

## O poço de potencial finito

### Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico ao caso de um potencial  $V(x)$  que tem a forma de um poço (tem um valor  $V_0$  para  $x < -a/2$  e para  $x > a/2$ , e um valor 0 para  $-a/2 < x < a/2$ ).

## objetivos

- mostrar que no caso de a partícula ter uma energia  $E > V_0$ , a partícula é transmitida ou refletida, como no caso da barreira de potencial com energia maior que a altura da barreira (Aula 11 desta disciplina);
- explicar que, se  $0 < E < V_0$ , existem soluções para a equação de Schrödinger para apenas alguns valores da energia (estados ligados);
- identificar a paridade dos estados ligados; e
- mostrar que, quanto maior o número de nodos das funções de onda correspondentes a estados ligados, maior o valor da energia da partícula.

### Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise a Aula 11 desta disciplina.

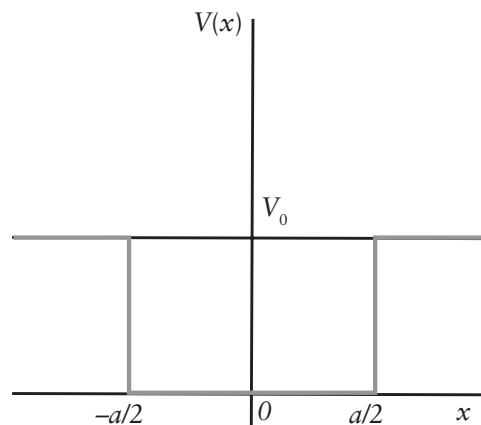
## O POÇO DE POTENCIAL FINITO

Até agora, estudamos a equação de Schrödinger com o degrau e a barreira de potencial. Esses perfis de potencial dão origem a soluções *propagantes*, ou seja, funções de onda que representam partículas quânticas se movimentando livremente para a direita ou para a esquerda. Nesta aula, iniciaremos nosso estudo de uma outra classe importante de soluções da equação de Schrödinger: os estados *ligados*. Essas soluções representam partículas que estão presas ou confinadas a uma região do espaço, pela ação de um potencial atrativo, usualmente conhecido como *poço de potencial*. Veremos, nas próximas aulas, que inúmeros sistemas físicos apresentam poços de potencial contendo estados ligados.

Como usual, iniciaremos nosso estudo com um modelo de poço de potencial que é bastante simplificado, mas que incorpora muitos aspectos qualitativos que são comuns aos poços reais. Trata-se do *poço de potencial finito*, também conhecido como poço quadrado, em uma dimensão. O poço finito está mostrado na **Figura 13.1** e é definido por:

$$\begin{aligned} V(x) &= V_0, & x < -a/2 \\ V(x) &= 0, & -a/2 < x < a/2 \\ V(x) &= V_0, & x > a/2 \end{aligned} \quad (13.1)$$

onde  $V_0$  é uma constante positiva que define a profundidade do poço. Dependendo do valor da energia, teremos dois casos fisicamente aceitáveis, como no caso da barreira de potencial:  $E > V_0$  e  $0 < E < V_0$ . Vamos estudar primeiro o caso  $E > V_0$ , já que é muito semelhante à situação considerada na Aula 10 para a barreira de potencial.



**Figura 13.1:** O poço de potencial finito de profundidade  $V_0$ .

### PRIMEIRO CASO: $E > V_0$ .

O caso  $E > V_0$  é bastante parecido com o problema da barreira de potencial em que a energia é maior que a altura da barreira, que tratamos na Aula 10. Neste caso, a solução para a função de onda na região interna ( $-a/2 < x < a/2$ ), em que o potencial é nulo, será a mesma da partícula livre:

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, \quad -a/2 < x < a/2 \quad (13.2)$$

com  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . No caso das regiões externas ( $x < -a/2$  e  $x > a/2$ ), a equação de Schrödinger tem a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) \quad (13.3)$$

cujas soluções são as equações de onda correspondentes à de uma partícula livre com energia total  $(E - V_0)$ :

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{ik''x} + Be^{-ik''x}, \quad x < -a/2 \\ \psi(x) &= Ce^{ik''x} + De^{-ik''x}, \quad x > a/2 \end{aligned} \quad (13.4)$$

com  $k'' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ . Como na Aula 10, consideramos o caso em que  $D = 0$ , que corresponde a uma onda incidente pela esquerda sobre o poço de potencial.

O procedimento para determinar as constantes  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $F$  e  $G$  é o mesmo que o estudado na Aula 10 para o caso da barreira de potencial. Igualando-se os valores da função de onda e da sua derivada em  $x = a/2$ , obtemos:

$$\begin{aligned} Fe^{ika/2} + Ge^{-ika/2} &= Ce^{ik''a/2} \\ ik(Fe^{ika/2} - Ge^{-ika/2}) &= ik''Ce^{ik''a/2}, \end{aligned} \quad (13.5)$$

de onde podemos determinar o quociente  $F/G$ ,

$$\frac{F}{G} = \left( \frac{k + k''}{k - k''} \right) e^{-ika} \quad (13.6)$$

**ATIVIDADE**

1. Obtenha a Equação (13.6) a partir da (13.5).

---



---



---

**RESPOSTA COMENTADA**

A partir das duas Equações (13.5), basta dividir a de cima pela de baixo, obtendo:

$$\frac{F/G + e^{-ika}}{F/G - e^{-ika}} = \frac{k}{k''}.$$

A partir daí, com algumas manipulações algébricas, chega-se ao resultado esperado.

Da mesma forma, em  $x = -a/2$  teremos,

$$Fe^{-ika/2} + Ge^{ika/2} = Ae^{-ik''a/2} + Be^{ik''a/2} \quad (13.7)$$

$$ik(Fe^{-ika/2} - Ge^{ika/2}) = ik''(Ae^{-ik''a/2} - Be^{ik''a/2})$$

que levam a

$$\frac{F/G + e^{ika}}{F/G - e^{ika}} = \frac{k}{k''} \frac{A/B + e^{ik''a}}{A/B - e^{ik''a}}. \quad (13.8)$$

As Equações (13.6) e (13.8) permitem calcular o quociente  $B/A$  e, a partir deste, o coeficiente de reflexão  $R$ . De forma análoga, pode-se calcular  $C/A$  e o coeficiente de transmissão  $T$ . Deixamos como exercício opcional a realização dos passos intermediários, sendo o resultado dos cálculos dados pelas expressões:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[ 1 + \frac{4k^2 k''^2}{(k^2 - k''^2)^2 \sin^2(ka)} \right]^{-1} \quad (13.9)$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[ 1 + \frac{(k^2 - k''^2)^2 \sin^2(ka)}{4k^2 k''^2} \right]^{-1}$$

Veja como a Equação (13.9) é parecida com a Equação (10.10), que obtivemos na Aula 10. Podemos escrever a Equação (13.9) em termos de  $E$  e  $V_0$ :

$$R = \left[ 1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2(ka)} \right]^{-1} \quad (13.10)$$

$$T = \left[ 1 + \frac{V_0^2 \sin^2(ka)}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}$$

### ATIVIDADE



2. Obtenha a Equação (13.10) a partir da Equação (13.9).

---



---



---

### RESPOSTA COMENTADA

Basta fazer as substituições  $k = \sqrt{2mE} / \hbar$  e  $k'' = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar$  e fazer algumas manipulações algébricas.

A partir das Equações (13.9) ou (13.10), podemos verificar que  $R + T = 1$ , como era de se esperar, exatamente como fizemos na Atividade 3 da Aula 10. Observamos também que o coeficiente de transmissão  $T$  é, em geral, menor do que 1, em contradição com a situação clássica, em que a partícula é sempre transmitida. De forma esquemática, o comportamento de  $T$  como função da energia é bem semelhante ao mostrado na **Figura 10.4** da Aula 10, na região  $E > V_0$  dessa figura. Um ponto interessante para se chamar a atenção é que, mais uma vez, ocorrem oscilações no coeficiente de transmissão e que  $T = 1$  quando  $ka = n\pi$ , ou seja, quando a espessura do poço de potencial é igual a um múltiplo inteiro da metade do comprimento de onda para a partícula dentro do poço,  $\lambda = 2\pi/k$ .

**Efeito Ramsauer**

No início da década de 1920, o físico alemão Carl Ramsauer, realizando experimentos de espalhamento de elétrons por átomos de gases nobres, observou um efeito bastante intrigante. Ele notou que, para certos valores das energias dos elétrons, estes eram transmitidos através dos átomos com probabilidade de 100%, ou seja, era como se os átomos fossem transparentes para esses elétrons! Isto é conhecido por efeito Ramsauer. O resultado que acabamos de obter para o poço quadrado, ou seja, transmissão perfeita para alguns valores da energia, explica o efeito Ramsauer. É claro que se trata de uma explicação qualitativa, já que o potencial de interação entre um elétron e um átomo de gás nobre não é um potencial quadrado, apesar de apresentar os mesmos ingredientes: atrativo a curtas distâncias, quando o elétron está próximo do núcleo positivo, e indo a zero a longas distâncias (afinal os átomos são neutros). Além disso, há a diferença crucial de que o sistema real é em três dimensões e nosso modelo é em 1D. No entanto, a explicação qualitativa está correta.

**SEGUNDO CASO:  $E < V_0$** 

Neste caso, veremos as soluções correspondentes a estados ligados, ou seja, confinados na região do poço. A discussão que se segue envolve várias manipulações algébricas, e é mais interessante de ser acompanhada com um lápis e papel, em que você possa reproduzir todas as passagens.

A equação de Schrödinger nas regiões externas,  $x < -a/2$  e  $x > a/2$  é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V_0)\psi(x) \quad (13.11)$$

que pode ser escrita na forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = K'^2 \psi(x) \quad (13.12)$$

onde  $K' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ . De forma semelhante ao que vimos na Aula 10 para a barreira de potencial (energia menor que a altura da barreira), as soluções serão da forma

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{K'x} + Be^{-K'x}, \quad x < -a/2, \\ \psi(x) &= Ce^{K'x} + De^{-K'x}, \quad x > a/2 \end{aligned} \quad (13.13)$$

As condições de que a função de onda deve ser finita quando  $x \rightarrow -\infty$  e  $x \rightarrow +\infty$  levam a  $B = 0$  e a  $C = 0$ , respectivamente. Portanto teremos

$$\begin{aligned}\psi(x) &= Ae^{K'x}, \quad x < -a/2 \\ \psi(x) &= De^{-K'x}, \quad x > a/2\end{aligned} \quad (13.14)$$

Na região interna,  $-a/2 < x < a/2$ , nada muda em relação ao caso  $E > V_0$ , ou seja:

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, \quad -a/2 < x < a/2 \quad (13.15)$$

com  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . A partir das condições de continuidade de  $\psi(x)$  e da sua derivada nos pontos  $x = -a/2$  e  $x = a/2$ , determinamos as constantes  $A$ ,  $D$ ,  $F$  e  $G$ . A continuidade em  $x = a/2$  leva às equações:

$$\begin{aligned}Fe^{ika/2} + Ge^{-ika/2} &= De^{-K'a/2} \\ ik(Fe^{ika/2} - Ge^{-ika/2}) &= -K'De^{-K'a/2},\end{aligned} \quad (13.16)$$

enquanto que a continuidade em  $x = -a/2$  leva a

$$\begin{aligned}Ae^{-K'a/2} &= Fe^{-ika/2} + Ge^{ika/2} \\ K'Ae^{-K'a/2} &= ik(Fe^{-ika/2} - Ge^{ika/2})\end{aligned} \quad (13.17)$$

A partir da Equação (13.17), podemos calcular  $F$  e  $G$  como função de  $A$ :

$$\begin{aligned}F &= \frac{1}{2} \left( 1 - i \frac{K'}{k} \right) Ae^{-K'a/2} e^{ika/2} \\ G &= \frac{1}{2} \left( 1 + i \frac{K'}{k} \right) Ae^{-K'a/2} e^{-ika/2}\end{aligned} \quad (13.18)$$

que, quando substituídas na Equação (13.15), levam a uma expressão para a função de onda  $\psi(x)$  na região  $-a/2 < x < a/2$ :

$$\psi(x) = Ae^{-K'a/2} \left[ \cos k(x + a/2) + \frac{K'}{k} \sin k(x + a/2) \right]. \quad (13.19)$$

Através das fórmulas para o seno e o cosseno de uma soma de ângulos, podemos reescrever  $\psi(x)$  como:

$$\psi(x) = Ae^{-K'a/2} \left\{ \begin{aligned} &\left[ \cos(ka/2) + \frac{K'}{k} \sin(ka/2) \right] \cos(kx) + \\ &\left[ -\sin(ka/2) + \frac{K'}{k} \cos(ka/2) \right] \sin(kx) \end{aligned} \right\}. \quad (13.20)$$

De forma semelhante, a partir da Equação (13.16), podemos calcular  $F$  e  $G$  como função de  $D$ ,

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \left( 1 + i \frac{K'}{k} \right) D e^{-K'a/2} e^{-ika/2}, \\ G &= \frac{1}{2} \left( 1 - i \frac{K'}{k} \right) D e^{-K'a/2} e^{ika/2} \end{aligned} \quad (13.21)$$

que, quando substituídas na Equação (13.15), levam a

$$\psi(x) = D e^{-K'a/2} \left[ \cos k(x - a/2) - \frac{K'}{k} \sin k(x - a/2) \right]. \quad (13.22)$$

Usando agora as fórmulas para o seno e o cosseno da diferença entre dois ângulos, obtemos:

$$\psi(x) = D e^{-K'a/2} \left\{ \begin{aligned} &\left[ \cos(ka/2) + \frac{K'}{k} \sin(ka/2) \right] \cos(kx) + \\ &\left[ \sin(ka/2) - \frac{K'}{k} \cos(ka/2) \right] \sin(kx) \end{aligned} \right\}. \quad (13.23)$$

Observe que as Equações (13.20) e (13.23) devem representar a mesma função de onda. Portanto, os coeficientes de  $\sin(kx)$  e  $\cos(kx)$  devem ser necessariamente idênticos. A igualdade entre os coeficientes de  $\cos(kx)$  leva a

$$A \left[ \cos(ka/2) + \frac{K'}{k} \sin(ka/2) \right] = D \left[ \cos(ka/2) + \frac{K'}{k} \sin(ka/2) \right] \quad (13.24)$$

que tem por soluções

$$A = D \quad \text{ou} \quad k \cot(ka/2) = -K', \quad (13.25)$$



enquanto que a igualdade entre os coeficientes de  $\sin(kx)$  leva a

$$A \left[ -\sin(ka/2) + \frac{K'}{k} \cos(ka/2) \right] = D \left[ \sin(ka/2) - \frac{K'}{k} \cos(ka/2) \right] \quad (13.26)$$

que tem por solução:

$$A = -D \quad \text{ou} \quad k \tan(ka/2) = K' \quad . \quad (13.27)$$

Não podemos ter simultaneamente  $A = D$  e  $A = -D$ , já que nesse caso  $A = D = 0$ , e, pelas Equações (13.18) e (13.19), também teríamos  $F = G = 0$ , e a função de onda  $\psi(x)$  seria, portanto, nula para todo valor de  $x$ . Como vimos nas aulas anteriores,  $|\psi(x)|^2$  é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula no ponto  $x$ , e a integral desta função em todo o espaço deve ser igual a 1. Isto não poderia acontecer se  $\psi(x)=0$  para todo valor de  $x$ , e chegaríamos a um absurdo.

Assim, se  $A = D$ , então necessariamente  $k \tan(ka/2) = K'$  deve ser satisfeita. Substituindo este resultado na Equação (13.20), vemos que o coeficiente de  $\sin(kx)$  se anula, e portanto  $\psi(x)$  no intervalo  $-a/2 < x < a/2$  tem a forma de um cosseno:

$$\psi(x) = Ae^{-K'a/2} \cos(ka/2) \left[ 1 + \left( \frac{K'}{k} \right)^2 \right] \cos(kx) \quad (\text{solução par}). \quad (13.28)$$

Portanto, a solução da equação de Schrödinger  $\psi(x)$  é uma função *par*, ou seja, que satisfaz  $\psi(-x) = \psi(x)$ .

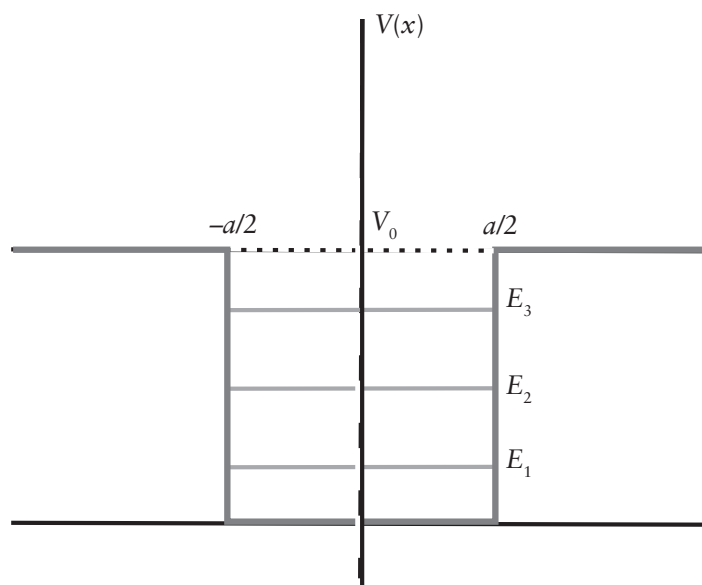
Se, por outro lado, tivermos  $A = -D$ , então necessariamente  $k \cot(ka/2) = -K'$  deve ser satisfeita. Novamente, substituindo este resultado na Equação (13.23), vemos que, neste caso, o coeficiente de  $\cos(kx)$  se anula, e, portanto,  $\psi(x)$  no intervalo  $-a/2 < x < a/2$  tem a forma de um seno:

$$\psi(x) = De^{-K'a/2} \sin(ka/2) \left[ 1 + \left( \frac{K'}{k} \right)^2 \right] \sin(kx), \quad (\text{solução ímpar}). \quad (13.29)$$

Trata-se, portanto, de uma função *ímpar*, ou seja, em que se verifica a relação  $\psi(-x) = -\psi(x)$ .

Para uma determinação completa das soluções, nos restaria agora determinar os valores de  $k$  ou, equivalentemente, os valores de energia  $E$  possíveis para a partícula dentro do poço. Para isso, teríamos que resolver as equações  $k \tan(ka/2) = K'$  (para as soluções pares) e  $k \cot(ka/2) = -K'$  (para as soluções ímpares). Estas são *equações transcendentais*, ou seja, a incógnita, neste caso a energia  $E$ , aparece no argumento de uma função não-polinomial. Em geral, essas equações somente podem ser resolvidas por métodos numéricos ou gráficos. Em particular, no Apêndice G do livro de Eisberg e Resnick é mostrada a solução gráfica para estas equações. Não nos preocuparemos tanto com a solução dessas equações, o mais importante para o nosso estudo é discutir os seguintes aspectos qualitativos dessas soluções:

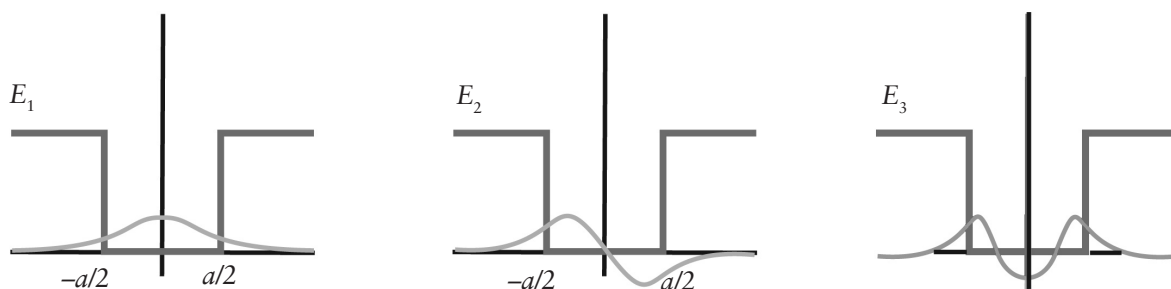
(I) Tanto no caso das soluções pares quanto no caso das soluções ímpares, as equações transcendentais são satisfeitas por apenas um número finito de valores da energia  $E$ . Isto está esquematizado na **Figura 13.2**, que mostra as três energias mais baixas ( $E_1$ ,  $E_2$  e  $E_3$ ) de um poço quadrado. Nessa situação, que será observada novamente em exemplos a serem estudados nas próximas aulas, dizemos que a energia está *quantizada* ou, ainda, que para essa região de energias ( $E < V_0$ ) o espectro é *discreto*. Perceba como esta situação é distinta do caso  $E > V_0$ , em que qualquer energia é permitida (desde que seja maior que  $V_0$ ). Neste último caso ( $E > V_0$ ), temos um espectro contínuo.



**Figura 13.2:** O poço de potencial e três valores possíveis da energia  $E$ .

(II) As funções de onda associadas às energias  $E_1$ ,  $E_2$  e  $E_3$  têm as formas indicadas na **Figura 13.3**. Observe que, à medida em que aumenta o valor da energia, é maior o número de oscilações (ou nodos) da função de onda. Isso ocorre porque  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , ou seja, quanto maior a energia, maior o número de onda que aparece no argumento dos cossenos ou senos da função de onda na região entre  $-a/2$  e  $+a/2$ .

(III) Note que o estado de mais baixa energia (estado fundamental) é par (cosseno), o primeiro estado excitado é ímpar (seno), e o segundo estado excitado é novamente par (cosseno). Como veremos novamente nas próximas aulas, existe sempre uma alternância entre as soluções pares e ímpares da equação de Schrödinger à medida que aumenta a energia e a função de onda do estado fundamental é sempre par.



**Figura 13.3:** Soluções para o poço de potencial quadrado correspondentes às energias  $E_1$  (estado fundamental, par),  $E_2$  (primeiro estado excitado, ímpar) e  $E_3$  (segundo estado excitado, par).

Pode-se mostrar que o número de estados ligados de um poço de potencial é dado por  $N = \left[ \frac{\sqrt{2mVa^2}}{\pi\hbar} \right] + 1$ , onde  $[x]$  representa

o maior número inteiro menor que  $x$ . Note que, portanto, há no mínimo um estado ligado no poço de potencial em uma dimensão, o estado fundamental. A ocorrência de estados excitados vai depender da largura e da profundidade do poço: quanto mais largo e mais profundo, maior o número de estados excitados.

### ATIVIDADE FINAL

Um feixe de elétrons com energia cinética de 3 eV se move ao longo do eixo  $x$ , na direção de  $x$  positivo, quando encontra um poço de potencial de largura 0,4 nm e profundidade  $V_0 = 1,5$  eV.

- Determine o comprimento de onda dos elétrons no feixe incidente.
- Determine o comprimento de onda dos elétrons no poço de potencial.
- Qual fração do feixe incidente é transmitida além do poço? Qual fração é refletida?
- Calcule a energia cinética mais baixa dos elétrons em que ocorre transmissão perfeita (efeito Ramsauer).

---



---



---

#### RESPOSTA COMENTADA

(a) Se a energia cinética dos elétrons incidentes vale  $E - V_0 = 3$  eV, então o número de onda na região fora do poço é

$$k'' = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar = \sqrt{2 \times (9,1 \times 10^{-31}) \times 3 \times (1,6 \times 10^{-19})} / 1,05 \times 10^{-34} = 8,9 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$$

Portanto, o comprimento de onda é  $\lambda'' = 2\pi/k'' = 0,71 \text{ nm}$ .

(b) Na região interna ao poço, onde a energia cinética vale 4,5 eV, temos  $k = \sqrt{2mE} / \hbar = 1,1 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$  e  $\lambda = 2\pi/k = 0,58 \text{ nm}$ .

(c) Usando a expressão para o coeficiente de transmissão, Equação (13.10):

$$T = \left[ 1 + \frac{V_0^2 \sin^2(ka)}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}, \text{ com } E = 4,5 \text{ eV}, V_0 = 1,5 \text{ eV e } a = 0,4 \text{ nm, obtemos:}$$

$T = [1 + 0,042 \sin^2(ka)]^{-1}$ . Usando o valor de  $k$  encontrado no item (b), obtemos  $ka = 4,4$  radianos e, portanto,  $\sin(ka) = -0,95$ . Desta forma, o coeficiente de transmissão tem o valor  $T = 0,96$ . O coeficiente de reflexão pode ser calculado por  $R = 1 - T = 0,04$ .

(d) A condição para transmissão perfeita é  $ka = n\pi$ . O valor mais baixo de energia corresponde a  $n = 1$ , ou seja,  $k = \pi/a = 7,9 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ . Desta forma, a energia total dos elétrons vale

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{(1,05 \times 10^{-34} \times 7,9 \times 10^9)^2}{2 \times 9,1 \times 10^{-31}} = 3,7 \times 10^{-19} \text{ J} = 2,3 \text{ eV},$$

e a energia cinética incidente vale  $E - V_0 = 0,8 \text{ eV}$ .

**RESUMO**

Uma partícula incidente em um poço de potencial com  $E > V_0$  pode ser transmitida ou refletida, exatamente como no caso da barreira de potencial. Os coeficientes de reflexão e transmissão apresentam oscilações com a energia da partícula incidente. Em particular, para alguns valores da energia incidente, a partícula é transmitida com probabilidade de 100%, o que é conhecido como efeito Ramsauer. Já se  $0 < E < V_0$ , existem soluções para a equação de Schrödinger para apenas alguns valores da energia (estados ligados). Essas soluções podem ser pares ou ímpares, e quanto maior o número de nodos das funções de onda, maior o valor da energia da partícula.

**INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA**

Na próxima aula, vamos conhecer mais um perfil de potencial em uma dimensão que dá origem a estados ligados: o poço infinito.