

Poço de Potencial Infinito

Seminário de Física Computacional

Alunos:

Marcelo Elias de Araújo Júnior

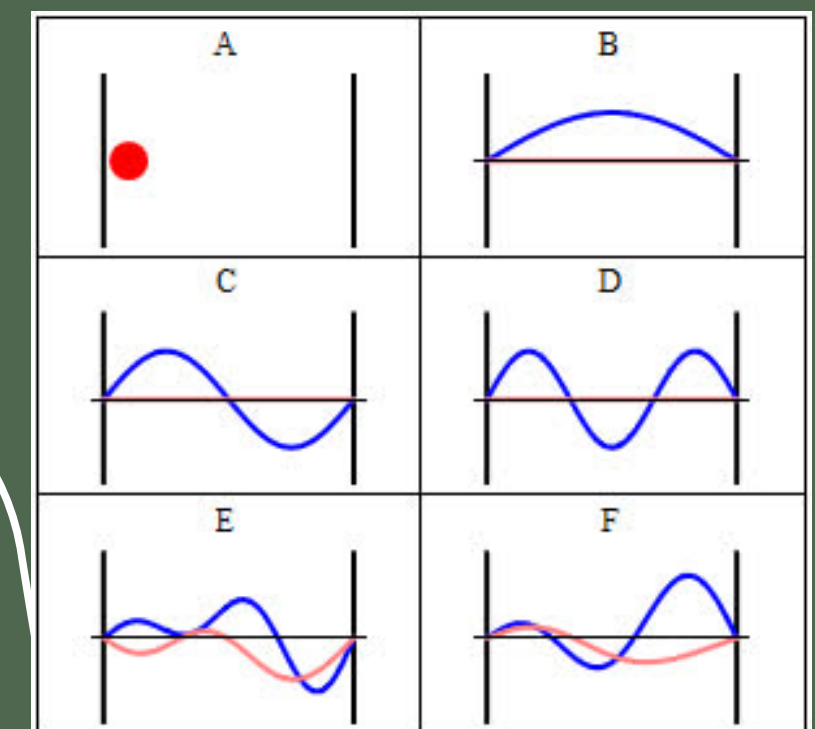
Isadora Caetano de Almeida

Professor:

Alberico Bloheim de Carvalho Junior

Introdução

O poço de potencial infinito, também conhecido como poço quadrado, é um modelo que representa uma partícula em um espaço pequeno entre duas barreiras impenetráveis, utilizado para demonstrar as trajetórias de uma partícula na mecânica quântica, e como elas se diferenciam da mecânica clássica. Nesse modelo, as energias permitidas para as partículas são quantizadas e dependem da largura do poço.



Energias no poço quadrado infinito

As energias no poço quadrado infinito são discretas, ou seja, apenas certos valores são permitidos. Esses valores são chamados de estados estacionários ou níveis de energia. Cada nível de energia possui uma função de onda associada, que descreve a probabilidade de encontrar a partícula em uma determinada posição dentro do poço.

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

Proposta

Iremos utilizar o SciLab para montar um histograma que simule uma quantidade N de elétrons em um poço quadrado infinito e mostre quantos deles seriam encontrados em determinadas posições.

Código Utilizado:

```
L=1;
n = input('Digite o nível de energia: ')
function y=P(x)
    psi = sqrt(2/L) * sin(n*pi*x/L); // calcular função psi(x)
    y = psi.^2; // calcular função de densidade de probabilidade P(x)
endfunction
function y=Q(x)
    y = sqrt(2/(L)); // distribuição uniforme de proposta Q(x)
endfunction
N = 100000; // número de amostras a serem geradas
x = zeros(1, N);
i = 1;
while i <= N do
    // gerar amostra da distribuição de proposta
    x1 = rand();

    // calcular razão entre as funções de densidade de probabilidade
    aceitar = P(x1) / Q(x1);

    // gerar número aleatório uniforme entre 0 e 1
    u = rand();

    // aceitar ou rejeitar a amostra
    if u <= aceitar then
        x(i) = x1;
        i = i + 1;
    end
end
// plotar histograma das amostras geradas
histplot(100,x,normalization=%f);
```

Referências

https://en.wikipedia.org/wiki/Particle_in_a_box

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/pbox.html>

Obrigado pela
atenção!