

Aula 10 - Poços quânticos múltiplos

Prof. Luis Gregório Dias

Sumário

Introdução	1
Poços de potencial quadrados em Mecânica Quântica	1
O poço quadrado finito	2
O poço quadrado duplo	3
Níveis de energia do poço quadrado duplo	4
Simetria do potencial: soluções <i>pares</i>	7
Imposição da continuidade da função de onda e sua derivada	8
Solução da Eq. Transcendental pelo método gráfico.....	9
Energia do estado fundamental do poço quadrado duplo.....	10
Limite $d \gg L$: dois poços desacoplados.	10
Limite $d \ll L$: Regime “molecular”	12
Poços múltiplos e bandas de energia.....	14
O que veremos a seguir:	15

Introdução

Neste texto, faremos uma introdução a um modelo relativamente simples mas bastante ilustrativo para descrever moléculas e sólidos. O modelo consiste em aproximar o potencial de cada átomo como um **poço quadrado finito**. Inicialmente vamos revisar como obter os níveis de energia para um poço quadrado finito. Depois, faremos o mesmo para um modelo de dois poços quadrados, simulando uma “molécula diatômica”. Por fim, veremos que um modelo de múltiplos poços quadrados nos dá pistas importantes para entender algumas propriedades de sólidos.

Poços de potencial quadrados em Mecânica Quântica

O início do aprendizado da Mecânica Quântica em geral se dá resolvendo a equação de Schrödinger para potenciais simples em uma dimensão. Um caso particularmente simples é o poço quadrado infinito, (vide-aula 11 do curso de Teoria Quântica) cujas soluções se assemelham a modos normais de uma corda presa em ambas as extremidades.

O poço quadrado finito

Um exemplo mais rico é o poço quadrado finito, em que o potencial é dado pela seguinte equação:

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

Equação 1

O potencial $V(x)$ está representado na Figura 1 abaixo:

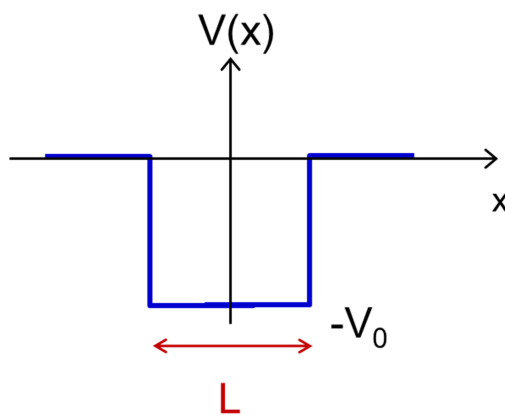


Figura 1: Poço quadrado simples, finito.

Mas por que resolver um potencial deste tipo? A resposta é que este tipo de potencial pode ser usado como um *modelo* para potenciais reais mais complicados. Em Física, é muito comum o uso de modelos, ou seja, construções teóricas que funcionam como idealizações da realidade física, que nos permitem um entendimento dos mecanismos básicos do funcionamento de um sistema mais complexos.

O poço quadrado, por exemplo, pode ser usado como um *modelo* para um sistema real como o potencial de elétrons em um átomo. Isto por que os elementos básicos do sistema real estão presentes no modelo: o poço quadrado é um potencial confinante que dá origem a níveis de energia discretos, como no caso atômico.

Para calcular os *níveis de energia* do poço quadrado finito, é necessário resolver a equação de Schrödinger para o potencial $V(x)$ dado pela Equação 1 acima e obter a equação transcendental cujas soluções serão as energias E_n dos níveis discretos.

Você pode encontrar a solução no [Texto de Apoio](#) em anexo a esta aula.

O poço quadrado duplo

O modelo pode ser expandido para descrever o funcionamento básico um sistema ainda mais complexo: uma molécula diatômica. Para isto, podemos usar um potencial de *dois* poços quadrados separados por uma pequena barreira, como ilustrado na Figura 2 abaixo:

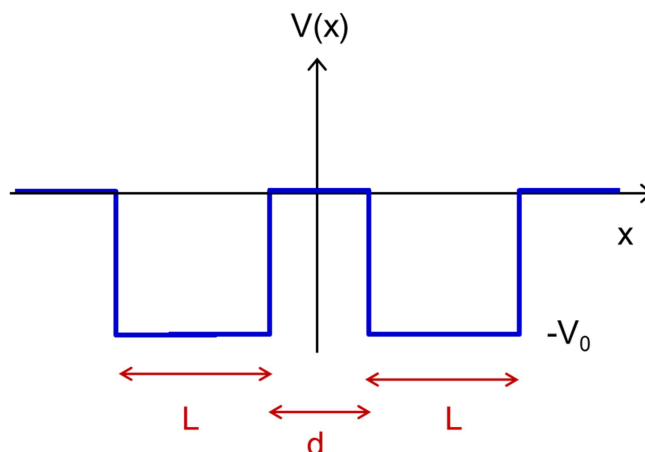


Figura 2: Potencial do poço quadrado duplo

O potencial consiste de dois poços de potencial de largura L separados por uma barreira de largura d . A seguir, vamos apresentar alguns argumentos que mostram que o poço quadrado duplo pode ser um modelo razoável para descrever uma molécula diatômica, mostrada na Figura 3 abaixo.

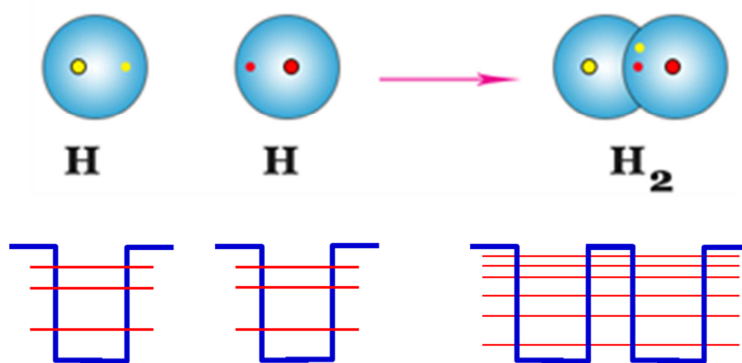


Figura 3: Molécula diatômica descrita por um poço quadrado duplo.

É importante notar que temos dois regimes distintos para este potencial dependendo do parâmetro d . Se a distância d entre os poços (ou seja, a largura da barreira) for muito grande (por exemplo, maior que a largura dos poços, como mostrado na Figura 3 à esquerda), o comportamento de um elétron em um poço é pouco afetado pelo comportamento do elétron no outro poço. Isto descreveria a situação de **átomos isolados**: os níveis de energia dos elétrons serão idênticos aos de um poço quadrado simples;

No entanto, se a distância entre os poços for pequena (menor que a largura do poço, como mostrado na Figura 3 à direita), aumenta a possibilidade de tunelamento quântico entre os poços e um elétron em um poço de potencial passa a “sentir” a presença do segundo poço. Isto faz com que os níveis de energia do poço duplo tenham uma configuração diferente do que o caso do poço quadrado simples.

O principal resultado é que, nesta situação, o **estado fundamental** do poço duplo terá uma energia menor do que a energia do estado fundamental do poço quadrado simples. Com isso, a configuração do poço duplo é **energeticamente favorável** em relação à configuração de dois poços simples isolados. Em outras palavras, o poço duplo, neste caso, é um bom modelo para descrever o caso de uma **molécula diatômica**.

Nesta aula, mostraremos como isto ocorre em detalhe, resolvendo a equação de Schrödinger para o poço quadrado duplo.

Níveis de energia do poço quadrado duplo

O potencial $V(x)$ do poço quadrado duplo pode ser dividido em 5 regiões, conforme mostrado na Figura 4 abaixo:

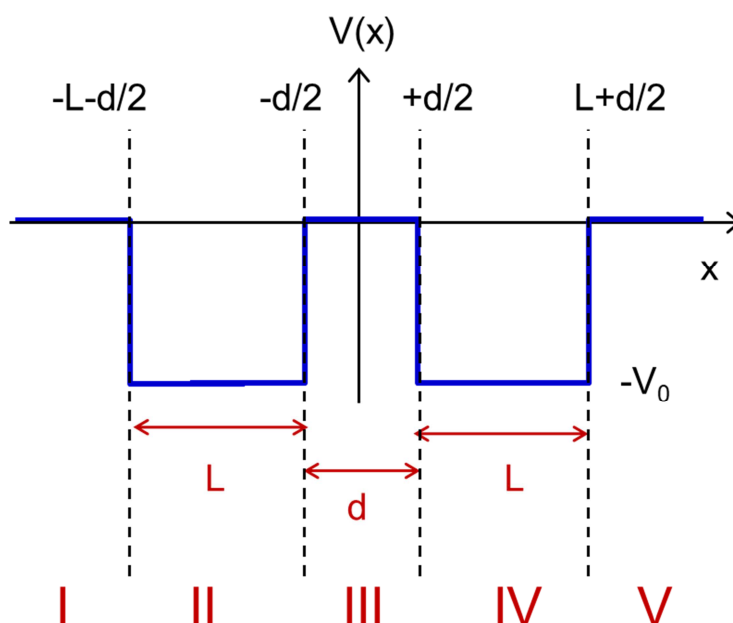


Figura 4: Regiões do poço quadrado duplo.

Nas regiões I ($x < -L-d/2$), III ($-d/2 < x < +d/2$) e V ($x > L+d/2$) o potencial é **nulo** (ou seja, $V(x)=0$), Nas outras duas regiões (II e IV) o potencial é negativo ($V(x)=-V_0$),

formando dois poços de potencial. Com isso, podemos escrever a Equação de Schrödinger independente do tempo para as 5 regiões na forma:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região I} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - V_0\Psi(x) = E\Psi(x) & \text{Região II} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região III} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - V_0\Psi(x) = E\Psi(x) & \text{Região IV} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região V} \end{array} \right.$$

Equação 2

Para facilitar, podemos re-escrever as equações nas regiões II e IV para isolar a derivada segunda no lado esquerdo:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região I} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = (E + V_0)\Psi(x) & \text{Região II} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região III} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = (E + V_0)\Psi(x) & \text{Região IV} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região V} \end{array} \right.$$

Equação 3

Aqui, estamos procurando soluções para **estados ligados**, ou seja, com energias E entre 0 e $-V_0$, como mostrado na Figura abaixo:

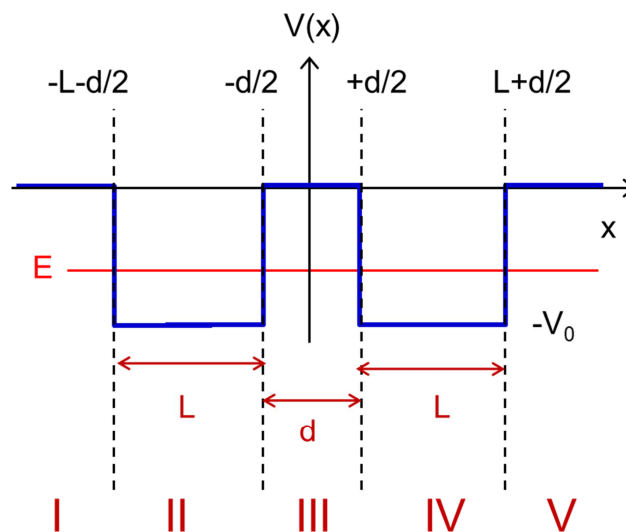


Figura 5: Energia dos estados ligados.

Neste caso, fica claro que $E+V_0$ no lado direito das equações das regiões II e IV é um *número positivo* já que $E<0$ é necessariamente *negativo* ($E=-|E|$) mas seu módulo é menor que V_0 ($|E|<V_0$). Logo:

$$E + V_0 = V_0 - |E| > 0$$

Podemos então definir as quantidades *positivas* $\alpha(E)$ e $k(E)$ na forma:

$$\begin{cases} \alpha(E) &= \sqrt{2m|E|}/\hbar \\ k(E) &= \sqrt{2m(V_0 - |E|)}/\hbar \end{cases}$$

Equação 4

que serão funções positivas da energia (note que apenas o módulo de E entra na raiz).

Com essas definições, as equações diferenciais nas regiões I-V ficam mais simples:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = +\alpha(E)^2 \Psi(x) & \text{Região I} \\ \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = -k(E)^2 \Psi(x) & \text{Região II} \\ \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = +\alpha(E)^2 \Psi(x) & \text{Região III} \\ \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = -k(E)^2 \Psi(x) & \text{Região IV} \\ \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = +\alpha(E)^2 \Psi(x) & \text{Região V} \end{array} \right.$$

Equação 5

Desta forma, fica mais claro qual deve ser o formato das soluções em cada região. Nas regiões I, III e V procuramos soluções em que a *segunda derivada seja proporcional à própria função multiplicada por um número positivo*. Isto é satisfeito por uma *função exponencial* como $\Psi(x) = Ae^{\alpha x}$ ou $\Psi(x) = Be^{-\alpha x}$.

Já nas regiões II e IV e V procuramos soluções em que a *segunda derivada seja proporcional à própria função multiplicada por um número negativo*. Isto é satisfeito por uma *função seno ou cosseno* como $\Psi(x) = a \cos kx$ ou $\Psi(x) = b \sin kx$.

Um ponto importante é que, nas regiões I e V, é necessário *descartar as soluções exponenciais que divergem (vão a infinito) para $x \rightarrow \pm\infty$* . Estas soluções, embora matematicamente aceitáveis, não descrevem situações físicas. Isto por que o módulo quadrado da função de onda corresponde a uma distribuição de probabilidade (que pode ser medida em experimentos!) de modo que deve ter uma integral finita em todo o espaço.

Juntando tudo, temos a solução da Eq. de Schrödinger para o poço quadrado duplo fica na forma:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Psi_I(x) = A_I e^{+\alpha x} & x < -L - d/2 \\ \Psi_{II}(x) = a_{II} \cos kx + b_{II} \operatorname{sen} kx & -L - d/2 \leq x < -d/2 \\ \Psi_{III}(x) = A_{III} e^{+\alpha x} + B_{III} e^{-\alpha x} & -d/2 \leq x \leq d/2 \\ \Psi_{IV}(x) = a_{IV} \cos kx + b_{IV} \operatorname{sen} kx & d/2 < x \leq L + d/2 \\ \Psi_V(x) = B_V e^{-\alpha x} & x > L + d/2 \end{array} \right.$$

Equação 6

onde as constantes $A_I, a_{II}, b_{II}, A_{III}, B_{III}, a_{IV}, b_{IV}, B_V$ são reais e devem ser determinadas pelas **condições de contorno**, impondo a continuidade da função de onda e sua derivada nas interfaces entre as regiões.

Simetria do potencial: soluções pares.

O potencial mostrado na Figura 4 é **simétrico** em relação à origem ($x=0$) do sistema de coordenadas escolhido, ou seja, $V(x)=V(-x)$. Embora esta seja uma escolha arbitrária (poderíamos ter escolhido a origem $x=0$ em outra posição do potencial, como na borda do primeiro poço), ela facilita bastante o cálculo das funções de onda, isto porquê a simetria do potencial permite apenas dois tipos de soluções para a Equação de Schrödinger: soluções **pares** $\Psi(-x) = +\Psi(x)$ e **ímpares** $\Psi(-x) = -\Psi(x)$ em relação à troca $x \leftrightarrow -x$.

Vamos focar aqui no espectro das soluções **pares**. O caso de soluções ímpares é completamente análogo e será deixado para os exercícios.

Impondo que a solução é par, reduzimos o número de constantes independentes mostrados na Equação 6. Isto por que, se $\Psi(-x) = +\Psi(x)$, os coeficientes das regiões III, I e V, e II e IV estão conectados e devem obedecer:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{III} e^{+\alpha(-x)} + B_{III} e^{-\alpha(-x)} = A_{III} e^{+\alpha x} + B_{III} e^{-\alpha x} \\ a_{IV} \cos(-kx) + b_{IV} \operatorname{sen}(-kx) = a_{II} \cos kx + b_{II} \operatorname{sen} kx \\ B_V e^{-\alpha(-x)} = A_I e^{+\alpha x} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} B_{III} = A_{III} \\ a_{IV} = a_{II} \\ b_{IV} = -b_{II} \\ B_V = A_I \end{array} \right.$$

Equação 7

Logo, as **soluções pares** são da forma:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Psi_I(x) = A_I e^{+\alpha x} & x < -L - d/2 \\ \Psi_{II}(x) = a_{II} \cos kx + b_{II} \operatorname{sen} kx & -L - d/2 \leq x < -d/2 \\ \Psi_{III}(x) = A_{III} (e^{+\alpha x} + e^{-\alpha x}) & -d/2 \leq x \leq d/2 \\ \Psi_{IV}(x) = a_{II} \cos kx - b_{II} \operatorname{sen} kx & d/2 < x \leq L + d/2 \\ \Psi_V(x) = A_I e^{-\alpha x} & x > L + d/2 \end{array} \right.$$

Equação 8

de modo que temos apenas quatro constantes a ser determinadas. Estas podem ser obtidas impondo a continuidade de $\Psi(x)$ e $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ nos pontos $x = \pm \frac{d}{2}$ e $x = \pm \left(L + \frac{d}{2}\right)$. Como a solução é par ($\Psi(-x) = +\Psi(x)$), basta escolher o lado positivo.

Imposição da continuidade da função de onda e sua derivada

Impondo a continuidade de $\Psi(x)$ e $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ em $x = +\frac{d}{2}$, temos:

$$\Psi_{III}(d/2) = \Psi_{IV}(d/2) \Rightarrow A_{III} \left(e^{+\frac{\alpha d}{2}} + e^{-\frac{\alpha d}{2}} \right) = a_{II} \cos \left(\frac{kd}{2} \right) - b_{II} \operatorname{sen} \left(\frac{kd}{2} \right)$$

Equação 9

$$\frac{d\Psi_{III}}{dx} = \frac{d\Psi_{IV}}{dx} \Big|_{x=\frac{d}{2}} \Rightarrow \alpha A_{III} \left(e^{+\frac{\alpha d}{2}} - e^{-\frac{\alpha d}{2}} \right) = k \left(-a_{II} \operatorname{sen} \left(\frac{kd}{2} \right) - b_{II} \cos \left(\frac{kd}{2} \right) \right)$$

Equação 10

Dividindo a Equação 10 pela Equação 9, obtemos:

$$\alpha \tanh \left(\frac{\alpha d}{2} \right) \left[a_{II} \cos \left(\frac{kd}{2} \right) - b_{II} \operatorname{sen} \left(\frac{kd}{2} \right) \right] = -k \left[a_{II} \operatorname{sen} \left(\frac{kd}{2} \right) + b_{II} \cos \left(\frac{kd}{2} \right) \right]$$

Equação 11

Lembrando que $\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$.

Já em $x = L + \frac{d}{2}$, temos:

$$\Psi_{IV}(L + d/2) = \Psi_V(L + d/2) \Rightarrow a_{II} \cos \left(kL + \frac{kd}{2} \right) - b_{II} \operatorname{sen} \left(kL + \frac{kd}{2} \right) = A_I e^{-\alpha L} e^{-\frac{\alpha d}{2}}$$

Equação 12

$$\frac{d\Psi_{IV}}{dx} = \frac{d\Psi_V}{dx} \Big|_{x=L+\frac{d}{2}} \Rightarrow k \left(-a_{II} \operatorname{sen} \left(kL + \frac{kd}{2} \right) - b_{II} \cos \left(kL + \frac{kd}{2} \right) \right) = -\alpha A_I e^{-\alpha L} e^{-\frac{\alpha d}{2}}$$

Equação 13

Dividindo a Equação 13 pela Equação 12, abrindo os senos e cossenos, e rearranjando os termos (vide Exercício), obtemos:

$$\left[a_{II} \cos\left(\frac{kd}{2}\right) - b_{II} \operatorname{sen}\left(\frac{kd}{2}\right) \right] (\alpha \cos kL - k \operatorname{sen} kL) = \left[a_{II} \operatorname{sen}\left(\frac{kd}{2}\right) + b_{II} \cos\left(\frac{kd}{2}\right) \right] (\alpha \operatorname{sen} kL + k \cos kL)$$

Equação 14

Estamos agora prontos para chegar à Equação transcendental para os níveis de energia. Note que os termos envolvendo $\operatorname{sen}\frac{kd}{2}$ e $\cos\frac{kd}{2}$ na Equação 14 são idênticos aos termos na Equação 11. Combinando as duas equações e eliminando estes termos, obtemos:

$$\frac{\alpha(E)}{k(E)} \tanh\left(\frac{\alpha d}{2}\right) = \frac{k(E) \tan(kL) - \alpha(E)}{\alpha(E) \tan(kL) + k(E)}$$

Equação 15

Esta é a **Equação Transcendental** para determinar o espectro de soluções pares do poço quadrado duplo. Isto significa que as energias E dos níveis devem satisfazer os dois lados da Equação 15 (lembrando que $\alpha(E)$ e $k(E)$ são funções de E , dadas na Equação 4.

Um outro modo de escrever a Equação Transcendental é na seguinte forma:

$$F_p(E) = \frac{\alpha(E)}{k(E)} \tanh\left(\frac{\alpha d}{2}\right) - \frac{k(E) \tan(kL) - \alpha(E)}{\alpha(E) \tan(kL) + k(E)} = 0$$

Equação 16

Aqui, procuramos as energias E que correspondem aos zeros da função $F_p(E)$. Este é um modo mais eficiente de determinar as soluções E_n que satisfazem a equação transcendental $F_p(E)=0$.

Solução da Eq. Transcendental pelo método gráfico.

Podemos encontrar as soluções pelo **método gráfico**: fazemos um gráfico de $F_p(E)$ (usando, por exemplo, softwares como *Mathematica*, uma planilha Excel, ou o site *Wolfram Alpha*) e procuramos os zeros. Isto é mostrado na Figura 6 abaixo, onde usamos $d=2L$. Encontramos a energia do **estado fundamental** E_0 neste caso

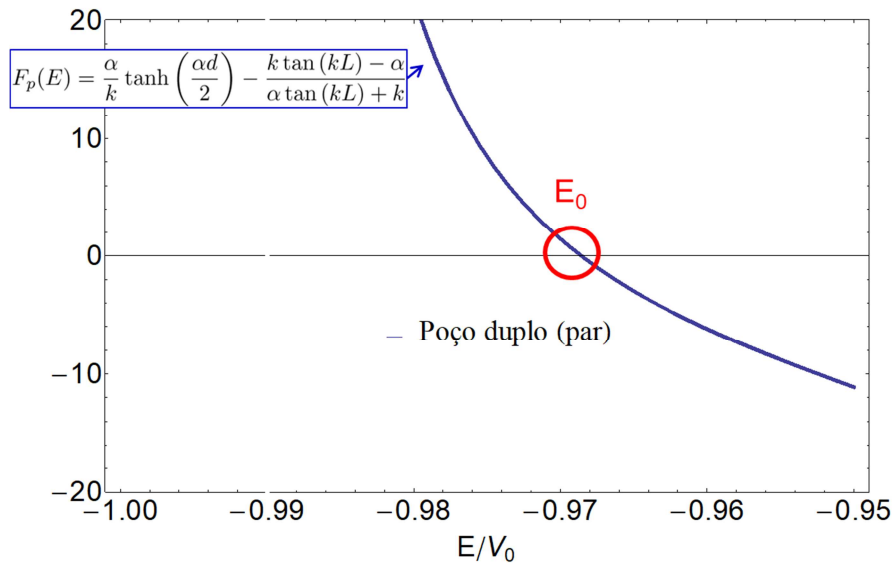


Figura 6: Resolvendo a Equação Transcendental pelo método gráfico

Energia do estado fundamental do poço quadrado duplo

Depois de obter a equação transcendental das soluções ímpares $F_i(E)=0$ (que você vai fazer nos exercícios), podemos agora verificar como as energias do estado fundamental E_0 e do primeiro estado excitado E_1 do poço duplo mudam quando mudamos a distância d entre os poços.

Limite $d \gg L$: dois poços desacoplados.

Vamos começar com o caso de uma separação d grande entre os poços. Escolhemos $d=2L$ e resolvemos as equações transcendentais $F_p(E)=0$ e $F_i(E)=0$ pelo método gráfico, conforme mostrado na Figura 7.

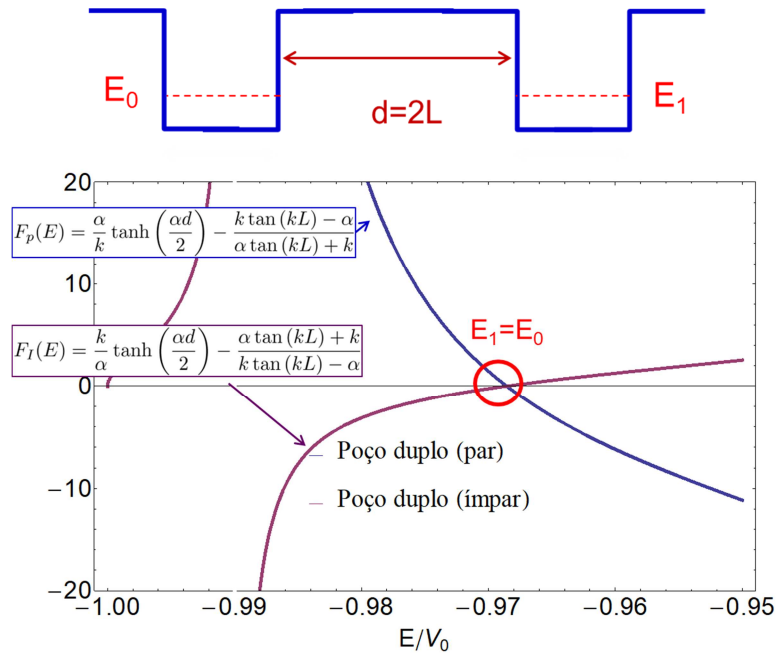


Figura 7: Solução gráfica das equações transcendentais para $d=2L$.

A primeira coisa que notamos é que as funções $F_p(E)$ e $F_i(E)$ e **cortam o eixo da energia (eixo horizontal) praticamente no mesmo ponto**. Isto significa que as energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado são praticamente iguais ($E_0 = E_1$), sendo estes estados considerados **degenerados**.

Além disso, essas energias correspondem também ao **estado fundamental do poço quadrado simples** de largura L (solução da equação transcendental $f_p(E)=0$, vide **Texto de Apoio**). Como mostrado na Figura 8, as três curvas ($F_p(E)$, $F_i(E)$ e $f_p(E)$) cortam o eixo horizontal das energias praticamente no mesmo ponto.

A interpretação física é clara: **para $d=2L$, o poço quadrado duplo se comporta como dois poços simples independentes entre si**. Ou seja, não há ganho energético para que um elétron que está localizado em um dos poços ocupe o outro poço. Uma outra forma de dizer isso é que os estados correspondentes a um elétron ocupando o poço da direita ou a um elétron ocupando o poço da esquerda tem a mesma energia.

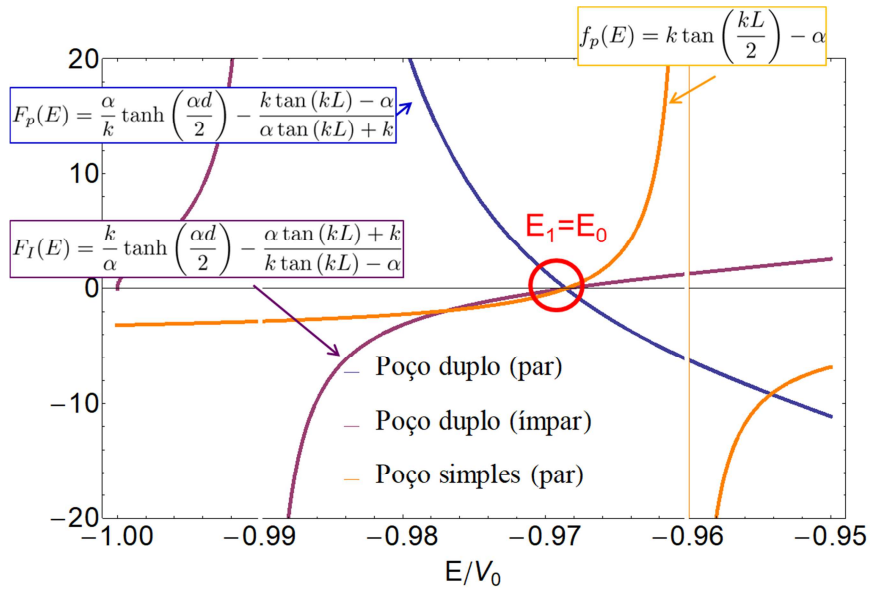


Figura 8: Solução gráfica das equações transcendentais do poço duplo para $d=2L$ e do poço simples de largura L .

Limite $d \ll L$: Regime “molecular”.

Agora vemos o caso de d pequeno comparado a L . No caso, usamos $d=0,05L$, conforme mostrado na Figura 9 abaixo:

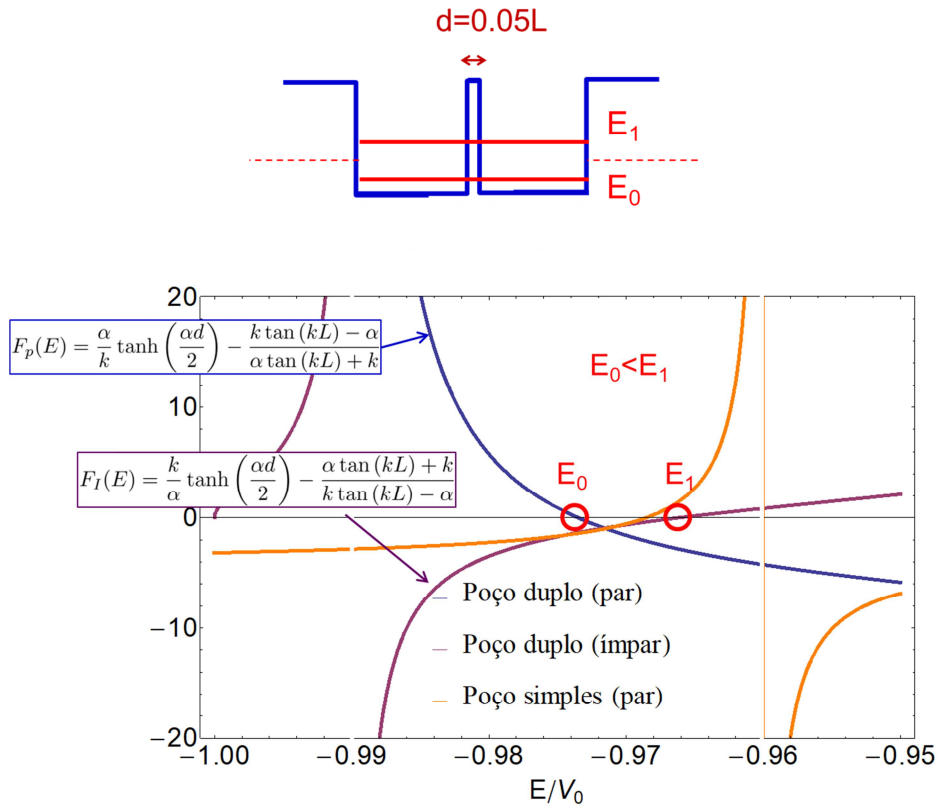


Figura 9: Solução gráfica das equações transcendentais do poço duplo para $d=0,05L$ e do poço simples de largura L .

Aqui vemos uma situação claramente diferente em relação ao exemplo anterior. As funções $F_p(E)$ e $F_i(E)$ e cortam o eixo da energia (eixo horizontal) em pontos diferentes, sendo que a energia E_0 do estado par é menor que a energia E_1 do estado ímpar. Além disso, E_0 também é menor do que a energia do estado fundamental de um poço quadrado simples. Logo, se a distância d entre os poços é pequena, é energeticamente favorável aos elétrons que ocupem um estado compartilhado entre os dois poços ao invés de ocupar estados nos poços isolados.

A implicação é que, para $d \ll L$, o poço quadrado duplo apresenta “estados moleculares” similares aos estudados anteriormente no curso. O estado par de menor energia (E_0) corresponde ao estado ligante do poço duplo (e é o estado fundamental) enquanto que o estado ímpar de menor energia (E_1) seria um estado anti-ligante. energias dos estados das soluções

Esta analogia com estados moleculares está ilustrada na Figura 10 abaixo. Os dois primeiros estados do poço duplo tem uma clara analogia com estados moleculares “ligantes” e “anti-ligantes”, sendo que o estado fundamental (ligante) tem uma energia E_0 menor do que a de poços isolados. Ou seja, é uma configuração energeticamente mais favorável, o que torna este “estado molecular” estável.

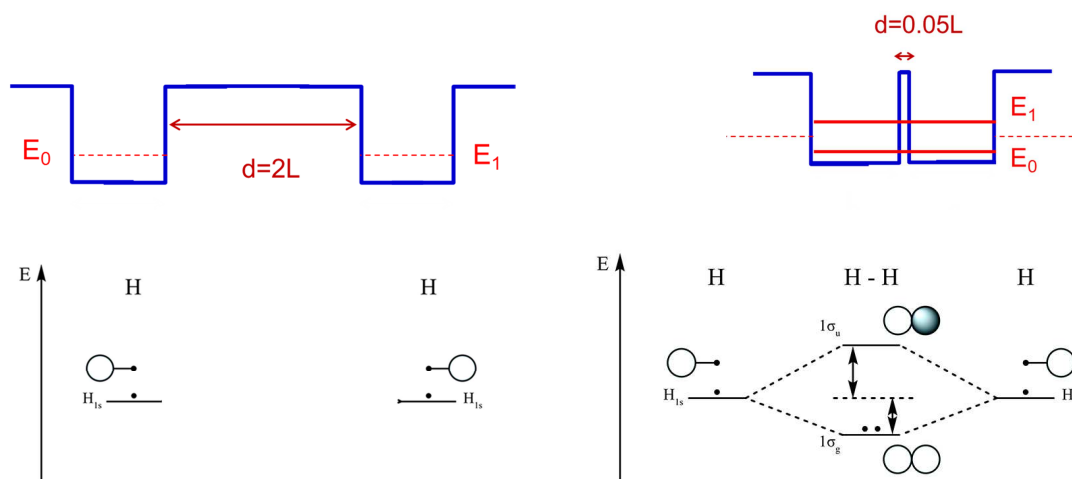


Figura 10: Esquema gráfico das soluções encontradas: para $d=2L$, os estados correspondem a estados de poços isolados. Para $d=0,05L$, os primeiros estados do poço duplo correspondem a estados moleculares “ligantes” e “anti-ligante”, sendo que o estado fundamental (ligante) tem uma energia menor do que a de poços isolados, favorecendo esta configuração.

Poços múltiplos e bandas de energia

A analogia entre poços quadrados e sistemas de muitos átomos pode ser estendida para sistemas com mais poços. Um sistema de *poços quadrados múltiplos* pode ser um modelo útil para estudarmos o comportamento de sistema de vários átomos como moléculas grandes ou mesmo sólidos.

Não cabe aqui apresentar uma solução completa (como fizemos no caso do poço duplo) mas, com base no que aprendemos até aqui, podemos fazer algumas inferências sobre o que ocorre no caso de múltiplos poços quânticos.

A Figura 11 mostra as energias dos primeiros estados de sistemas de múltiplos poços quadrados acoplados no regime em que a distância d entre os poços é muito menor que sua largura L .

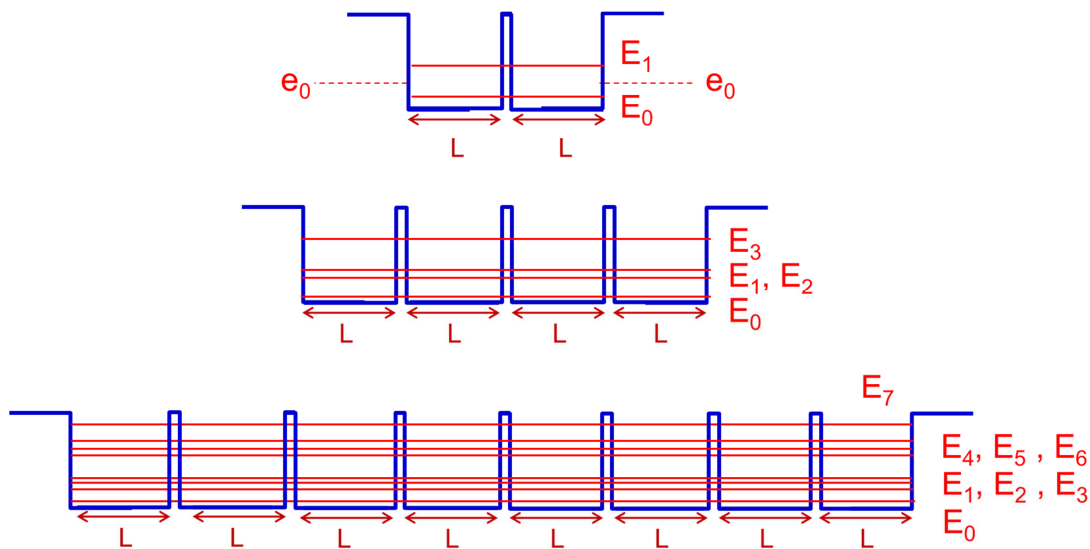


Figura 11: Poços quânticos múltiplos, considerando apenas um nível por poço.

No caso do poço duplo ($N=2$), vimos que as energias dos dois primeiros estados correspondem a *desdobramentos* das energias dos poços isolados (como prevê a Teoria do Orbital Molecular). Ou seja, a energia do estado fundamental E_0 é menor do que a energia do estado fundamental do poço simples e_0 (linha pontilhada no primeiro painel da Figura 11) enquanto que a energia do primeiro estado excitado E_1 é maior que e_0 .

À medida que consideramos sistemas com mais poços, este padrão de desdobramento dos níveis se mantém. Uma forma didática de ver isso é dobrar o número de poços. Um sistema de $N=4$ poços, por exemplo, pode ser visto como um sistema de dois poços duplos separados por uma distância d .

Logo, as energias dos estados do sistema de $N=4$ vão corresponder a desdobramentos dos níveis do poço duplo: cada nível do sistema com de $N=2$ poços vai produzir dois níveis no sistema com $N=4$ poços, um com energia acima e outro com energia abaixo da energia do nível inicial.

De forma análoga, um sistema de $N=8$ poços pode ser considerado como dois sistemas de $N=4$ acoplados, e o mesmo desdobramento ocorre, como ilustrado no último painel da Figura 11. Se iniciamos com um nível por poço, temos agora 8 estados com 8 energias diferentes. Pelos sucessivos desdobramentos, é de se esperar que alguns destes estados tenha energias próximas, formando “aglomerados de níveis” separados por regiões de energia sem nenhum estado (“gaps”), como ilustrado na Figura 11.

Se continuarmos este processo indefinidamente e considerarmos apenas os estados ligados (com $E < 0$), teremos uma situação em que o número de estados em cada um destes aglomerados será grande, formando quase-contínuos de estados genericamente denominados **bandas de energia**.

Isto é ilustrado na Figura 12, que mostra o chamado **Modelo de Kronig-Penney**. Este modelo considera um número infinito de poços quadrados, de modo que teremos um número infinito de estados, agrupados em bandas de energia separadas por gaps (regiões sem estados). Este modelo é bastante ilustrativo para descrever cadeias grandes de átomos (como polímeros) por exemplo.

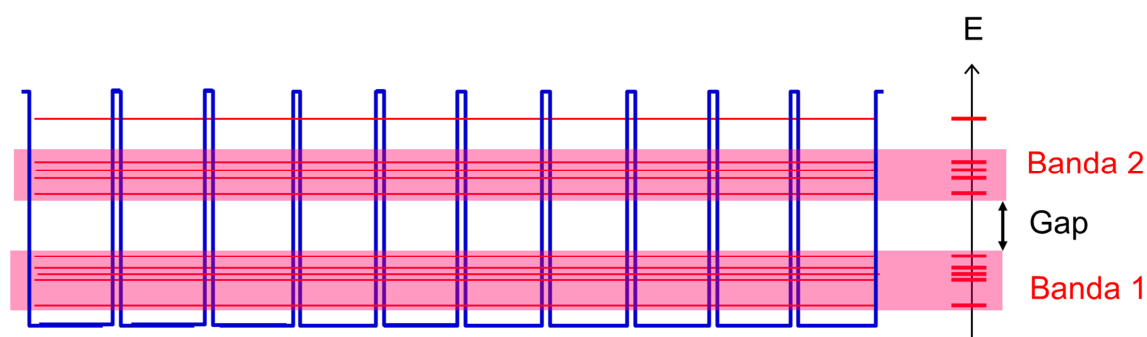


Figura 12: Modelo de Kronig-Penney com infinitos poços quadrados.

O que veremos a seguir:

Veremos na próxima aula que a presença de bandas de energia é uma característica de sólidos cristalinos, formando a chamada **estrutura de bandas** do material. A estrutura de bandas e, mais importante, *como* essas bandas são ocupadas vão definir propriedades do material como a condutividade elétrica, por exemplo.