9: Poço quadrado unidimensional infinito

Este é o problema mais simples envolvendo um sistema localizado. Uma partícula move-se livremente ao longo do eixo x, exceto pelo fato de que, nas posições $x = 0$ e $x = a$, existem paredes impenetráveis: exige-se, isto é, que a probabilidade de a partícula estar fora do intervalo $0 \leq x \leq a$ seja estritamente 0. Formalmente isto se realiza exigindo que a função de onda da partícula seja nula nas paredes, que podem ser consideradas infinitamente espessas. Portanto, $\psi(x) = 0$ para $x \geq a$ e para $x \leq 0$.

Procuremos os estados estacionários. Na região interna às paredes, temos

$$-\hbar^2 \frac{}{2m\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x)} \tag{52}$$

onde E é um número positivo ou nulo. (O “fundo do poço” é o ponto de energia zero, por definição). A Eq.(52) pode ser reescrita como

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) \tag{53}$$

e, introduzindo

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \tag{54}$$

temos

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x) \tag{55}$$

Esta é uma equação diferencial bem conhecida. Sua solução geral é:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx. \tag{56}$$

Temos, adicionalmente, as condições de contorno

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \tag{57}$$

Para satisfazer $\psi(0) = 0$, basta tomar $B = 0$, pois o seno se anula automaticamente em $x = 0$. Então, antes de usar a segunda condição de contorno, temos

$$\psi(x) = A \sin kx \tag{58}$$

A segunda condição de contorno exige que

$$A \sin ka = 0 \tag{59}$$

e sabemos que o seno se anula em qualquer arco da forma $n\pi$, com n inteiro qualquer. Logo, devemos ter

$$ka = n\pi \tag{60}$$

ou seja, k tem seus valores restritos aos da forma

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \tag{61}$$

onde acrescentamos um índice a k para maior clareza. Em suma, as soluções da equação de Schrödinger (52) que satisfazem as condições de contorno (57) são

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{62}$$

com $n = 0, 1, 2 \ldots$.[9]

Note-se que é a condição de a função de onda se anular em $x = a$ que restringe os valores de k, e portanto os valores da energia , já que

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2} \ . \tag{63}$$

Diferentemente do que acontece na física clássica, a energia não varia continuamente: do valor E_n passa-se, a seguir, ao valor E_{n+1}, e

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}\left[(n+1)^2 - n^2\right] = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}(2n+1) \tag{64}$$

Temos, isto é, um espectro discreto para a energia. Espectros discretos para a energia estão sempre ligados ao fato de o sistema ser localizado, isto é, ter localização restrita a uma parte finita do espaço. Sistemas que podem estar em toda a parte, como partículas livres, têm espectro contínuo.

É útil normalizar as funções de onda: os postulados interpretativos ficam mais simples, quando isto é feito. Para tanto, vamos exigir que

$$\int_0^a dx|\psi_n(x)|^2 = 1 \qquad (65)$$

ou

$$|K|^2 \int_0^a dx \sin^2 \frac{n\pi x}{a} = 1 \qquad (66)$$

Usando a relação

$$\sin^2 \frac{n\pi x}{a} = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{2n\pi x}{a}\right)$$

obtemos

$$\frac{|K|^2}{2}\int_0^a dx\left(1 - \cos\frac{2n\pi x}{a}\right) = \frac{|K|^2}{2}\left\{a - \int_0^a dx \cos\frac{2n\pi x}{a}\right\} = \frac{|K|^2}{2}a \qquad (67)$$

Logo, $|K|^2 = \frac{2}{a}$ e podemos escolher $K = \sqrt{\frac{2}{a}}$, já que a fase da função de onda é arbitrária. Assim,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a} \qquad (68)$$

leitor não terá dificuldades em mostrar o resultado mais geral:

$$\int_0^a dx \psi_n^*(x)\psi_m(x) = \delta_{nm} \qquad (69)$$

que exibe a ortogonalidade das funções de onda correspondentes a energia s diferentes.

A função de onda completa para esses estados estacionários é então

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{70}$$

com $E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$.

Estados não estacionários, na realidade estados quaisquer, podem ser obtidos por combinações lineares desses $\psi_n(x,t)$.