Aula 10 – Texto de apoio
Níveis de energia do poço quadrado

Prof. Luis Gregório Dias

Introdução

Neste texto, vamos revisar como obtemos os níveis de energia do poço quadrado finito através da solução da Equação de Schrödinger.

Poço quadrado finito

O potencial do poço quadrado finito é dado por:

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

Equação 1

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

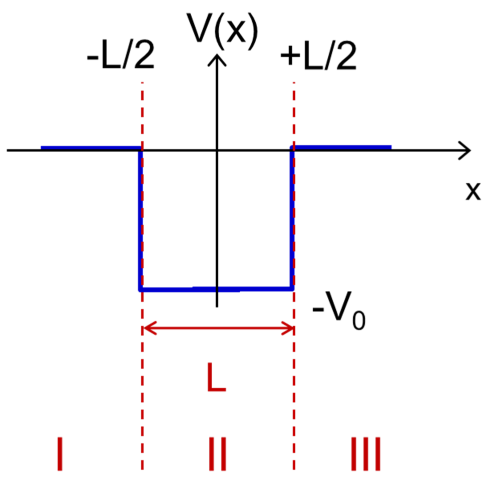

Figura 1: Poço quadrado finito.

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 transcedental cujas soluções serão as energias E_n dos níveis discretos.

Nas regiões I (x<-L/2) e III (x>L/2) o potencial é nulo (ou seja, V(x)=0). Já na região II (-L/2< x<+L/2), o potencial é negativo ($V(x)=-V_0$), formando um poço de potencial. Com isso, podemos escrever a Equação de Schrödinger independente do tempo para as 3 regiões na forma:

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região I} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - V_0\Psi(x) = E\Psi(x) & \text{Região II} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região III} \end{cases}$$

Equação 2

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

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região I} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = (E+V_0)\Psi(x) & \text{Região II} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) & \text{Região III} \end{cases}$$

Equação 3

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

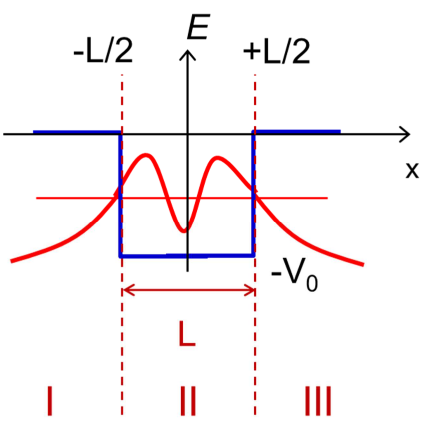

Figura 2: Energia dos estados ligados.

Neste caso, fica claro que $E+V_0$ no lado direito da equação da região II é um *número positivo* já que $E<0$ é necessariamente *negativo* (E=-|E|) mas seu módulo é menor que V0 ($|E|<V_0$). Logo:

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

Podemos então definir as quantidades positivas α(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, II e III ficam mais simples:

$$\begin{cases} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = +\alpha(E)^2\Psi(x) & \text{Região I} \\ \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -k(E)^2\Psi(x) & \text{Região II} \\ \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = +\alpha(E)^2\Psi(x) & \text{Região III} \end{cases}$$

Equação 5

Neste formato, fica mais claro qual deve ser o formato das soluções em cada região. Nas regiões I e III 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 na região II procuramos uma solução 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 III, é necessário descartar as soluções exponenciais que divergem (vão a infinito) para x→±∞. 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 fica:

$$\begin{cases} \Psi(x) = A_{\mathrm{I}} e^{+\alpha x} & x < -L/2 \\ \Psi(x) = a_{\mathrm{II}} \cos kx + b_{\mathrm{II}} \mathrm{sen} kx & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ \Psi(x) = B_{\mathrm{III}} e^{-\alpha x} & x > L/2 \end{cases}$$

Equação 6

onde as constantes $A_{\mathrm{I}}, a_{\mathrm{II}}, b_{\mathrm{II}}, B_{\mathrm{III}}$ 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 1 é simétrico em relação à origem (x=0) do sistema de coordenas 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 poço), ela facilita bastante o cálculo das funções de onda,

Isto porque 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 iniciar aqui no espectro das soluções pares. O caso de soluções ímpares é completamente análogo.

Impondo que a solução é par ou ímpar, reduzimos o número de constantes independentes mostrados na Equação 6. Isto por que, se $\Psi(-x) = \pm\Psi(x)$, a função na região II deve ser par/ímpar e os coeficientes das regiões I e III estão conectados. No caso de soluções pares, temos $\Psi(-x) = +\Psi(x)$, ou seja:

$$\begin{cases} a_{\mathrm{II}} \cos(-kx) + b_{\mathrm{II}} \mathrm{sen}(-kx) = a_{\mathrm{II}} \cos kx + b_{\mathrm{II}} \mathrm{sen} kx \\ B_{\mathrm{III}} e^{-\alpha(-x)} = A_{\mathrm{I}} e^{+\alpha x} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} b_{\mathrm{II}} = 0 \\ B_{\mathrm{III}} = A_{\mathrm{I}} \end{cases}$$

Equação 7

Logo, as soluções pares são da forma:

$$\begin{cases} \Psi_{\mathrm{I}}(x) &=& A_{\mathrm{I}} e^{+\alpha x} \text{ para } x < -L/2 \\ \Psi_{\mathrm{II}}(x) &=& a_{\mathrm{II}} \cos kx \text{ para } -L/2 \leq x \leq L/2 \\ \Psi_{\mathrm{III}}(x) &=& A_{\mathrm{I}} e^{-\alpha x} \text{ para } x > L/2 \end{cases}$$

Equação 8: Soluções pares.

Já no caso de soluções ímpares, temos $\Psi(-x) = -\Psi(x)$, ou seja:

$$\begin{cases} a_{\mathrm{II}} \cos(-kx) + b_{\mathrm{II}} \mathrm{sen}(-kx) = -a_{\mathrm{II}} \cos kx - b_{\mathrm{II}} \mathrm{sen} kx \\ B_{\mathrm{III}} e^{-\alpha(-x)} = -A_{\mathrm{I}} e^{+\alpha x} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_{\mathrm{II}} = 0 \\ B_{\mathrm{III}} = -A_{\mathrm{I}} \end{cases}$$

Equação 9

Logo, as soluções ímpares são da forma:

$$\begin{cases} \Psi_{\mathrm{I}}(x) &= A_{\mathrm{I}} e^{+\alpha x} \text{ para } x < -L/2 \\ \Psi_{\mathrm{II}}(x) &= b_{\mathrm{II}} \mathrm{sen} kx \text{ para } -L/2 \leq x \leq L/2 \\ \Psi_{\mathrm{III}}(x) &= -A_{\mathrm{I}} e^{-\alpha x} \text{ para } x > L/2 \end{cases}$$

Equação 10: Soluções ímpares.

Em ambos os casos, temos apenas duas constantes a serem determinadas. Estas podem ser obtidas impondo a continuidade de $\Psi(x)$ e $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ nos pontos $x = \pm\frac{L}{2}$. Como a solução é par ($\Psi(-x) = +\Psi(x)$), basta escolher o lado positivo.

Imposição da continuidade da função de onda e sua derivada

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

$$\Psi_{\mathrm{II}}(L/2) = \Psi_{\mathrm{III}}(L/2) \Rightarrow a_{\mathrm{II}} \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = A_{\mathrm{I}} e^{-\frac{\alpha L}{2}}$$

Equação 11

$$\left.\frac{d\Psi_{\mathrm{II}}}{dx} = \frac{d\Psi_{\mathrm{III}}}{dx}\right|_{x=\frac{L}{2}} \Rightarrow -k a_{\mathrm{II}} \mathrm{sen}\left(\frac{kL}{2}\right) = -\alpha A_{\mathrm{I}} e^{-\frac{\alpha L}{2}}$$

Equação 12

Dividindo a Equação 12 pela Equação 11, obtemos:

$$\boxed{k(E) \tan\left(\frac{k(E)L}{2}\right) = \alpha(E)}$$

Equação 13: Eq transcedental das soluções pares.

Esta é a Equação Transcedental para determinar o espectro de soluções pares do poço quadrado. Isto significa que as energias *E* dos níveis devem satisfazer os dois lados da Equação 13 (lembrando que α(E) e k(E) são funções de *E*, dadas na Equação 4.

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

$$\Psi_{II}(L/2) = \Psi_{III}(L/2) \Rightarrow b_{II}\text{sen}\left(\frac{kL}{2}\right) = -A_I e^{-\frac{\alpha L}{2}}$$

Equação 14

$$\frac{d\Psi_{II}}{dx} = \frac{d\Psi_{III}}{dx}\bigg|_{x=\frac{L}{2}} \Rightarrow +kb_{II}\cos\left(\frac{kL}{2}\right) = +\alpha A_I e^{-\frac{\alpha L}{2}}$$

Equação 15

Dividindo a Equação 14 pela Equação 15, obtemos:

$$\boxed{\alpha(E)\tan\left(\frac{k(E)L}{2}\right) = k(E)}$$

Equação 16

Esta é a Equação Transcedental para determinar o espectro de soluções ímpares do poço quadrado. Isto significa que as energias *E* dos níveis correspondentes devem satisfazer os dois lados da Equação 16 (lembrando novamente que α(E) e k(E) são funções de *E*, dadas na Equação 4.

Solução das Eq. Transcedentais pelo método gráfico.

Um outro modo de escrever as Equações Transcedentais é na seguinte forma:

$$\boxed{f_p(E) = k(E)\tan\left(\frac{k(E)L}{2}\right) - \alpha(E) = 0}$$
$$\boxed{f_i(E) = \alpha(E)\tan\left(\frac{k(E)L}{2}\right) - k(E) = 0}$$

Equação 17

onde $f_p(E)$ e $f_i(E)$ correspondem às soluções pares e ímpares, respectivamente.

Aqui, procuramos as energias *E* que correspondem aos zeros das funções $f_p(E)$ e $f_i(E)$. Este é um modo mais eficiente de determinar as soluções E_n que satisfazem a equações transcedentais.

Podemos encontrar as soluções pelo método gráfico: fazemos um gráfico de $f_p(E)$ e $f_i(E)$ (usando, por exemplo, softwares como *Mathematica*, uma planilha Excel, ou o site *Wolfram Alpha*) e procuramos os zeros. Isto é mostrado na Figura 3 abaixo.

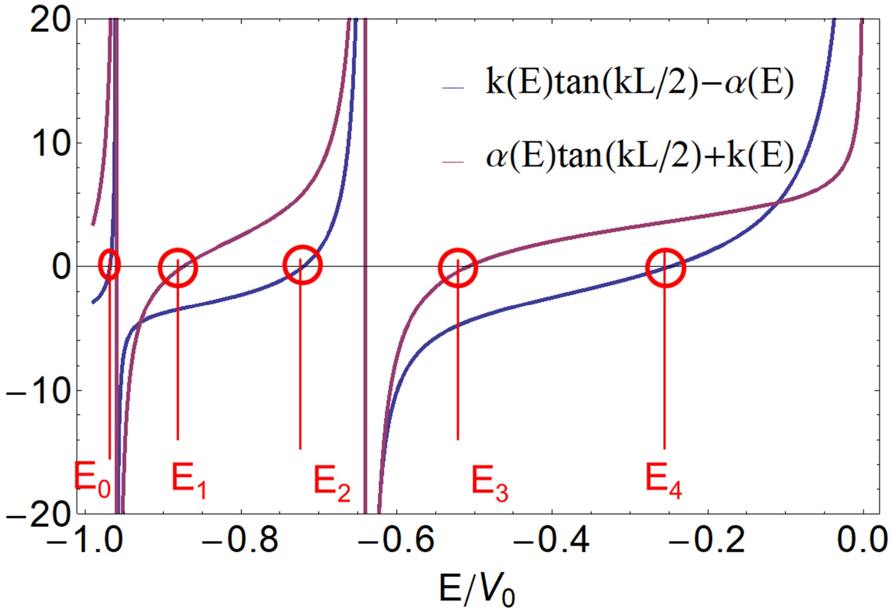

Figura 3: Resolvendo as Equações Transcedentais pelo método gráfico