Equação de Schrödinger a potencial constante

Consideremos a equação de Schrödinger independente do tempo para um potencial V = cte a uma dimensão:

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\delta^2}{\delta x^2} + V\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

Ou rearranjando:

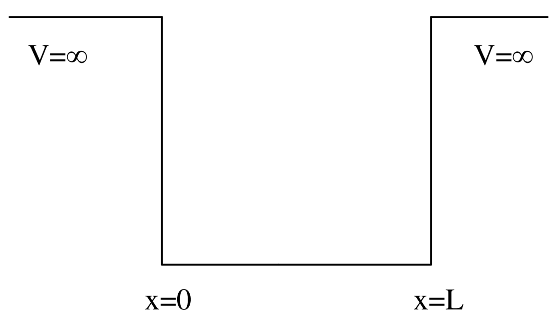
$$\left(\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\delta^2}{\delta x^2}\right)\psi(x) = -\,(E - V)\,\psi(x)$$

A solução desta equação diferencial tem a forma genérica:

$$\Psi(x) = A\ \exp(ikx) + B\ \exp(-ikx)$$

Vamos agora tentar obter os valores de A, B e k através das condições fronteira de uma *partícula num fosso quadrado de potencial*:

De acordo com a geometria do sistema a probabilidade de encontrar a partícula fora do fosso é zero pelo que em x=0 e x=L a função de onda ψ tem de ter o valor zero.



$$\Psi(0) = 0 \Rightarrow A = -\,B$$

$$\Psi(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi\ (n=1,2,...)$$

$$\Psi(x) = A\ \mathrm{sen}(n\pi x/L)$$

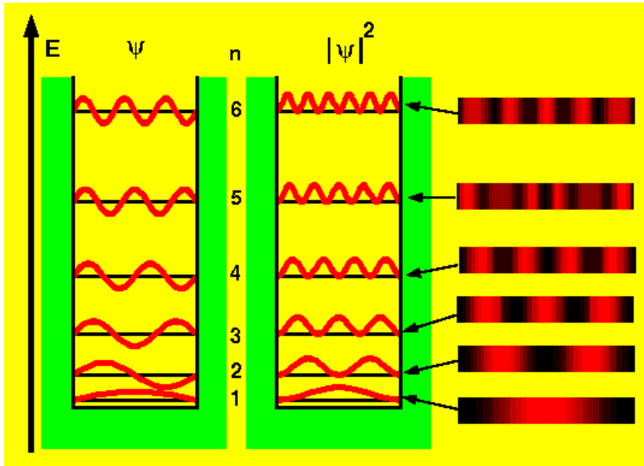
A condição de normalização permite obter $A = (2/L)^{1/2}$

$$E = V + [h^2/(8mL^2)]\ n^2$$

Se se adoptar para V a origem do potencial, então V=0 e

$$E = [h^2/(8mL^2)]\ n^2$$

Na figura seguinte representam-se as 6 primeiras soluções desta equação:



Conclusões:

i) Quanto mais confinado o electrão estiver maior é a sua energia (*repare que a largura da caixa está em denominador ao quadrado*)

ii) O espaçamento entre níveis de energia aumenta linearmente com o nº quântico ($(n+1)^2 - n^2 = 2n + 1$).

iii) A probabilidade de encontrar o electrão não é igual em todos os pontos da caixa (*de facto existem n zonas de máxima probabilidade*).

iv) Para níveis de energia superiores a 1 existem (n-1) nodos na função de onda, ou seja, existem n-1 pontos do interior da caixa em que a probabilidade de encontrar o electrão é zero.