Poço de potencial retangular infinito

Vimos anteriormente que para potencial independente do tempo $V(x)$, as soluções da equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

são conhecidas como estados estacionários e dadas por

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

onde E é a energia total da partícula e $\psi(x)$ satisfaz a chamada equação de Schrödinger independente do tempo

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi,$$

em que $E \geqslant V_{min}$ para que Ψ possa ser normalizável.

Também vimos que os estados estacionários possuem dispersão de energia nula

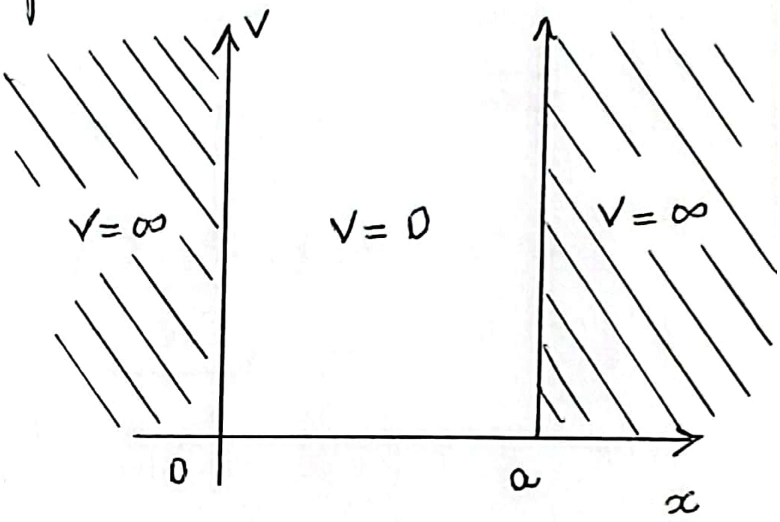
$$\sigma_E^2 = \overline{E^2} - \overline{E}^2 = 0$$

A partir de agora, vamos resolver a eq. de Schrödinger independente do tempo para uma série de potenciais unidimensionais de interesse.

—— // ——

Tomemos então o seguinte potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & x < 0 \text{ e } x > a \end{cases}$$



Estamos interessados em soluções de energia finita $E < \infty$, o que implica que a função de onda $\psi(x)$ deve ser nula nas regiões $x < a$ e $x > a$ onde $V = \infty$:

$$\psi(x<0) = \psi(x>a) = 0$$

As soluções $\psi(x)$ que buscamos também devem ser funções contínuas de x, de modo que

$$\psi(x=0) = \psi(x=a) = 0$$

(condições de contorno)

Quando o potencial é finito (o que não é o caso aqui), também é possível encontrar soluções em que a derivada $\psi'(x) = \frac{d\psi}{dx}$ também é contínua. ③

Perceba que no presente caso, como $V_{min} = 0$, as soluções procuradas possuem energia positiva $E \geq 0$.

Na região $0 \leq x \leq a$, onde $V(x) = 0$, temos então

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\equiv K^2}\psi = -K^2\psi,$$

onde $K \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ e $E \geq 0$.

A solução geral da eq. de Schrödinger independente do tempo é então

$$\psi(x) = A\sin(Kx) + B\cos(Kx)$$

Aplicando a condição de contorno em $x = 0$:

$$\psi(x=0) = 0 = B$$

de modo que

$$\psi(x) = A\sin(Kx)$$

Aplicando a segunda condição de contorno

$$\psi(x=a) = 0 = A\sin(Ka) \Rightarrow Ka = n\pi \,, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Portanto, para satisfazer as condições de contorno do problema, os números de onda K devem ser discretos

$$K_n = \frac{n\pi}{a} \,, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Tal discretização, por outro lado, leva imediatamente à quantização da energia da partícula quântica sujeita ao potencial V(x), já que

$$K_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{\hbar^2 K_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2}}$$

As soluções da eq. de Schrödinger independente do tempo podem então ser rotuladas por um índice natural n

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \,, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Portanto, a função de onda $\Psi_n(x,t)$ é dada por

$$\Psi_n(x,t) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

As constantes A_n podem ser obtidas via condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_n \, dx = 1$$

Dessa forma, temos que

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) \, dx = A_n^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx$$

Fazendo a mudança de variável $u = \frac{n\pi}{a} x$, temos

$$1 = A_n^2 \left(\frac{a}{n\pi}\right) \int_0^{n\pi} \sin^2 u \, du$$

$$= A_n^2 \left(\frac{a}{n\pi}\right) \frac{1}{2} \left[u - \sin u \cos u\right]_0^{n\pi} = A_n^2 \left(\frac{a}{n\pi}\right)\left(\frac{n\pi}{2}\right) =$$

$$= A_n^2 \frac{a}{2} \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \forall \, n$$

Dessa forma, temos na região $0 \leq x \leq a$:

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots}$$

e

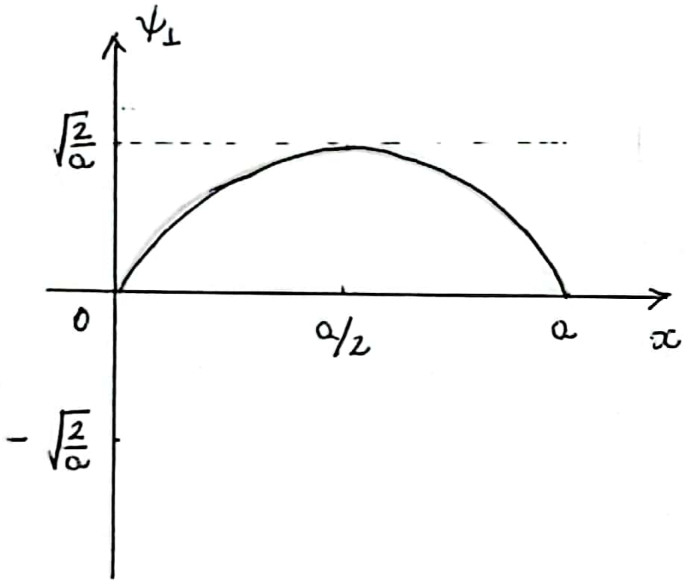
$$\boxed{\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \exp\left(-i \frac{\hbar}{2m} \frac{n^2\pi^2}{a^2} t\right)}$$

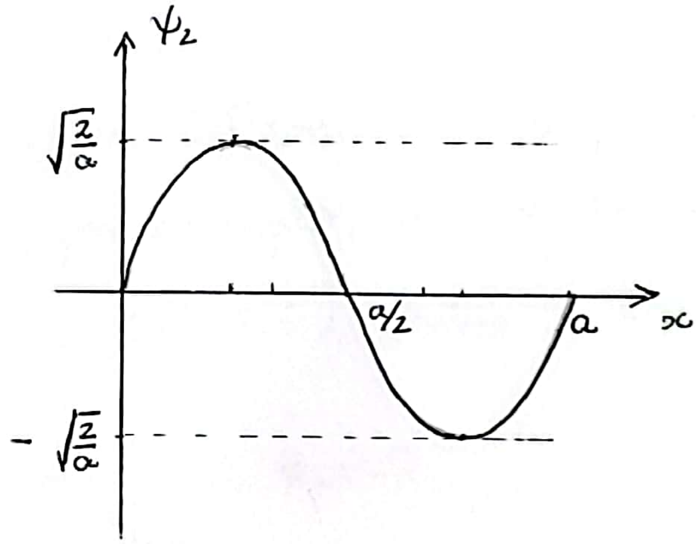
Por exemplo

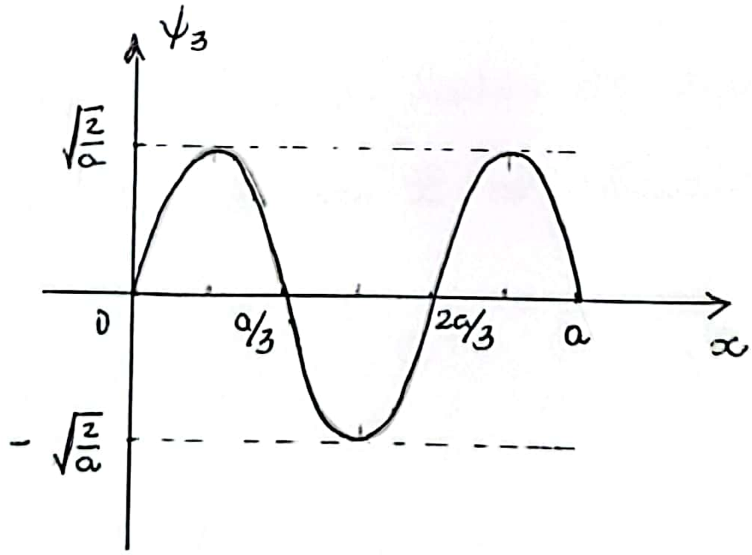
$$\psi_1(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$\psi_2(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$$\psi_3(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$







O estado quântico mais geral que se pode construir na região $0 \leq x \leq a$ é uma combinação linear das autofunções $\Psi_n(x,t)$

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x,t)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) e^{-i \frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2} t},$$

onde os coeficientes c_n devem ser determinados a partir das condições iniciais. Tome, por exemplo, o caso em que a função de onda em $t=0$ é $\Psi(x,0)$. Então

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

Multipliquemos ambos os lados da equação anterior por $\psi_m^*(x)$ e integremos em x no intervalo $0 \leq x \leq a$

$$\int_0^a \psi_m^*(x) \Psi(x,0)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_0^a \psi_m^*(x) \psi_n(x)\, dx$$

com $\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$

Logo

$$\int_0^a \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = \left(\frac{2}{a}\right)\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

Prove que para $m \neq n$:

$$\int_0^a \psi_m^*(x)\,\psi_n(x) = \frac{1}{\pi}\left\{\frac{\sin[(m-n)\pi]}{m-n} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{m+n}\right\} = 0$$

Já para $m = n$:

$$\int_0^a \psi_m^*(x)\,\psi_n(x) = \frac{2}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = 1$$

Portanto, podemos escrever

$$\int_0^a \psi_m^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

Na linguagem de Álgebra Linear, podemos dizer que o conjunto de funções

$$\{\psi_n(x),\ n = 1, 2, 3, \ldots\}$$

forma uma base para o espaço de funções de quadrado integrável no intervalo $0 \leq x \leq a$. Tal base é ortonormal segundo o produto escalar

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle \equiv \int_0^a \psi_m^*(x)\, \psi_n(x)\, dx$$

Portanto

$$\int_0^a \psi_m^*(x)\, \Psi(x,0)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \, \delta_{mn} = c_m$$

Ou seja, os coeficientes c_n podem ser determinados através de

$$c_n = \int_0^a \psi_n^*(x)\, \Psi(x,0)\, dx$$

Perceba que o fato de $\{ \psi_n(x),\ n = 1, 2, \dots \}$ formar uma base ortonormal do espaço de funções de quadrado integrável, isto é, funções que satisfazem em $0 \leq x \leq a$

$$\int_0^a |f(x)|^2 dx < \infty ,$$

justifica nossa afirmação de que a função de onda mais geral é uma combinação linear das autofunções $\Psi_n(x,t)$.

Tome, por exemplo

$$\Psi(x,0) = -\sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) = -\psi_1(x)$$

Então

$$c_n = \underbrace{-\int_0^a \psi_m^*(x)\,\psi_1(x)\,dx}_{=\,\delta_{n1}} = \begin{cases} 0, & n \neq 1 \\ -1, & n = 1 \end{cases}$$

Logo

$$\Psi(x,t) = -\psi_1(x)\,e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} = -\sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)e^{-i\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}$$

———//———

Verifiquemos explicitamente agora a validade do princípio de incerteza de Heisenberg para os estados estacionários da partícula num poço de potencial infinito. Assumiremos que a partícula se encontra em um dos infinitos estados $\Psi_n(x,t)$, ou seja

$$\Psi(x,t) = \Psi_n(x,t) \quad \text{p/ algum } n$$

A posição média da partícula é dada por

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t)\, dx$$

$$= \left(\frac{2}{a}\right) \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \left(\frac{2}{a}\right) \frac{a^2}{n^2\pi^2} \int_0^{n\pi} u \sin^2 u\, du \quad , \quad \text{com} \quad u = \frac{n\pi}{a} x$$

$$= \frac{2a}{n^2\pi^2} \frac{1}{4} \Big[u^2 + \sin^2 u - u \sin(2u)\Big]_0^{n\pi}$$

$$= \frac{a}{2n^2\pi^2} (n^2\pi^2) = \frac{a}{2}$$

Já a média de x^2

$$\overline{x^2} = \left(\frac{2}{a}\right) \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx$$

$$= \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{n\pi}\right)^3 \int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u\, du \quad , \quad u = \frac{n\pi}{a} x$$

$$= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left[\frac{u^2}{2}(u - \sin u \cos u) + \frac{1}{8}\Big(\sin(2u) - 2u\cos(2u)\Big) - \frac{u^3}{3}\right]_0^{n\pi}$$

$$= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left(\frac{n^3\pi^3}{2} - \frac{n\pi}{4} - \frac{n^3\pi^3}{3}\right) = \frac{2a^2}{n^3\pi^3}\left(\frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n\pi}{4}\right)$$

$$= a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2}\frac{1}{n^2\pi^2}\right)$$

Portanto

$$\sigma_x^2 = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2}\frac{1}{n^2\pi^2}\right) - \frac{a^2}{4}$$

$$\sigma_x^2 = \frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

Tratemos agora o momento linear p_x

$$\overline{p_x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi_n(x,t)\,dx$$

$$= -i\hbar\left(\frac{2}{a}\right)\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\frac{d}{dx}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

$$= -i\hbar\left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{n\pi}{a}\right)\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

$$= -i\hbar\left(\frac{2n\pi}{a^2}\right)\left(\frac{a}{n\pi}\right)\int_0^{n\pi}\sin u\cos u\,du$$

$$= -i\hbar\left(\frac{2}{a}\right)\left.\frac{\sin^2 u}{2}\right|_0^{n\pi} = 0$$

Esse resultado pode ser compreendido se interpretarmos $\Psi_n(x,t)$ como representando uma onda estacionária na região $0 \leqslant x \leqslant a$, resultante da interferência de ondas planas de partícula livre de mesma amplitude, mas se propagando em sentidos opostos.

$$\overline{p_x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x,t)\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x}\right)\Psi_n(x,t)\,dx$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{2}{a}\right)\left(-\frac{n^2\pi^2}{a^2}\right)\underbrace{\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx}_{=\frac{a}{2}}$$

$$= \hbar^2\frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

Portanto

$$\sigma_{p_x}^2 = \overline{p_x^2} - \overline{p_x}^2 = \hbar^2\frac{n^2\pi^2}{a^2},$$

de modo que

$$\sigma_x^2\sigma_{p_x}^2 = \hbar^2\frac{n^2\pi^2}{a^2}\left(\frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}\right), \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$= \hbar^2\left(\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2}\right) \geqslant \hbar^2\left(\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}\right)$$

$$\geqslant \hbar^2\left(\frac{3^2}{12} - \frac{1}{2}\right) = \hbar^2\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar^2}{4}$$

Logo, para todos os autoestados do poço infinito vale que

$$\sigma_{p_x}\sigma_x \geqslant \frac{\hbar}{2}$$