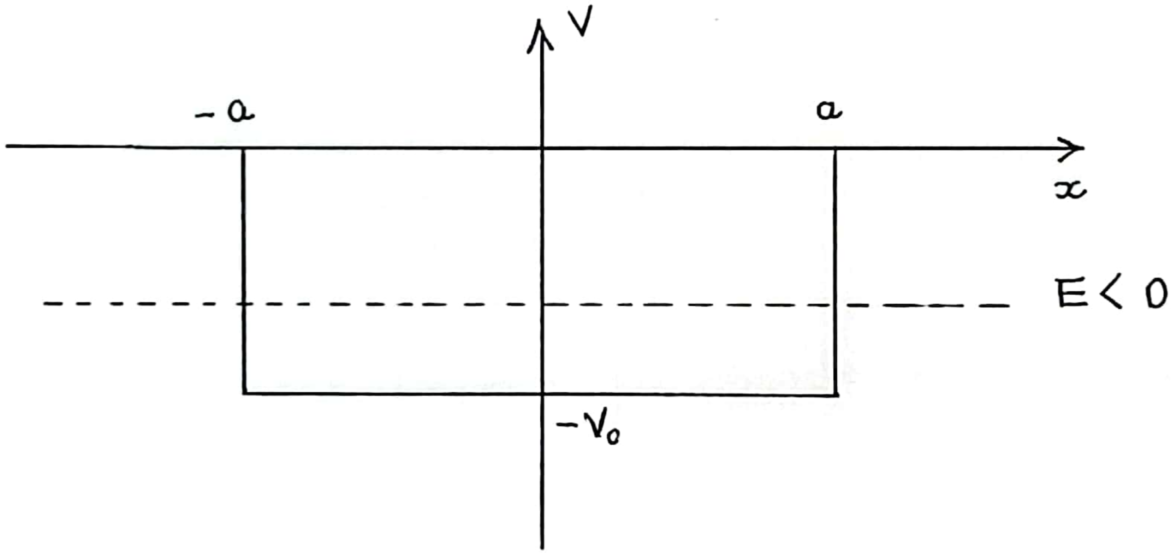
Poço de potencial retangular finito

Caso 1: estados ligados ($E < 0$)

A energia potencial de interesse é agora dada por

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 \,, & |x| \leqslant a \\ 0 \,, & |x| > 0 \end{cases}$$



Ou seja, um potencial retangular de profundidade $-V_0$ na região $-a \leqslant x \leqslant a$. Começaremos analisando as soluções da equação de Schrödinger para estados estacionários de energia $E < 0$. Essas soluções correspondem a estados ligados e são bastante distintas das soluções de partícula livre que possuem $E > 0$.

Para o potencial independente do tempo em questão, temos três regiões distintas: $x < -a$, $-a \leqslant x \leqslant a$ e $x > a$.

→ Região $x < -a$:

A eq. de Schrödinger independente do tempo nessa região é dada por

"kappa"

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi \;, \quad \text{com} \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \;, \; E<0$$

A solução geral em $x<-a$ é então

$$\psi(x) = A e^{\kappa x} + B e^{-\kappa x}$$

Entretanto, como estamos procurando por funções $\psi(x)$ normalizáveis

$$\lim_{x\to-\infty} \psi(x) < \infty \implies B = 0$$

Portanto

$$\psi(x<-a) = A e^{\kappa x}$$

→ Região $-a \leqslant x \leqslant a$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(-V_0 - E) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0) = -l^2\psi$$

com $l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$, $-V_0 \leqslant E < 0$

a solução geral na região $-a \leqslant x \leqslant a$ é então

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx)$$

→ Região $x > a$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = +K^2\psi$$

Solução geral:

$$\psi(x) = E\, e^{Kx} + F\, e^{-Kx}$$

E como $\psi(x)$ deve ser finita em $x > a$:

$$\lim_{x\to\infty}\psi(x) < \infty \implies E = 0$$

Portanto

$$\psi(x>a) = F\, e^{-Kx}$$

Resumindo, até agora temos

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{kx} & , x \leqslant -a \\ C \sin(lx) + D\cos(lx) & , -a \leqslant x \leqslant a \\ F e^{-kx} & , x \geqslant a \end{cases}$$

—————//—————

É interessante notar que o potencial independente do tempo $V(x)$ do nosso problema em questão possui paridade bem definida. Mais precisamente, $V(x)$ é par na troca $x \longleftrightarrow -x$:

$$V(-x) = V(x)$$

Tomemos então, para um potencial par $V(x)$, uma solução $\psi(x)$ da equação de Schrödinger independente do tempo, ou seja, $\psi(x)$ satisfaz

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

a partir dessa equação, façamos a troca $x \longrightarrow -x$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(-x)^2}\psi(-x) + V(-x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

Usando o fato de que o potencial é par e que

$$\frac{d}{d(-x)} = -\frac{d}{dx} \Rightarrow \frac{d^2}{d(-x)^2} = \frac{d}{dx^2},$$

podemos escrever a seguinte equação para $\psi(-x)$

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

que nada mais é do que a própria equação de Schrödinger independente do tempo para o mesmo potencial $V(x)$ associado à solução $\psi(x)$.

A conclusão que chegamos é então que para potenciais $V(x)$ pares, se $\psi(x)$ é solução da eq. de Schrödinger independente do tempo, então $\psi(-x)$ também é solução.

Uma consequência direta desse resultado, juntamente com o princípio de superposição é que para potenciais pares sempre é possível construir soluções da equação de Schrödinger independente do tempo com paridade bem definida, tanto par quanto ímpar

$$\begin{cases} \psi_{par}(x) = \psi(x) + \psi(-x) \\ \psi_{ímpar}(x) = \psi(x) - \psi(-x) \end{cases}$$

Para o problema atual podemos então escrever

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{kx} & , x \leqslant -a \\ C \sin(lx) + D\cos(lx) & , -a \leqslant x \leqslant a \\ F e^{-kx} & , x \geqslant a \end{cases}$$

$$\psi(-x) = \begin{cases} F e^{kx} & , x \leqslant -a \\ -C \sin(lx) + D\cos(lx) & , -a \leqslant x \leqslant a \\ A e^{-kx} & , x \geqslant a \end{cases}$$

Portanto

$$\psi_{par} = \begin{cases} (A+F) e^{kx} = \tilde{A} e^{kx} & , x \leqslant -a \\ 2D\cos(lx) = \tilde{D}\cos(lx) & , -a \leqslant x \leqslant a \\ (A+F) e^{kx} = \tilde{A} e^{-kx} & , x \geqslant a \end{cases}$$

$$\psi_{impar} = \begin{cases} (A-F) e^{kx} = \tilde{B} e^{kx} & , x \leqslant -a \\ 2C\sin(lx) = \tilde{C}\sin(lx) & , -a \leqslant x \leqslant a \\ (F-A) e^{-kx} = -\tilde{B} e^{-kx} & , x \geqslant a \end{cases}$$

com $k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ e $l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$

Daqui por diante, trabalharemos separadamente as soluções pares e ímpares.

→ Soluções pares

A condição de continuidade dessas soluções em $x=-a$ implica que

$$\tilde{A}\, e^{-Ka} = \tilde{D} \cos(la) \qquad (*)$$

A derivada espacial de ψ_{par} é

$$\frac{d\psi_{par}}{dx} = \begin{cases} K\tilde{A}\, e^{Kx}, & x \leqslant -a \\ -l\tilde{D}\sin(lx), & -a \leqslant x \leqslant a \\ -K\tilde{A}\, e^{-Kx}, & x \geqslant a \end{cases}$$

A continuidade dessa derivada em $x=-a$ implica que

$$K\tilde{A}\, e^{-Ka} = -l\tilde{D}\sin(-la) = l\tilde{D}\sin(la) \qquad (**)$$

De $(*)$ e $(**)$, temos que

$$tg(la) = \frac{K}{l} \qquad (***)$$

onde K e l estão definidos pela massa e energia da partícula quântica e pela profundidade do potencial.

Dessa forma, a equação transcendental (***) deve ser usada como uma condição adicional a ser satisfeita pelas possíveis energias E das soluções da equação de Schrödinger.

Definamos duas variáveis auxiliares z e z_0:

$$z \equiv la \quad \text{e} \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}\,,$$

de modo que elas são ambas adimensionais e

$$K^2 + l^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \frac{z_0^2}{a^2}$$

Então

$$(Ka)^2 + (la)^2 = z_0^2 \implies z^2 = z_0^2 - (Ka)^2$$

e

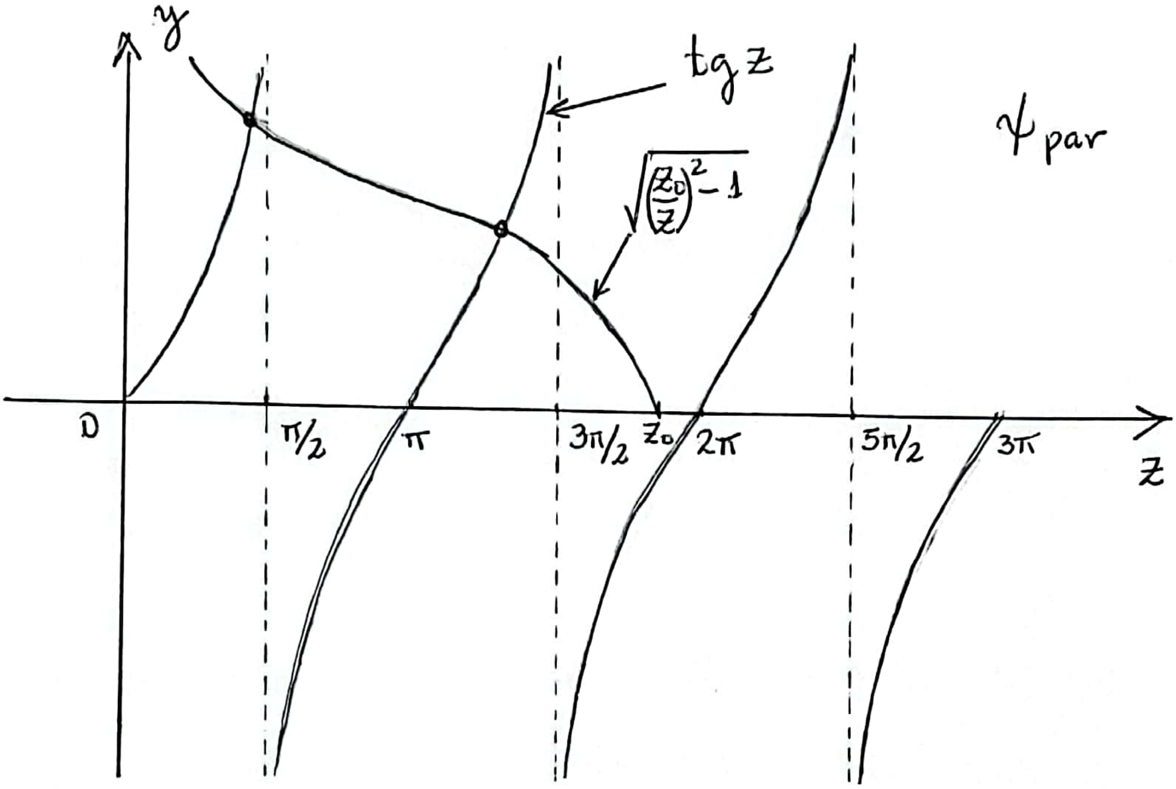
$$l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} < \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} = \frac{z_0}{a} \implies z = la < z_0$$

Dessa forma, (***) pode ser reescrito como

$$la \, tg(la) = Ka$$

$$z \, tg\, z = \sqrt{z_0^2 - z^2} \implies \underbrace{tg\, z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}}_{\text{Eq. transcendental para } z}$$

Solução gráfica da eq. trancendental para z



Os pontos de intersecção entre $tg\, z$ e $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ representam energias possíveis dos estados ligados do poço finito. O número de soluções possíveis depende da profundidade do poço V_0, já que essa variável define a magnitude de z_0.

Tomemos então o limite de poço de profundidade infinita $V_0 \longrightarrow \infty$. Nesse caso, a curva $\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}$ só cruza o eixo z no infinito $(z_0 \rightarrow \infty)$ e as intersecções com $tg\, z$ devem ocorrer em valores em que $y \longrightarrow \infty$, ou seja, em valores z_n dados por:

$$z_n = \frac{n\pi}{2} \quad , \quad \text{com} \quad n = 1, 3, 5, \ldots$$

Portanto

$$z_n^2 = \frac{n^2\pi^2}{4} = l_n^2 a^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E_n + V_0\right) a^2$$

$$E_n + V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2\pi^2}{4a^2}$$

Concluímos então que no limite de poço de potencial com profundidade infinita, as soluções $\psi(x)$ pares para estados estacionários de energia negativa (ligados) são dadas por

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2\pi^2}{(2a)^2} \quad , \quad n = 1, 3, 5, \ldots \quad (\psi_{par})$$

Se você revisar os cálculos originais para poço infinito, se dará conta de que o espectro E_n acima contém só metade dos valores permitidos. A outra metade do espectro discreto deve estar associada às soluções $\psi(x)$ ímpares..

→ Soluções ímpares

Continuidade de $\psi_{\text{ímpar}}$ em $x=-a$:

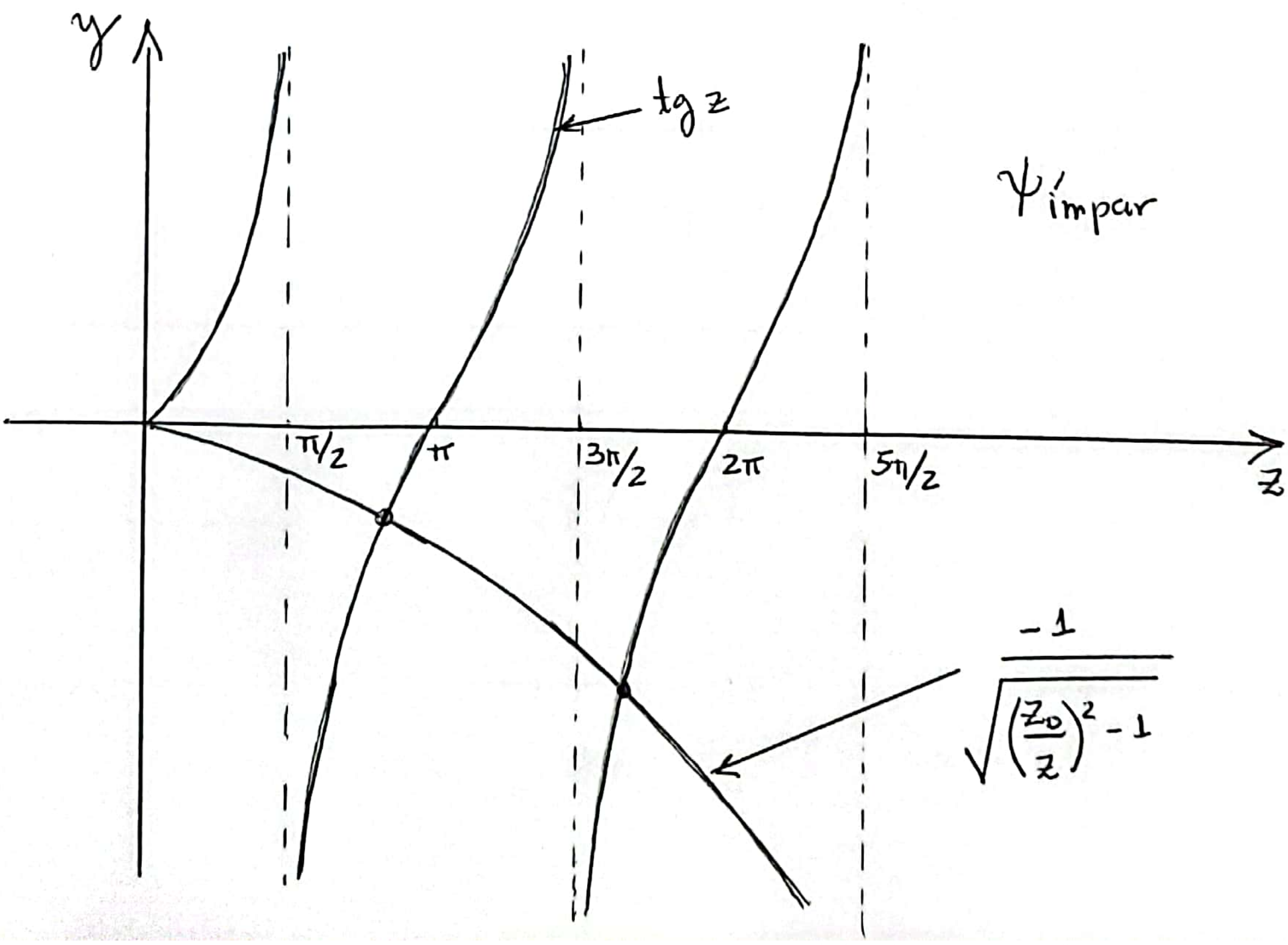
$$\tilde{B}\, e^{-\kappa a} = -\,\tilde{C}\sin(la) \quad (*)$$

Continuidade de $\dfrac{d\psi_{\text{ímpar}}}{dx}$ em $x=-a$:

$$\kappa \tilde{B}\, e^{-\kappa a} = l\,\tilde{C}\cos(la) \quad (**)$$

Dessa forma, temos de $(*)$ e $(**)$

$$-\frac{1}{la}\,\mathrm{tg}(la) = \frac{1}{\kappa a} \Rightarrow \mathrm{tg}\, z = \frac{-1}{\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}}$$



No limite $V_0 \longrightarrow \infty$, temos agora

$$z_n = n \frac{\pi}{2} \quad , \quad n = 2,4,6,\dots$$

Portanto, para $V_0 \longrightarrow \infty$:

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{(2a)^2} \quad , \quad n = 2,4,6,\dots \quad (\psi_{\text{ímpar}})$$

Dessa forma, os espectros $\{E_n\}$ para ψ_{par} e $\psi_{\text{ímpar}}$ juntos são consistentes com nosso cálculo anterior para poço de profundidade infinita $V_0 \longrightarrow \infty$.

Já no caso do poço de profundidade finita V_0, as energias permitidas são dadas pelas soluções das equações trancendentais

$$\boxed{\operatorname{tg} z = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1} \qquad (\psi_{par})}$$

$$\boxed{\operatorname{tg} z = \frac{-1}{\sqrt{\left(\frac{z_0}{z}\right)^2 - 1}} \qquad (\psi_{\text{ímpar}})}$$

com $z_0 = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$, $z = la = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} a$