

Poço de potencial quadrado com $E < V_0$

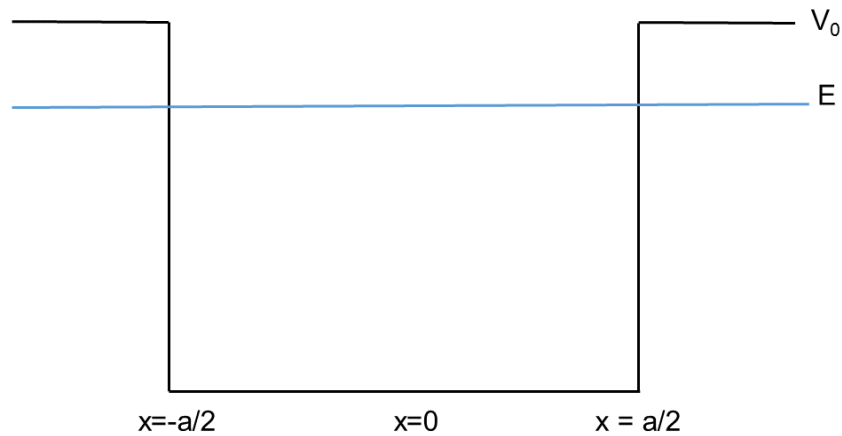


Figura 1. Poço de potencial quadrado.

Acima temos o sistema quântico poço de potencial com largura a e energia $E < V_0$. Considerando-se as três regiões distintas do poço de potencial, temos as autofunções abaixo

$$\psi_I = Ae^{k_I x} + Be^{-k_I x} \quad x < -\frac{a}{2}$$

$$\psi_{II} = C \cos(k_{II} x) + D \sin(k_{II} x) \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$$

$$\psi_{III} = Fe^{k_I x} + Ge^{-k_I x} \quad x > \frac{a}{2}$$

As expressões para k_I e k_{II} são mostradas a seguir

$$k_I = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

As autofunções não podem ter valores infinitos, considerando-se $x \rightarrow -\infty$, vemos claramente que $\psi_I \rightarrow \infty$, assim temos que fazer $B = 0$ em ψ_I . Analisando-se o comportamento para $x \rightarrow \infty$, temos que $\psi_{III} \rightarrow \infty$, de forma similar temos que fazer $F = 0$ em ψ_{III} . A autofunção ψ_{II} está limitada ao intervalo $-a/2 < x < a/2$, onde não há indeterminação para a esta função. As autofunções ficam como indicadas a seguir

$$\psi_I = Ae^{k_I x} \quad x < -\frac{a}{2} \quad (\text{Equação 1})$$

$$\psi_{II} = C \cos(k_{II}x) + D \sin(k_{II}x) \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \text{ (Equação 2)}$$

$$\psi_{III} = G e^{-k_I x} \quad x > \frac{a}{2} \text{ (Equação 3)}$$

Iremos estabelecer a continuidade das autofunções e de suas primeiras derivadas como relação x. Determinando-se as primeiras derivadas, temos os resultados indicados abaixo

$$\frac{d\psi_I}{dx} = k_I A e^{k_I x} \quad x < -\frac{a}{2}$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx} = -k_{II} C \sin(k_{II}x) + k_{II} D \cos(k_{II}x) \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$$

$$\frac{d\psi_{III}}{dx} = -k_I G e^{-k_I x} \quad x > \frac{a}{2}$$

Fazendo-se as autofunções e suas primeiras derivadas com relação x contínuas em $x = -a/2$, temos os seguintes resultados

$$C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) - D \sin\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = A e^{-\frac{k_I a}{2}} \quad \text{(Equação 4)}$$

$$k_{II} C \sin\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) + k_{II} D \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = k_I A e^{-\frac{k_I a}{2}} \quad \text{(Equação 5)}$$

Agora em $x = a/2$, temos as expressões abaixo

$$C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) + D \sin\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = G e^{-\frac{k_I a}{2}} \quad \text{(Equação 6)}$$

$$-k_{II} C \sin\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) + k_{II} D \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = -k_I G e^{-\frac{k_I a}{2}} \quad \text{(Equação 7)}$$

Fazendo-se a soma das equações 4 e 6, temos o resultado abaixo

$$2C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = (G + A) e^{-\frac{k_I a}{2}} \quad \text{(Equação 8)}$$

Subtraindo-se a equação 4 da equação 6, temos a equação abaixo

$$2D \sin\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = (G - A) e^{-\frac{k_I a}{2}} \quad \text{(Equação 9)}$$

De forma análoga, somando-se as equações 5 e 7, chegamos ao resultado a seguir

$$2k_{II}D \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = -k_I(G - A)e^{\frac{-k_I a}{2}} \quad (\text{Equação 10})$$

Subtraindo-se a equação 7 da equação 5, temos a expressão abaixo

$$2k_{II}C \sin\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = k_I(G + A)e^{\frac{-k_I a}{2}} \quad (\text{Equação 11})$$

Dividindo-se a equação 11 pela equação 8, temos a seguinte expressão

$$k_{II} \tan\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = k_I \quad C \neq 0, G + A = 0 \quad (\text{Equação 12})$$

Agora, dividindo-se a equação 10 pela equação 9, temos o seguinte resultado

$$k_{II} \cot\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) = -k_I \quad D \neq 0, G - A \neq 0 \quad (\text{Equação 13})$$

Somando-se as equações 12 e 13, temos o seguinte resultado

$$\begin{aligned} k_{II} \tan\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) + k_{II} \cot\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) &= -k_I + k_I \\ \tan\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) + \cot\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) &= 0 \end{aligned}$$

Multiplicando-se ambos os lados por $\tan(k_{II}a/2)$, chegamos à expressão mostrada a seguir

$$\left(\tan\left(\frac{k_{II}a}{2}\right)\right)^2 + 1 = 0$$

A equação acima não tem raízes reais, assim não podemos satisfazer mutuamente as equações 12 e 13. Temos para o sistema soluções de dois tipos, um que é representado pela equação 12 com as condições da equação 13 negadas. O outro tipo envolve a equação 13 com as condições da equação 12 negadas.

Considerando-se as soluções do primeiro tipo, com as condições negadas da equação 13 aplicadas à equação 4, temos os resultados mostrados na sequência.

$$\begin{aligned} k_{II} \tan\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) &= k_I \quad D = 0, G - A = 0 \\ C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) - D \sin\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) &= Ae^{\frac{-k_I a}{2}} \\ C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) &= Ae^{\frac{-k_I a}{2}} \end{aligned}$$

$$C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) e^{\frac{k_I a}{2}} = A = G$$

Agora temos as autofunções das equações 1-3 com as seguintes expressões.

$$\psi_I = \left[C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) e^{\frac{k_I a}{2}} \right] e^{k_I x} \quad x < -\frac{a}{2} \quad (\text{Equação 14})$$

$$\psi_{II} = C \cos(k_{II}x) \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \quad (\text{Equação 15})$$

$$\psi_{III} = \left[C \cos\left(\frac{k_{II}a}{2}\right) e^{\frac{k_I a}{2}} \right] e^{-k_I x} \quad x > \frac{a}{2} \quad (\text{Equação 16})$$

Vemos que as equações acima estão com a constante C.

Substituindo-se as expressões de k_I e k_{II} na equação 12, temos os resultados mostrados a seguir

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tan\left(\frac{\sqrt{2mE}a}{2\hbar}\right) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right) \tan\left(\frac{\sqrt{2mE}a}{2\hbar}\right) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Multiplicando-se ambos os lados da equação acima por $a/2$, temos as expressões abaixo

$$\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right) \frac{a}{2} \tan\left(\frac{\sqrt{2mE}a}{2\hbar}\right) = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}a}{\hbar} \frac{1}{2}$$

$$\left(\sqrt{\frac{2mEa^2}{4\hbar^2}}\right) \tan\left(\sqrt{\frac{2mEa^2}{4\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)a^2}{4\hbar^2}}$$

$$\left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}\right) \tan\left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{m(V_0 - E)a^2}{2\hbar^2}}$$

$$\left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}\right) \tan\left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} - \frac{mEa^2}{2\hbar^2}}$$

Tomando-se

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \text{ (Equação 17)}$$

$$R^2 = \frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} \text{ (Equação 18)}$$

Temos a nova equação abaixo

$$\mathcal{E} \tan \mathcal{E} = \sqrt{R^2 - \mathcal{E}^2} \text{ (Equação 19)}$$

A equação 19 é uma equação transcendental que podemos resolver graficamente. Vamos considerar $R = 4$, assim temos o gráfico mostrado na figura 2.

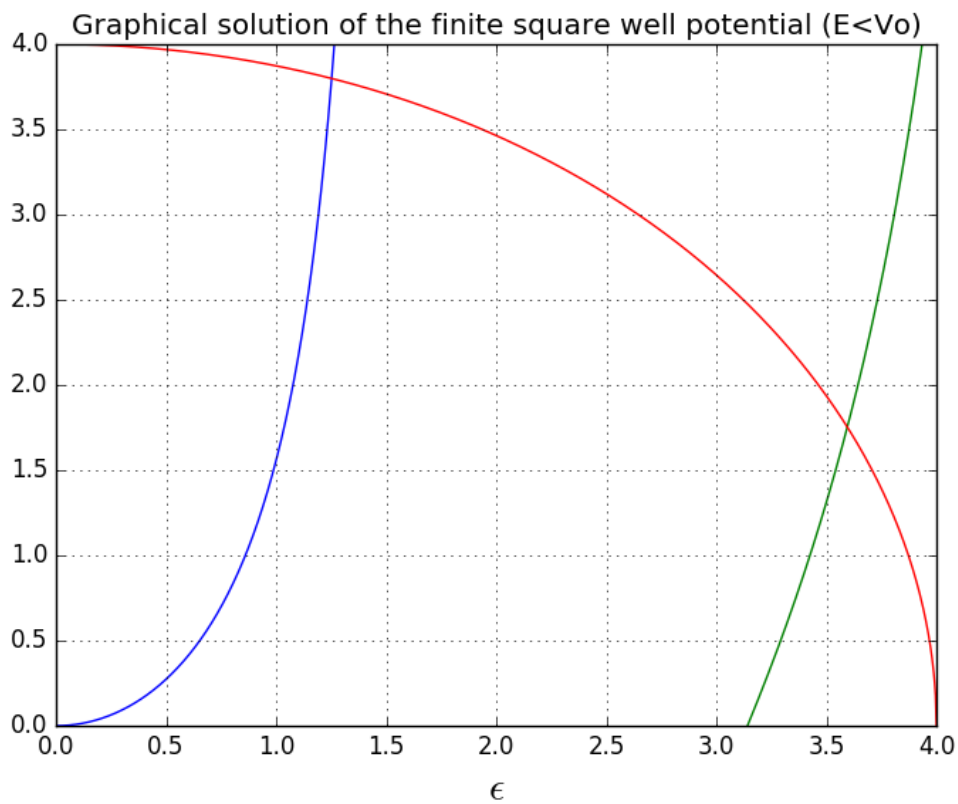


Figura 2. Solução gráfica para autovalores do primeiro tipo do poço de potencial com $R = 4$.

Considerando-se as soluções da equação 19 para um dado valor de R, as autofunções (equações 14-16) podem ter suas constantes determinadas. Sabemos que k_I e k_{II} têm as seguintes equações:

$$k_I = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Assim, multiplicando-se o numerador e o denominador por $2a$, temos:

$$\begin{aligned} k_I &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \left(\frac{2a}{2a}\right) = \sqrt{\frac{a^2 2m(V_0 - E)}{4\hbar^2}} \left(\frac{2}{a}\right) = \sqrt{\frac{a^2 m(V_0 - E)}{2\hbar^2}} \left(\frac{2}{a}\right) \\ &= \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} - \frac{mE a^2}{2\hbar^2}} \left(\frac{2}{a}\right) = \sqrt{R^2 - \mathcal{E}^2} \left(\frac{2}{a}\right) \rightarrow k_I \left(\frac{a}{2}\right) = \sqrt{R^2 - \mathcal{E}^2} \end{aligned}$$

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(\frac{2a}{2a}\right) = \sqrt{\frac{2ma^2 E}{4\hbar^2}} \left(\frac{2}{a}\right) = \sqrt{\frac{ma^2 E}{2\hbar^2}} \left(\frac{2}{a}\right) = \mathcal{E} \left(\frac{2}{a}\right) \rightarrow k_{II} \left(\frac{a}{2}\right) = \mathcal{E}$$

O valor da constante C deve ser normalizado de forma a satisfazer $R = 4$. Assim temos:

$$\psi_I = \left[C \cos(\mathcal{E}) e^{\sqrt{R^2 - \mathcal{E}^2}} \right] e^{(2/a)\sqrt{R^2 - \mathcal{E}^2} x} \quad x < -\frac{a}{2} \quad (\text{Equação 20})$$

$$\psi_{II} = C \cos\left(\left(\frac{2}{a}\right)\mathcal{E}x\right) \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \quad (\text{Equação 21})$$

$$\psi_{III} = \left[C \cos(\mathcal{E}) e^{\frac{k_I a}{2}} \right] e^{-(2/a)\sqrt{R^2 - \mathcal{E}^2} x} \quad x > \frac{a}{2} \quad (\text{Equação 22})$$

Onde C é dado por:

$$C = \frac{2}{\sqrt{a} \left\{ \sqrt{\left(\frac{1}{\sqrt{R^2 - \mathcal{E}^2}}\right) [\cos(2\mathcal{E}) + 1] + \left(\frac{1}{\mathcal{E}}\right) [\sin(2\mathcal{E}) + 2\mathcal{E}]} \right\}}$$

(Equação 23)

A equação acima está em função de R, assim podemos usá-la para qualquer valor de R. Na figura 3 temos a autofunção para $R = 4$ e $\mathcal{E} = 1.25269$.

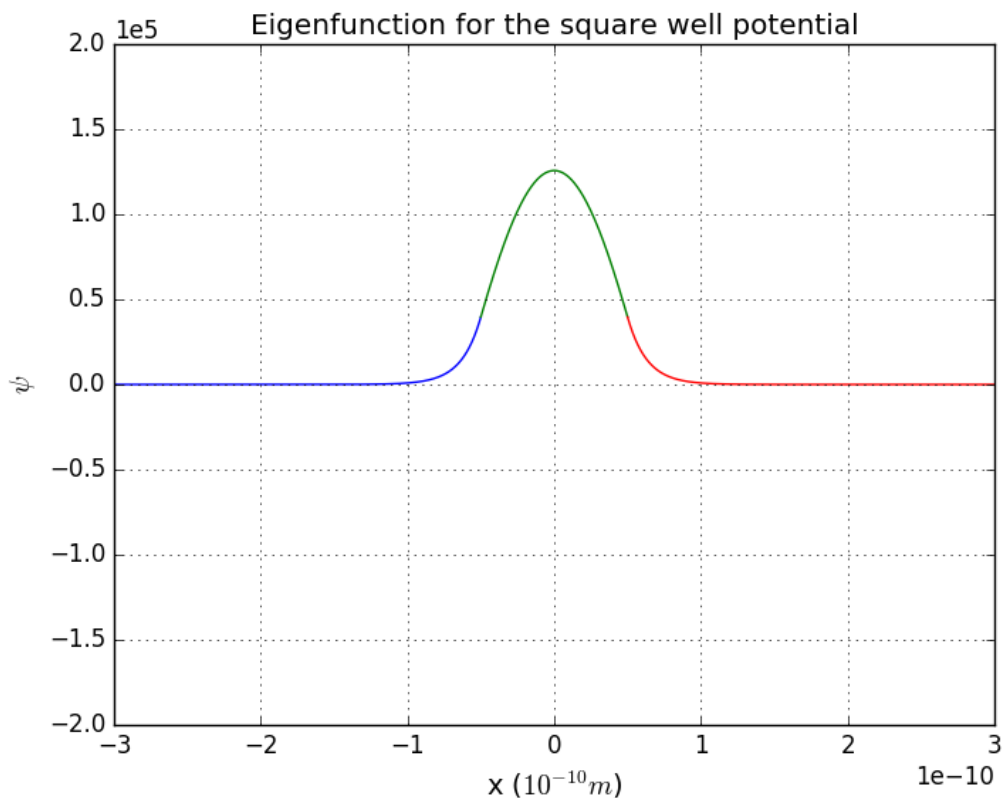


Figura 3. Autofunção para $\varepsilon = 1.25269$ com $R = 4$.

Exercícios

- 1) Use o programa *graphical_solution_square_well_potential_01.py* e gere as soluções gráficas para $R = 4$ (linha 24 do código). Anote os valores de ε .
- 2) Use o programa *square_potential_01.py* para os valores anotados em 1 e gere as autofunções correspondentes. Entre os parâmetros nas linhas 24 e 25 do código).
- 3) Use o programa *graphical_solution_square_well_potential_01.py* e gere as soluções gráficas para $R = 8$ (linha 24 do código). Anote os valores de ε .
- 4) Use o programa *square_potential_01.py* para os valores anotados em 3 e gere as autofunções correspondentes. Entre os parâmetros nas linhas 24 e 25 do código).
- 5) Use o programa *graphical_solution_square_well_potential_01.py* e gere as soluções gráficas para $R = 12$ (linha 24 do código). Anote os valores de ε .
- 6) Use o programa *square_potential_01.py* para os valores anotados em 5 e gere as autofunções correspondentes. Entre os parâmetros nas linhas 24 e 25 do código).

Referências

EISBERG, R., RESNICK, R. Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. 4ª ed. ou anteriores. Rio de Janeiro: Campus, 1986.

GRIFFITHS, David - Mecânica Quântica. 2ª. ed. São Paulo: Pearson Education. 2011. ebook