momento e momento angular) que podem obtidas teoricamente dependem de  $\psi(x)$  e  $\frac{d\psi(x)}{dx}$ .

- Problema do poço de potencial finito.

Imaginemos o sistema clássico de uma partícula de massa  $m$  em movimento sem atrito em um poço de potencial com valor  $V_0 = m g h$



Sendo  $K$  a energia cinética

$$E = K + V$$

Mecânica clássica:

Partícula fica confinada entre  $0 < x < L$  se

$$E < V_0 \quad \Longrightarrow \quad 0 < x < L$$

Partícula pode ser encontrada nas posições  $0 > x > L$  se

$$E > V_0 \quad \Longrightarrow \quad 0 > x > L$$

Conforme a teoria quântica uma região “proibida” para a partícula seria aquela na qual a função de onda é, conseqüentemente, a distribuição de probabilidade, é nula.

$$\psi(x) = 0 \quad \implies \quad P(x) = |\psi(x)|^2 = 0$$

Como vimos se a barreira de potencial em  $x = 0$  e  $x = L$  fosse infinita a função de onda seria nula fora do poço.

Consideremos o problema da solução da equação de Schrödinger para o seguinte potencial

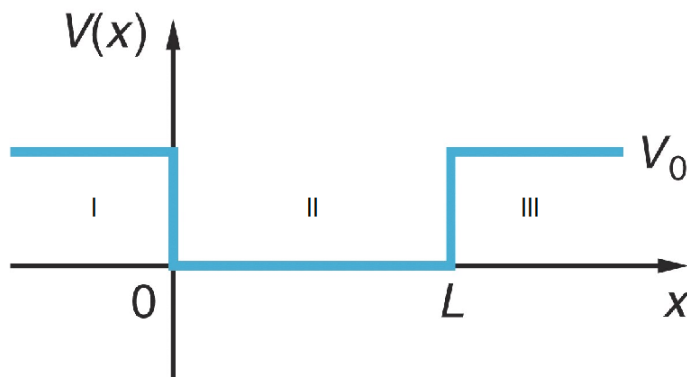


Fig. de Tipler.

$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } 0 < x < L \\ V_0, & \text{para } 0 \geq x \geq L \end{cases}$$

O problema é resolver a equação nas três regiões e “colar” as soluções com as condições de contorno. A continuidade da função de onda e de sua derivada fornecem as condições de contorno.

Dois casos distintos existem conforme a energia da partícula:  $E < V_0$  e  $E > V_0$ .

- Caso  $E < V_0$

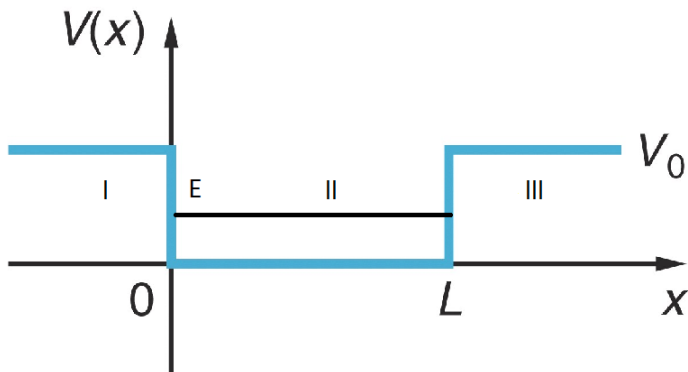


Fig. adaptada de Tipler.

A primeira vista pode parecer estranho ter a função de onda não nula nas regiões I e II, porque nelas

$$K = E - V_0,$$

e a energia cinética seria negativa. Essa é uma dificuldade aparente e o princípio da incerteza nos dará a resposta para isso.

As soluções devem ser encontradas nas regiões I, II e III. As autofunções são então obtidas fazendo com que as condições de contorno sejam atendidas nas fronteiras das regiões.

- Região II,  $0 < x < L$ .

Nesse domínio tem-se  $V = 0$  de modo que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) + V \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x)$$

↓

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) = -\frac{2m E}{\hbar^2} \psi_{II}(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) = -k^2 \psi_{II}(x)$$

onde

$$k^2 = \frac{2m E}{\hbar^2}$$

A solução é

$$\psi_{II}(x) = A_{II} \sin kx + B_{II} \cos kx$$

- Região III,  $x > L$ ,

Nesse domínio tem-se  $V = V_0$  e, assim,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{III}(x) + V_0 \psi_{III}(x) = E \psi_{III}(x)$$



$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx^2}\psi_{III}(x) &= \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi_{III}(x) \\ &= \kappa^2\psi_{III}(x)\end{aligned}$$

onde

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

A solução é

$$\psi_{III}(x) = A_{III}e^{\kappa x} + B_{III}e^{-\kappa x}$$

- Região I,  $x < 0$ ,  $V = V_0$

Da mesma forma anterior

$$\psi_I(x) = A_I e^{\kappa x} + B_I e^{-\kappa x}$$

As condições de contorno na fronteira das regiões I e II, e também na fronteira das regiões II e III, devem ser aplicadas para se determinar as constantes  $A_I$ ,  $A_{II}$ ,  $A_{III}$ ,  $B_I$ ,  $B_{II}$ ,  $B_{III}$ , e o espectro de energia.

## Convergência, ou finitude, das autofunções.

As autofunções devem convergir a zero quando  $x \rightarrow \pm\infty$  de modo a serem finitas, e também tornar finita a integral da distribuição de probabilidades. Isso implica que  $\psi_I$  e  $\psi_{III}$  convirjam a zero em certos limites em seus domínios. Na região  $I$  a função deve ser tal que

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_I(x) &= 0 \\ &= \lim_{x \rightarrow -\infty} \left[ A_I e^{\kappa x} + B_I e^{-\kappa x} \right] = \\ &= \lim_{x \rightarrow -\infty} B_I e^{\kappa|x|} \\ &\Rightarrow B_I = 0 \end{aligned}$$

onde se considerou que  $\kappa$  é positivo. Da mesma forma na região  $III$  a função deve ser tal que

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} \psi_{III}(x) &= 0 \\ &= \lim_{x \rightarrow \infty} \left[ A_{III} e^{\kappa x} + B_{III} e^{-\kappa x} \right] \\ &= \lim_{x \rightarrow \infty} A_{III} e^{\kappa x} \\ &\Rightarrow A_{III} = 0 \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

Assim,

$$A_{III} = B_I = 0$$

Com isso as soluções convergentes ficam sendo

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A_I e^{\kappa x} \\ \psi_{II}(x) &= A_{II} \sin kx + B_{II} \cos kx \\ \psi_{III}(x) &= B_{III} e^{-\kappa x}\end{aligned}$$

**Condições na fronteira entre  $I$  e  $II$  ( $x=0$ ).**

A condição de continuidade das autofunções na fronteira entre  $I$  e  $II$  dá

$$\begin{aligned}\psi_I(0) &= \psi_{II}(0) \\ A_I e^{\kappa 0} &= A_{II} \sin k0 + B_{II} \cos k0\end{aligned}\tag{1}$$

$$A_I = B_{II}\tag{2}$$

A continuidade da primeira derivada nessa fronteira fornece

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\psi_I(x) \Big|_{x=0} &= \frac{d}{dx}\psi_{II}(x) \Big|_{x=0} \\
[A_I\kappa e^{\kappa x}] \Big|_{x=0} &= [A_{II}k \cos kx - B_{II}k \sin kx] \Big|_{x=0} \\
A_I\kappa &= A_{II}k \\
A_I\frac{\kappa}{k} &= A_{II}
\end{aligned} \tag{3}$$

Com isso as constantes  $B_{II}$  e  $A_{II}$  são dadas em termos de  $A_I$ .

### Condições na fronteira entre $II$ e $III$ ( $x=L$ ).

A condição de continuidade das autofunções na fronteira entre  $II$  e  $III$  fornece

$$\begin{aligned}
\psi_{II}(L) &= \psi_{III}(L) \\
A_{II} \sin kL + B_{II} \cos kL &= B_{III} e^{-\kappa L} \\
\Rightarrow A_I \frac{\kappa}{k} \sin kL + A_I \cos kL &= B_{III} e^{-\kappa L}
\end{aligned} \tag{4}$$

onde na última linha substituímos  $A_{II}$  e  $B_{II}$  obtidos nas relações anteriores. A continuidade das derivadas na fronteira considerada fornece

$$\frac{d}{dx}\psi_{II}(x) \Big|_{x=L} = \frac{d}{dx}\psi_{III}(x) \Big|_{x=L}$$

$$A_{II}k \cos kL - B_{II}k \sin kL = -B_{III}\kappa e^{-\kappa L}$$

$$\Rightarrow A_I \kappa \cos kL - A_I k \sin kL = -B_{III} \kappa e^{-\kappa L} \quad (5)$$

O problema é determinar as energias dos estados da partícula nesse sistema. Isso se obtém através de uma relação envolvendo as quantidades:

$k \equiv k(E)$  e  $\kappa \equiv \kappa(E)$ .

Para isso repare que se dividirmos (4) por (5) teremos uma relação que independe das constantes  $A_I$  e  $B_{III}$

$$\frac{\frac{\kappa}{k} \sin kL + \cos kL}{\kappa \cos kL - k \sin kL} = -\frac{1}{\kappa}$$

$$\frac{\kappa}{k} \sin kL + \cos kL = -\cos kL + \frac{k}{\kappa} \sin kL$$

$$\left( \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right) \sin kL = -2 \cos kL$$

$$\tan kL = -\frac{2}{\left( \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right)}$$

$\Rightarrow$

$$-\cot kL = \frac{1}{2} \left( \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right)$$

Essa é uma equação transcendental e a sua solução é obtida numericamente. As soluções fornecem o espectro de energia do sistema. Repare que para um dado valor de  $V_0$  deve haver um conjunto finito de autovalores  $E_n$  correspondendo as energias dos estados de confinamento da partícula (estados ligados).

É conveniente escrever as relações em termos de variáveis adimensionais definindo

$$x = kL = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} EL^2}$$

e

$$x_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 L^2}$$

Com isso

$$\begin{aligned}\kappa^2 L^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) L^2 \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 L^2 - k^2 L^2 \\ &= x_0^2 - x^2\end{aligned}$$

Ao dividir a relação acima por  $x^2$  e tirar a raiz quadrada tem-se

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{\kappa^2 L^2}{x^2}} = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{x_0^2 - x^2}{x^2}}$$

Com isso, a procura é por soluções de

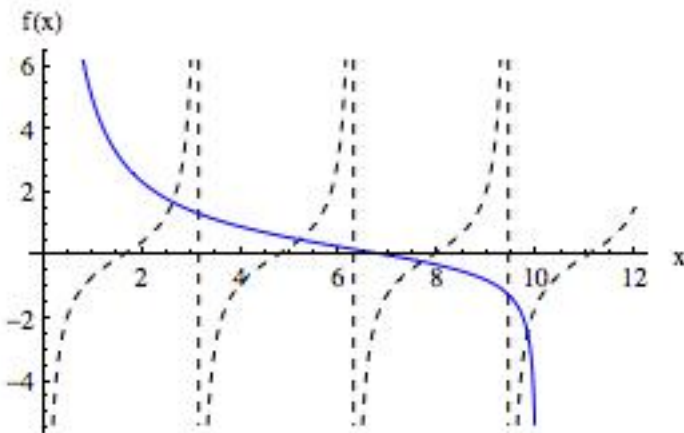
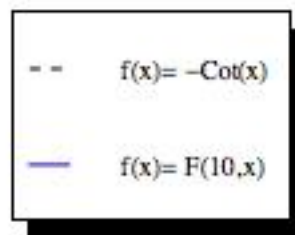
$$-\cot x = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{x_0^2 - x^2}{x^2}} - \sqrt{\frac{x^2}{x_0^2 - x^2}} \right), \quad x < x_0.$$

Dependendo do valor de  $V_0$  e  $L$ , i. e.,  $x_0$ , pode haver apenas um estado ligado.

Por exemplo se tomarmos  $x_0 = 10$ , i. e.,

$$V_0 = \frac{x_0^2 \hbar^2}{2m L^2} = 100 \times \frac{\hbar^2}{2m L^2} > E$$

existem quatro cruzamentos das funções do lado esquerdo e direito da equação transcendental acima, como pode ser visto no gráfico abaixo.



Essas soluções correspondem às energias

$$k_n = \frac{x_n}{L}$$

$$E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{x_n^2 \hbar^2}{2m L^2}$$

$$\begin{aligned}
 x_1 \approx 2.6 &\implies E_1 = \frac{x_1^2 \hbar^2}{2m L^2} = 6.76 \frac{\hbar^2}{2m L^2} \\
 x_2 \approx 5.2 &\implies E_2 = \frac{x_2^2 \hbar^2}{2m L^2} = 27.04 \frac{\hbar^2}{2m L^2} \\
 x_3 \approx 7.7 &\implies E_3 = \frac{x_3^2 \hbar^2}{2m L^2} = 59.29 \frac{\hbar^2}{2m L^2} \\
 x_4 \approx 9.82 &\implies E_4 = \frac{x_4^2 \hbar^2}{2m L^2} = 96.4 \frac{\hbar^2}{2m L^2} < V_0
 \end{aligned}$$

Observe que a energia total é quantizada, como se espera para uma situação onde há aprisionamento da partícula, e que o espectro é constituído por um número finito de valores de energia. Para o potencial  $V_0 = x_0^2 \frac{\hbar^2}{2m L^2}$ , com  $x_0 = 10$  esse conjunto finito de autovalores é nesse caso

$$E_n \equiv \{E_1, E_2, E_3, E_4\}$$

Repare também que o estado de maior energia possível, i. e., o correspondente a solução  $x_4$  que dá o último cruzamento das curvas, o valor de  $E_4$  está logo abaixo de  $V_0 = 100 \frac{\hbar^2}{2m L^2}$ .



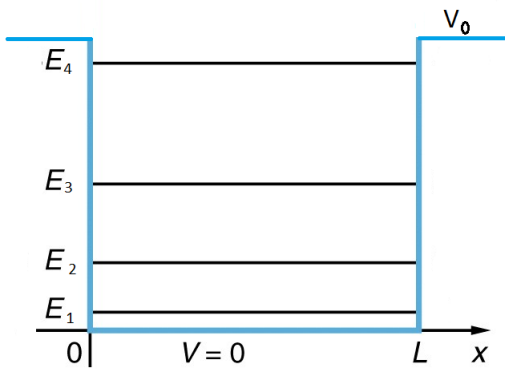


Fig. adaptada de Tipler.

A medida que  $V_0$  cresce, i. e.,  $x_0$  cresce, o número de soluções aumenta, uma vez que se tem mais cruzamentos das funções nesse caso.

A normalização das autofunções determina a constante  $A_I$ . Abaixo segue uma representação gráfica das três primeiras autofunções correspondentes às energias acima.

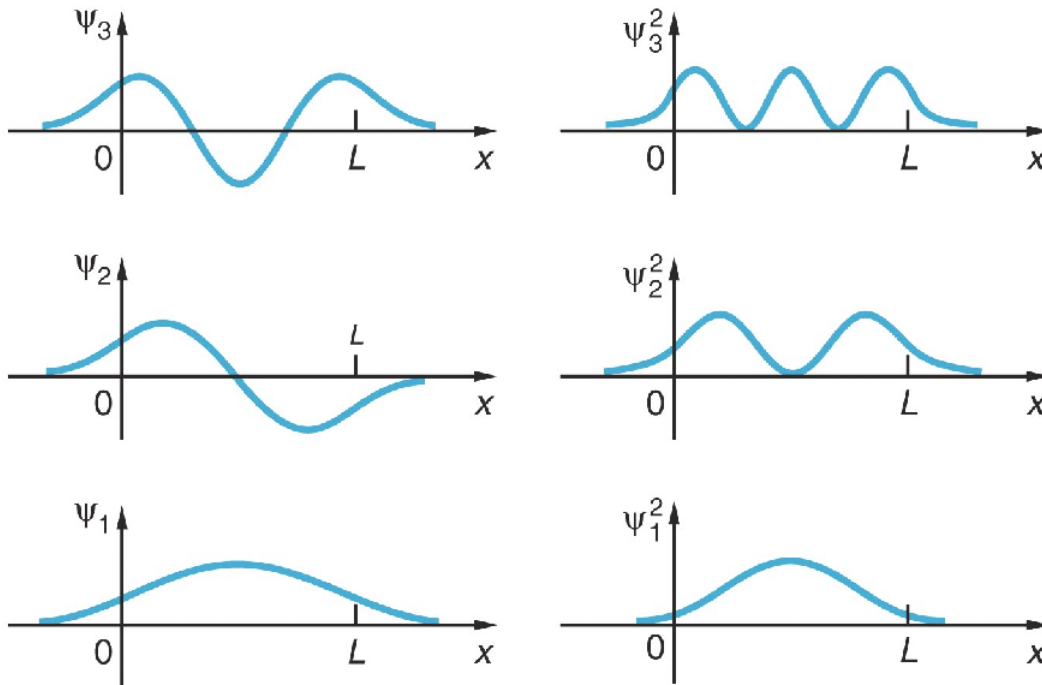


Fig. de Tipler.

Como havíamos adiantado, a função distribuição de probabilidades é não nula em  $0 > x > L$ . Esse resultado da mecânica quântica é notável pois a partícula

pode ser encontrada em regiões que são proibidas pela teoria clássica. Porém, nessas regiões  $P(x)$  decai exponencialmente. Isso ocorre em conformidade com o princípio da incerteza.

Na região  $x > L$

$$\psi(x) \sim e^{-\kappa x}$$

e

$$P(x) \sim e^{-2\kappa x}$$

Seja  $x = L + \Delta x$ , com

$$\Delta x = \frac{1}{\kappa},$$

um intervalo de localização da partícula em  $x > L$ . Esse intervalo  $\Delta x$  dá uma estimativa da localização para a partícula na região que seria proibida classicamente, com a função de onda suprimida pelo fator  $1/e$  do seu valor em  $\psi(L)$ , i.e.,

$$\psi(x) = \psi(L + \Delta x) = \psi(L) e^{-1}$$

Assim,

$$P(L + \Delta x) = P(L) e^{-2\kappa \Delta x},$$

e a distribuição de probabilidade cai por um fator  $e^{-2}$ . Esse decrescimento exponencial da distribuição de probabilidade nas regiões *I* e *III* dá a partícula uma certa localização quando encontrada nas regiões  $x > L$  e  $x < 0$ . Assim, temos nessa circunstância que:

Encontrar a partícula em  $x > L \rightarrow$  Localização da partícula em  $\Delta x$

Pelo princípio de incerteza

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \kappa \hbar$$

Assim, a incerteza associada a energia cinética seria

$$\Delta K = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\kappa^2 \hbar^2}{2m} = V_0 - E$$

Isso se superpõe a energia cinética negativa que a lei da conservação de energia nos conduziria

$$E = K + V_0$$

$$K = -(V_0 - E)$$

O problema da energia cinética negativa torna-se de fato só aparente, porque o princípio de incerteza conduz a uma incerteza  $\Delta K$  positiva tão grande quanto a  $|K|$ . O princípio de incerteza compatibiliza uma provável localização da partícula numa região que seria proibida classicamente, trazendo uma incerteza  $\Delta K$  na energia cinética que torna esta consistente com a lei da conservação de energia.

Exemplo:

Considere um elétron confinado em um poço de potencial finito com largura de 1,0 nm e altura de 2,0 eV. Determinar o número de estados ligados.

R: substituindo

$$L = 1,0 \text{ nm}$$

$$V_0 = 2,0 \text{ eV}$$

$$m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

na definição de  $x_0$  tem-se

$$\begin{aligned}
 x_0 &= \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} V_0 L^2} = \sqrt{\frac{2m_e c^2}{\hbar^2 c^2} V_0 L^2} \\
 &= \sqrt{\frac{2 \times 0,5 \times 10^6 \text{ eV}}{\left(\frac{1240}{2\pi}\right)^2 \text{ eV}^2 \cdot \text{ nm}^2}} \times 2,0 \text{ eV} \times 1 \text{ nm}^2 \approx 7,2
 \end{aligned}$$

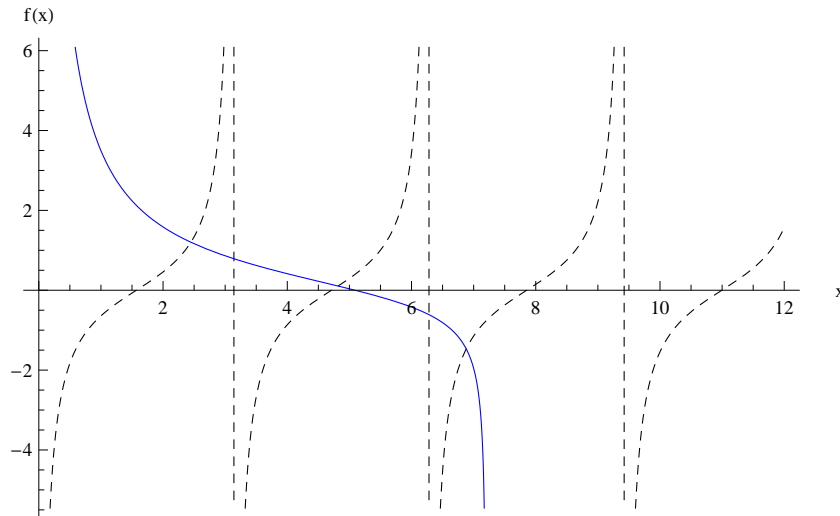
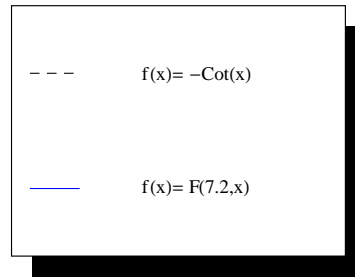
Assim, a função, na equação transcendental que obtemos acima,

$$f(x) = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{x_0^2 - x^2}{x^2}} - \sqrt{\frac{x^2}{x_0^2 - x^2}} \right)$$

esta limitada pelo valor de  $x_0 \approx 7,2 < 3\pi$ . Há três soluções de

$$-\cot x = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{x_0^2 - x^2}{x^2}} - \sqrt{\frac{x^2}{x_0^2 - x^2}} \right)$$

para  $0 \leq x < x_0$  e, portanto, esse é o número de estados ligados.



- Caso  $E > V_0$

Nessa situação não há confinamento e a situação requer uma elaboração adicional a ser feita quando tratarmos da transmissão e reflexão de ondas por um potencial, e do importante fenômeno do tunelamento quântico.

Porém, adiantemos alguns pontos sobre a solução desse problema.

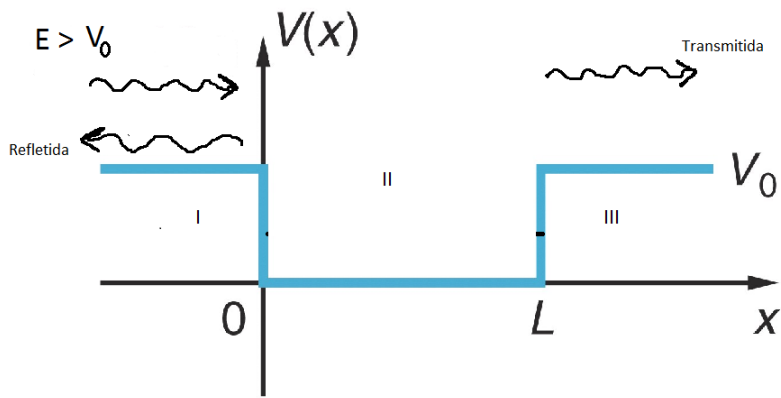


Fig. adaptada de Tipler.

As soluções são do tipo onda nas três regiões:

- Região I,  $x < L$ ,  $V = V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) + V_0 \psi_I(x) = E \psi_I(x)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi_I(x) \\ &= -k_I^2 \psi_{III}(x) \end{aligned}$$

onde

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

A solução é

$$\psi_I(x) = a_I e^{ik_I x} + b_I e^{-ik_I x}$$

Nessa solução dois tipos de onda estão presentes: uma que se move para a direita,  $\sim e^{ik_I x}$ , e outra que se move para a esquerda,  $\sim e^{-ik_I x}$ . A onda incidente se desdobra em duas componentes ao atingir a região  $I$ , onde nesse problema específico há uma queda no potencial. Uma das componentes corresponde a onda transmitida para a região  $III$  e uma que é refletida de volta para a região  $I$ .