rígida em termos de uma função energia potencial. Vamos estabelecer um eixo coordenado no qual a caixa tenha fronteiras em x=0 e x=a. A caixa rígida tem 3 características importantes:

1. A partícula se move livremente entre 0 e a com velocidade - e portanto energia cinética - de módulo constante
2. Não importa qual seja o valor de sua energia cinética, a partícula tem pontos de retorno em x=0 e x=a
3. As regiões x<0 e x>a são proibidas; a partícula não pode deixar a caixa

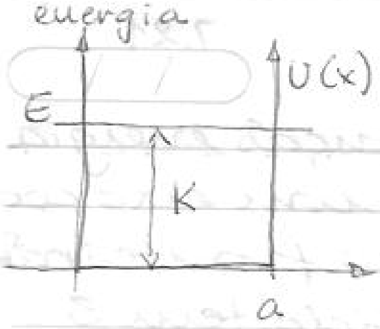
Uma função energia potencial que descreve uma partícula nesta situação é

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

O valor infinito ~~impede~~ da barreira de energia impede a partícula de ser encontrada no exterior da caixa, qualquer que seja sua energia cinética. Esta energia potencial é também chamada de poço quadrado infinito (onde o "quadrado" se refere ao ângulo reto nas laterais de seu gráfico)

Visualização: estabelecer as condições de contorno.

No diagrama vê-se que U=0 e E=K no



interior da caixa
(Cuidado! Este diagrama <u>não</u> representa a caixa; ele é uma representação gráfica das energias potencial e cinética da partícula).

Como a partícula não pode ser encontrada fora da caixa, devemos ter
$|\psi(x)|^2 = 0, \quad x<0 \cup x>a$
$\Rightarrow \psi(x) = 0, \quad x<0 \cup x>a.$

Além disso, a função de onda deve ser contínua $\Rightarrow \psi(x=0) = \psi(x=a) = 0$

Esta exigência é equivalente a dizer que uma onda estacionária numa corda vibrante deve ter um nó numa extremidade fixa.

Resolução: I - encontrar as funções de onda

Como $U(x) = 0$ se $x \in [0, a]$, neste intervalo a eq. 5. se reduz a

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

Devemos resolver esta equação considerando sempre 2 aspectos:

1. Para quais valores de E ela tem soluções com significado físico?
2. Quais são as soluções $\psi(x)$ para estes valores de E?

Vamos começar por simplificar a notação, definindo $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ (e se $E<0$? veja na sequência), ou $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Com esta notação,

$$\Psi''(x) = -k^2\Psi(x) \Rightarrow \Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0,$$

que é a equação do oscilador harmônico e tem solução geral

$$\Psi(x) = A \operatorname{sen} kx + B \cos kx$$

Impondo as condições de contôrno, temos:

$$\Psi(x=0) = B = 0$$
$$\Psi(x=a) = A \operatorname{sen} ka = 0$$
$$\Downarrow$$

$\operatorname{sen} ka = 0$ (já que se $A=0$, a solução seria identicamente nula, o que não tem significado físico).

$$\Downarrow$$

$$ka = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}, \; n = 1, 2, \ldots$$

Encontramos, portanto, uma família de soluções, cada uma correspondendo a um valor do (número quântico) inteiro n. Estas funções de onda representam os estados estacionários da partícula na caixa, e a constante A será determinada pela imposição da normalização.

Resolução: II - encontrar as energias permitidas

A condição de contôrno impôs restrição aos valores possíveis de k:

$$k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = n\frac{\pi}{a}$$

$$\Rightarrow E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \left(= n^2\frac{h^2}{8ma^2}\right), \; n = 1, 2, \ldots$$

e estes são os únicos valores de energia para os quais é possível encontrar soluções com significado físico para a eq. 5 no problema da partícula numa caixa rígida.

Encontramos que a energia da partícula é quantizada! Podemos escrever as energias dos estados estacionários na forma $E_n = n^2 E_1$, $E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}$ sendo a energia do estado fundamental, e que são as mesmas obtidas antes por outros argumentos - só que agora temos uma teoria que nos dá também as funções de onda.

Resolução: III - normalizar a função de onda

Relembre que a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $[a,b]$ é dada pela integral da densidade de probabilidade:

$$P(dx \text{ em } x) = |\Psi(x)|^2 dx$$

$$\Rightarrow P(a,b) = \int_a^b |\Psi(x)|^2 dx \text{, e, portanto,}$$

$$P(-\infty,+\infty) = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx$$

Logo,

$$\int_0^a |\Psi_n(x)|^2 dx = A_n^2 \underbrace{\int_0^a \text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx}_{= a/2} = 1$$

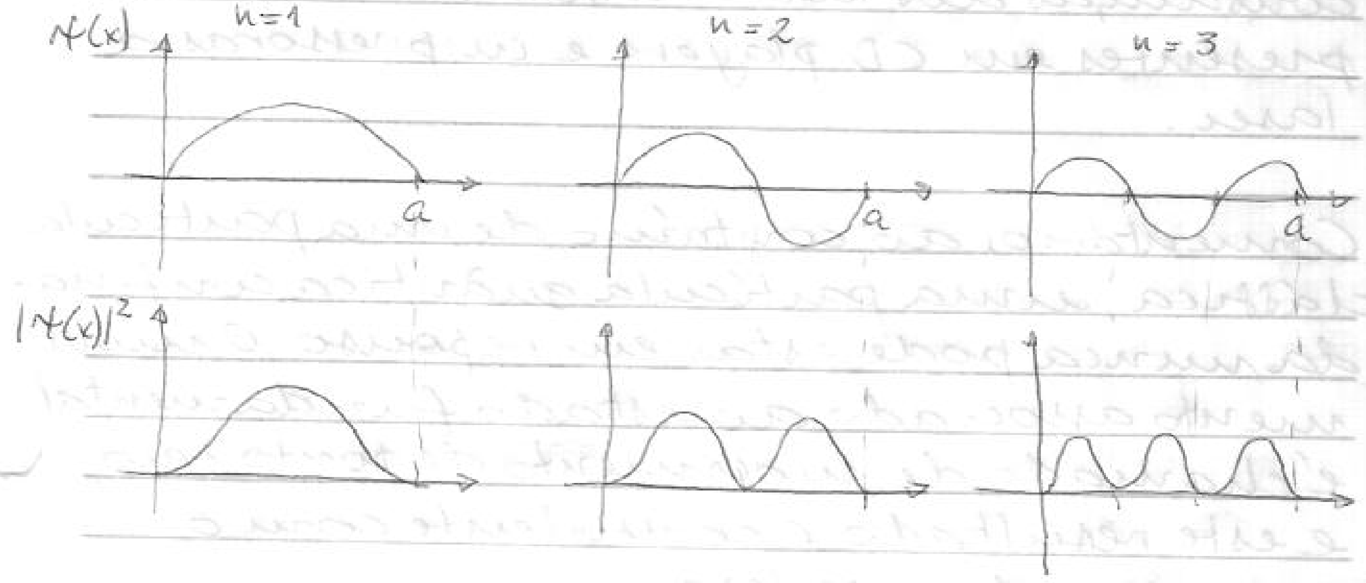
$$A_n^2 = \frac{2}{a}, \quad A_n = \sqrt{\frac{2}{a}},$$

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & x \in [0,a] \\ 0, & x \notin [0,a] \end{cases}$$

tilibra

A densidade de probabilidade é

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a}$$



Exemplo: Um dispositivo semicondutor conhecido como dispositivo de poço quântico é desenhado para confinar um elétron numa região de largura 1,0 nm. Trate este problema como unidimensional.

(a) quais as energias dos 3 primeiros estados quânticos?

(b) quais comprimentos de onda de radiação este dispositivo pode absorver?

Solução: vamos usar o modelo da caixa rígida de aresta a = 1,0 nm.

(a) $E_n = n^2 E_1$, $E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{(hc)^2}{8(mc^2)a^2} = 0{,}37\ eV$

$E_2 = 4 \times E_1 = 1{,}48\ eV$, $E_3 = 9 \times E_1 = 3{,}33\ eV$

(b) $\lambda_{1\to2} = \frac{hc}{E_2 - E_1} = \frac{1240}{1{,}11} \simeq 1110\ nm$ (IV)

$\lambda_{1\to3} = \frac{hc}{E_3 - E_1} = \frac{1240}{2{,}96} \simeq 410\ nm$ (UV)

Estes dispositivos, com forte absorção no infravermelho próximo, são usados na construção dos lasers de semi-condutores presentes em CD players e impressoras a laser.

Comentário: ao contrário de uma partícula clássica, uma partícula quântica confinada nunca pode estar em repouso. O movimento associado ao estado fundamental é chamado de movimento de ponto zero, e este resultado é consistente com o princípio da incerteza.

Exemplos:

1. Energias nucleares

Protons e neutrons estão fortemente ligados dentro do núcleo de um átomo. Se usarmos um modelo unidimensional do núcleo, quais são os 3 primeiros níveis de energia de um ~~núcleo~~ neutron em um núcleo de diâmetro 10 fm? ($1 fm = 10^{-15} m$)

Modelo: neutron numa caixa rígida

$E_n = n^2 E_1,$

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{(hc)^2}{8\underbrace{(mc^2)}_{\simeq 940 MeV}a^2} \simeq 2{,}0 \times 10^6 eV = 2{,}0 MeV$$

$E_2 = 8{,}0 MeV, \quad E_3 = 18{,}0 MeV$

2. Probabilidades de localizar uma partícula
Uma partícula está no estado fundamental de uma caixa rígida de aresta $\underline{a}$.
(a) escreva sua densidade de probabilidade
(b) onde é mais provável encontrar-se esta partícula?
(c) qual a probabilidade de encontrá-la num intervalo de largura 0,01a em x = 0, 0,25a e 0,50a?
(d) qual a probabilidade de encontrá-la na metade central da caixa?
(e) qual seria o valor médio de medidas da posição desta partícula?

(a) $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} \Rightarrow |\psi(x)|^2 = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{\pi x}{a}$

(b) numa vizinhança do ponto onde $|\psi(x)|^2$ é máximo, i.e., $x = \frac{a}{2}$

(c) $P_r(0{,}01a \text{ em } x = x_0) = |\psi(x_0)|^2 \times 0{,}01a =$

$= 0 \qquad (x_0 = 0)$

$= \frac{2}{a} \times 0{,}01a = 0{,}02 = 2\% \quad (x_0 = 0{,}5)$

$= \frac{2}{a} \times \frac{1}{2} \times 0{,}01a = 0{,}01 = 1\% \quad (x_0 = 0{,}25)$

(d) $P\left(\frac{a}{4}, \frac{3a}{4}\right) = \int_{a/4}^{3a/4} \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx =$

$= \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \simeq 0{,}82 = 82\%$

(e) $\langle x \rangle = \int_0^a x |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx =$

$= \frac{a}{2}$

Consideremos agora a possibilidade de encontrar soluções válidas para a eq. S. se $E<0$. Neste caso, definimos

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \text{ e a equação fica}$$

$\psi''(x) = k^2\psi(x)$, com 2 soluções exponenciais linearmente independentes,

$\psi_1(x) = e^{kx}$ e $\psi_2(x) = e^{-kx}$, e solução geral

$$\psi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

Impondo as condições de contorno $\psi(x=0)=0$ e $\psi(x=a)=0$

$$\begin{cases} A + B = 0 \implies B = -A \\ Ae^{ka} + Be^{-ka} = 0 \implies Ae^{ka} - Ae^{-ka} = 0, \end{cases}$$

ou

$$A(e^{ka} - e^{-ka}) = 0$$

Como temos que ter $A \neq 0$ (porque?), resulta que

$$e^{ka} - e^{-ka} = 0, \quad \text{ou } e^{2ka} = 1$$

o que implica em $k=0$, e a solução é $\psi \equiv 0$, o que é impossível

$\implies$ não há solução fisicamente aceitável se $E<0$.

Valores esperados (ou valores médios)

Suponha que estejamos interessados numa quantidade física q que pode ter vários valores diferentes, cada um com uma probabilidade bem definida. A quantidade q pode ser uma variável contínua - como a posição x - ou discreta. Considevemos primeiro este último caso: se medirmos o valor de q num conjunto de sistemas idênticos, todos preparados da mesma maneira, obteremos os valores possíveis desta quantidade, $q_1, q_2, \ldots$, com probabilidades $P_1, P_2, \ldots$. O valor médio destas medidas, chamado neste contexto de valor esperado da quantidade q, é a média destes valores, que pode ser expressa, ao relembrarmos a conexão entre probabilidade e frequência relativa, na forma

$$\langle q \rangle = \frac{\sum_i n_i q_i}{N} = \sum_i P_i q_i, \text{ onde}$$

n_i é o número de vezes em que o resultado q_i foi obtido e $N = \sum_i n_i$ é o número de medidas feitas.

Para uma variável contínua, a probabilidade se exprime em termos da densidade de probabilidade, $P(\delta q \text{ em } q) = p(q)\,\delta q$, e a soma se transforma numa integral,

$$\langle q \rangle = \int q\, p(q)\, dq$$

Assim,

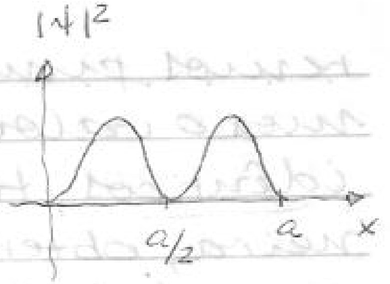
$$\langle x \rangle = \int x\, p(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, |\psi(x)|^2 dx, \text{ e}$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, |\psi(x)|^2\, dx$$

Exemplo: vamos repetir o exemplo 2 (pag. 7.27), agora para o 1º estado excitado do poço quadrado infinito ($n=2$).

(a) $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{2\pi x}{a}$

$\Rightarrow |\psi(x)|^2 = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{2\pi x}{a}$



(b) os máximos de $|\psi(x)|^2$ ocorrem em

$x_{mp} = \frac{a}{4}$ e $\frac{3a}{4}$

(c) $P(0{,}01a \text{ em } x = x_0) = |\psi(x_0)|^2 \times 0{,}01a =$

$= 0 \quad (x_0 = 0)$

$= \frac{2}{a} \times 0{,}01a = 0{,}02 = 2\% \quad (x_0 = \frac{a}{4})$

$= 0 \quad (x_0 = \frac{a}{2})$

(d) $P\left(\frac{a}{4}, \frac{3a}{4}\right) = \int_{a/4}^{3a/4} \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{2\pi x}{a} dx =$

$= \frac{2}{a} \times \frac{a}{8} = \frac{1}{4} = 25\%$

(e) $\langle x \rangle = \int_0^a x\, |\psi(x)|^2 dx =$

$= \frac{2}{a} \int_0^a x \operatorname{sen}^2 \frac{2\pi x}{a} = \frac{a}{2}$

7.7 A partícula Livre

Trata-se de uma partícula livre de forças e sem restrições a seu movimento (ainda unidimensional). Podemos, portanto, tomar $U(x) = 0$. Vamos ver que, neste caso, a energia da partícula pode ter qualquer valor $E \geq 0$ – isto é, não é quantizada

A eq. S se escreve $\psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$