Física Quântica I / Mecânica Quântica

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 17

Potenciais constantes por partes em 1D. O poço de potencial infinito.

Caraterísticas gerais das soluções da ESIT em 1 dimensão

Potenciais constantes por partes

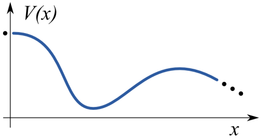
O poço de potencial infinito (confinamento)

- Autoestados de energia
- Espectro de energia
- Funções próprias de energia
- Aspetos qualitativos
- Dependência temporal
- Utilizando a simetria do potencial

Caraterísticas gerais das soluções da ESIT em 1D

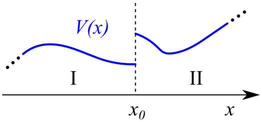
O nosso foco é agora a ESIT de uma partícula in 1D

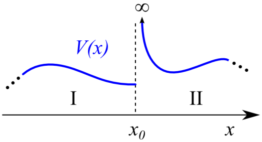
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad \Leftrightarrow \quad \psi''(x) = -\frac{2m\left[E - V(x)\right]}{\hbar^2}\psi(x)$$



Continuidade das soluções da ESIT:

1. $\psi(x)$ é sempre contínua ($|\psi(x)|^2$ tem de ser única em cada ponto).
2. Quando $V(x)$ tem uma descontinuidade finita em x_0:
   - $\psi'(x)$ é contínua em x_0.
3. Quando $V(x)$ tem uma descontinuidade infinita em x_0:
   - $\psi'(x)$ tem um descontinuidade finita em x_0.



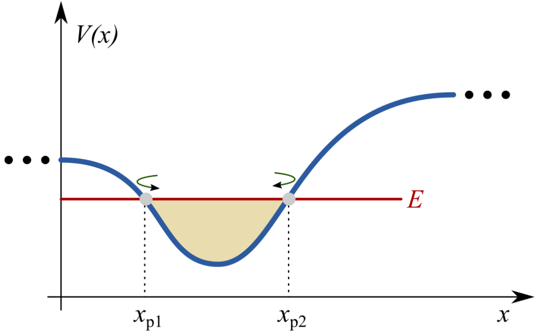


Continuidade das soluções numa descontinuidade do potencial

- A função de onda $\psi(x)$ é sempre contínua.
- O tipo de descontinuidade de $V(x)$ determina o comportamento de $\psi'(x)$.

O 1º passo na solução de qualquer ESIT concreta é sempre analisar do ponto de vista clássico.

$$\mathcal{H}(p,x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) = E$$ (Hamiltoniano clássico = energia da partícula)



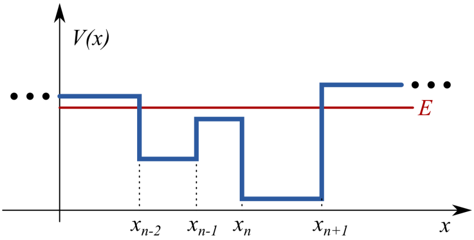
Para uma dada energia E, classicamente

$$\frac{p^2}{2m} = E - V(x) \xrightarrow{\text{como } p^2/2m \geq 0} E \geq V(x).$$ (região $x_1 < x < x_2$ na fig. acima)

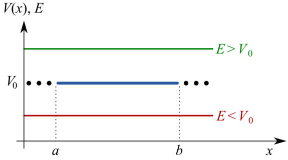
Regiões classicamente proibidas/inacessíveis

São todas as regiões do espaço (x) onde a condição $E \geq V(x)$ é violada. Os pontos x_p tais que $E = V(x_p)$ chamam-se pontos de viragem clássicos (EN: classical turning points).

Potenciais constantes por partes



Se $V(x) = V_0$ (constante) numa região finita $a \le x \le b$:



$$\psi''(x) = -\frac{2m\left[E - V_0\right]}{\hbar^2}\psi(x), \qquad \text{na região} \quad a \le x \le b$$

Para simplificar, introduzimos duas constantes positivas k e λ:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \qquad (\text{se } E > V_0), \qquad \lambda \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \qquad (\text{se } E < V_0)$$

Solução geral da ESIT na região onde $V(x) = V_0$ (constante):

- Se $E > V_0$

$$\psi''(x) = -k^2\psi(x), \qquad \xrightarrow{\text{solução geral}} \qquad \psi(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}$$

- Se $E < V_0$

$$\psi''(x) = \lambda^2\psi(x), \qquad \xrightarrow{\text{solução geral}} \qquad \psi(x) = A\,e^{\lambda x} + B\,e^{-\lambda x}$$

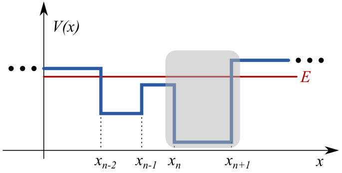
- Se $E = V_0$ (caso especial)

$$\psi''(x) = 0, \qquad \xrightarrow{\text{solução geral}} \qquad \psi(x) = A\,x + B$$

Notemos que, se $E < V_0$ na região $a \le x \le b$:

- essa região é classicamente proibida;
- se $V(x) = V_0$ em todo o espaço, não há soluções físicas com $E < V_0$.

Construção da solução a partir de cada uma das partes



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

- O potencial é constante por partes em regiões conhecidas:

$$V(x) = V_n \quad \text{(const.)}, \qquad x_n < x \le x_{n+1}.$$

- Cada região tem uma ESIT simples:

$$\psi_n''(x) = -\frac{2m\left[E - V_n\right]}{\hbar^2}\psi_n(x), \qquad x_n < x < x_{n+1}.$$

- A solução geral em cada região $x_n < x < x_{n+1}$ é

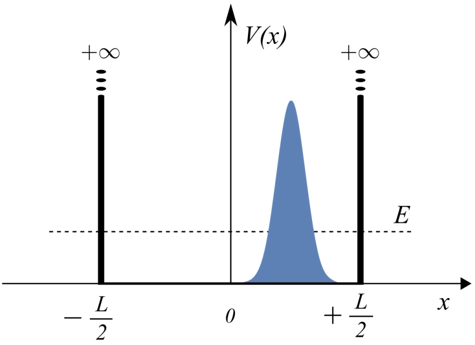
$$\text{se } E > V_n : \qquad \psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x}, \qquad k_n \equiv \sqrt{2m(E - V_n)}/\hbar.$$

$$\text{se } E < V_n : \qquad \psi_n(x) = A_n e^{\lambda_n x} + B_n e^{-\lambda_n x}, \qquad \lambda_n \equiv \sqrt{2m(V_n - E)}/\hbar.$$

- Em cada descontinuidade de $V(x)$ em x_n é necessário impor condições fronteira apropriadas:

numa descontinuidade finita $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ são contínuas $\quad\Longrightarrow\quad \begin{cases} \psi_n(x_n) = \psi_{n-1}(x_n) \\ \psi_n'(x_n) = \psi_{n-1}'(x_n) \end{cases}$

O poço de potencial infinito (confinamento)



$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < L/2 \\ \infty, & |x| \geq L/2 \end{cases}$$

I. Solução geral em cada uma das 3 regiões

$$\psi''(x) = -\frac{2m[E-V]}{\hbar^2}\psi(x)$$

Região I $(x \leq -L/2,\ V(x) = +\infty)$:

- Como $E < V$, a solução geral é
$$\psi_I(x) = \cancel{Ae^{-\lambda x}} + Be^{\lambda x}.$$
- Só é normalizável se $A = 0$.
- Mas como
$$\lambda = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar \xrightarrow{V\to\infty} \infty$$

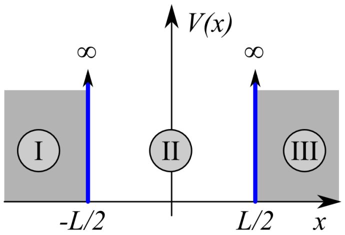
então $$\psi_I(x) = 0.$$

Região III $(x \geq L/2,\ V(x) = +\infty)$:

$$\psi_{III}(x) = 0$$ (análogo à região I).

Região II $(-L/2 \leq x \leq L/2,\ V(x) = 0)$:

$$\psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$



$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < L/2 \\ \infty, & |x| \geq L/2 \end{cases}$$

Definição das constantes acessórias:

$$\lambda \equiv \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} = +\infty$$

$$k \equiv \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

O poço de potencial infinito (condições fronteira)

II. Condições de continuidade

- $V(x)$ tem uma descontinuidade infinita em $|x| = L/2$;
- Logo, $\psi'(x)$ será descontínua;
- Mas $\psi(x)$ deve ser contínua.

Continuidade no ponto $x = -L/2$,

$$\psi_I(-\tfrac{L}{2}) = \psi_{II}(-\tfrac{L}{2}) = 0.$$

No ponto $x = +L/2$,

$$\psi_{II}(+\tfrac{L}{2}) = \psi_{III}(+\tfrac{L}{2}) = 0.$$

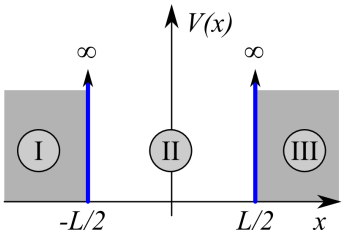
Isto impõe 2 condições para a solução ψ_{II}:

em $x = -\frac{L}{2}$: $\quad \psi_{II}(-\tfrac{L}{2}) = Ae^{-ikL/2} + Be^{ikL/2} = 0$

em $x = +\frac{L}{2}$: $\quad \psi_{II}(+\tfrac{L}{2}) = Ae^{ikL/2} + Be^{-ikL/2} = 0$

A solução destas duas equações para A e B:

- Determina a solução física $\psi_{II}(x)$;
- Determina os valores possíveis de energia E_n.



$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < L/2 \\ \infty, & |x| \geq L/2 \end{cases}$$

Solução geral da ESIT:

$$\psi_I(x) = 0, \qquad \psi_{III}(x) = 0,$$

$$\psi_{II}(x) = \underset{(A=?)}{A}\, e^{ikx} + \underset{(B=?)}{B}\, e^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

III. Energias permitidas

A solução não-trivial do sistema linear

$$\begin{bmatrix} e^{-ikL/2} & e^{ikL/2} \\ e^{ikL/2} & e^{-ikL/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

existe sse o determinante da matriz for nulo:

$$\sin(kL) = 0 \quad \Rightarrow \quad k = k_n \equiv \frac{n\pi}{L} \quad (n \in \mathbb{Z}).$$

Resolvendo para A e B com estes k, e normalizando,

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \qquad n \text{ ímpar}$$

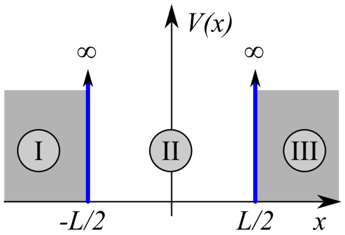
$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \qquad n \text{ par}$$

Nota: $\varphi_{-n}(x)$ e $\varphi_n(x)$ representam o mesmo estado!

cada $n = 1, 2, 3, \ldots$ corresponde a um estado distinto

As energias são quantizadas

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \xrightarrow{\text{como } k_n \text{ é quantizado}} E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$



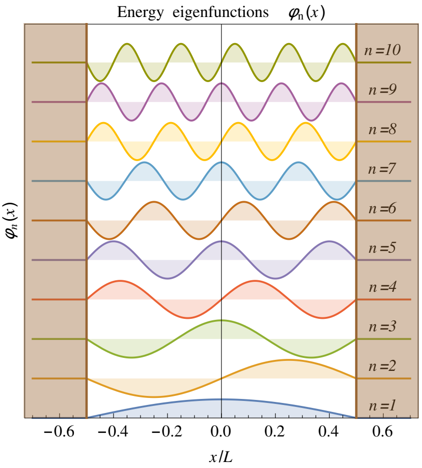
$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < L/2 \\ \infty, & |x| \geq L/2 \end{cases}$$

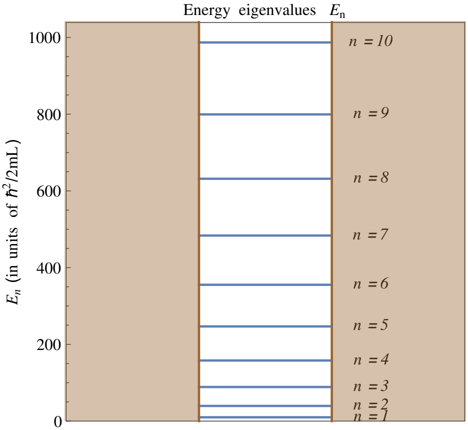
Solução geral da ESIT:

$$\psi_I(x) = 0, \qquad \psi_{III}(x) = 0,$$

$$\psi_{II}(x) = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$





para n par: $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$, para n ímpar: $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \qquad (n \in \mathbb{N})$$

IV. Caraterísticas importantes deste problema

- a energia é quantizada (E_n);
- o espetro de energia é infinito e totalmente discreto.
- os autoestados são todos não-degenerados;
- a energia do estado fundamental é:

$$E_{\text{min}} = E_{n=1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} > V_{\text{min}} \qquad \text{(flutuação quântica)}$$

- o autoestado $\varphi_n(x)$ tem $n-1$ zeros (nodos);
- os autoestados são funções pares ou ímpares de x:

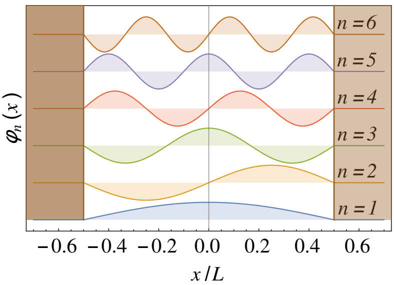
$$\varphi_{2n-1}(x) = \varphi_{2n-1}(-x), \qquad \varphi_{2n}(x) = -\varphi_{2n}(-x).$$

O facto de $E_1 > 0$ resulta da relação de incerteza:

$$\delta X\,\delta P \geq \hbar/2 \quad \Rightarrow \quad \langle \hat{\mathrm{H}} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\delta X)^2}$$

$$\delta X \approx L \quad \Rightarrow \quad \langle \hat{\mathrm{H}} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8mL^2}$$

Autoestados de energia, $\varphi_n(x)$



Autoestados de energia:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n \text{ par}$$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n \text{ ímpar}$$

Energias:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2} \qquad (n \in \mathbb{N})$$

Na presença de um potencial (partícula não livre) temos de recorrer ao resultado geral:

1. Determinar os autoestados do Hamiltoniano $|\varphi_n\rangle$ (i.e., as funções próprias $\varphi_n(x)$);
2. O vetor de estado varia no tempo de acordo com
$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle \varphi_n|\psi(t_0)\rangle \, e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \, |\varphi_n\rangle.$$
3. A função de onda correspondente, $\psi(x,t)$, é então
$$\psi(t,x) = \langle x|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \langle \varphi_n|\psi(t_0)\rangle \, \varphi_n(x).$$
4. Para calcular as projeções da função de onda inicial em cada autoestado de energia:
$$\langle \varphi_n|\psi(t_0)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x)^* \psi(x,t_0)\, dx.$$

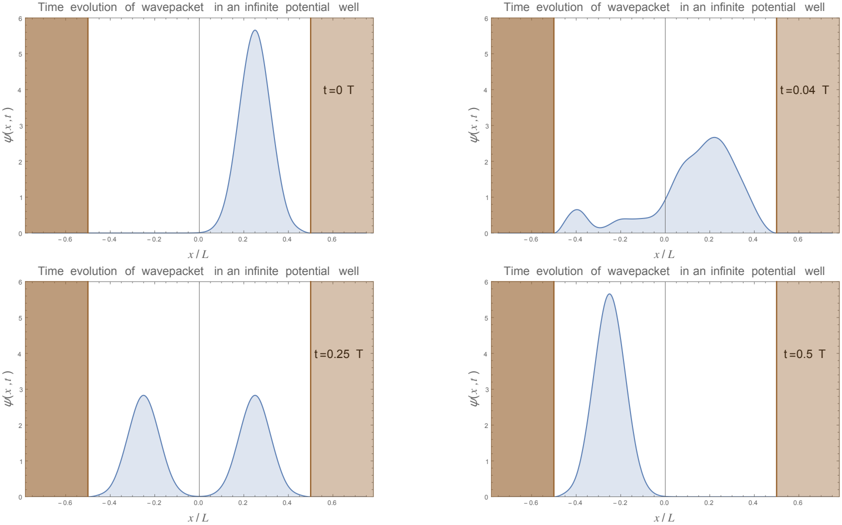
Concretamente, para uma partícula confinada num poço de potencial infinito, temos

$$\psi(t,x) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\frac{\hbar\pi n^2}{2mL^2}(t-t_0)} \langle \varphi_n|\psi(t_0)\rangle \, \varphi_n(x), \qquad \langle \varphi_n|\psi(t_0)\rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \varphi_n(x)^* \psi(x,t_0)\, dx.$$

Exemplo: evolução de um trem de ondas Gaussiano confinado num poço de potencial infinito.

$$\psi(x,0) = \left(\frac{\delta k^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{\delta k^2 x^2}{2}} \qquad \rightarrow \qquad \psi(t,x) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-i\frac{\hbar \pi n^2}{2mL^2}t} \langle \varphi_n | \psi(x,0) \rangle \, \varphi_n(x)$$

As imagens mostram $|\psi(x,t)|^2$ em diferentes instantes (t medido em unidades de $T = 2\pi\hbar/E_1$):



Potenciais simétricos (chegando mais rapidamente às soluções)

O poço infinito tem duas famílias de soluções:

- Autoestados pares relativamente à origem ($x = 0$):

$$n = 1, 3, 5, \cdots : \qquad \varphi_n(x) = +\varphi_n(-x)$$

- Autoestados ímpares relativamente à origem:

$$n = 2, 4, 6, \cdots : \qquad \varphi_n(x) = -\varphi_n(-x)$$

Potenciais simétricos e paridade em 1D

Se $V(-x) = V(x)$, todos os autoestados ligados têm paridade definida (par ou ímpar).

Tem grande utilidade prática! No caso do poço infinito, podemos começar a resolver a ESIT partindo de

sol. pares na região II: $\qquad \psi_{II}(x) = F\cos(kx),$

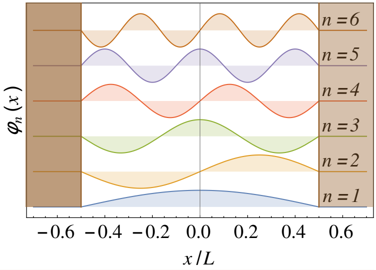
e rapidamente obtemos a condição de quantização em k, bem como a constante de normalização F.

Depois repetimos o processo para

sol. ímpares na região II: $\qquad \psi_{II}(x) = G\sin(kx),$

obtendo assim o conjunto completo dos autoestados.

Auotoestados de energia, $\varphi_n(x)$



$V(x)$ é um potencial simétrico:

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

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 3, 5, \ldots$$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 2, 4, 6, \ldots$$