

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física**

FÍSICA MODERNA I

AULA 25 -

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto
Pelletron – sala 114
rizzutto@if.usp.br**

**1o. Semestre de 2014
Monitor: Gabriel M. de Souza Santos**

Página do curso:

<http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=2905>

11/06/2014

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

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

- Uma situação mais realista do que o poço infinito
- Potencial representaria uma partícula presa (chamado estado ligado):
 - nêutron em um estado ligado no núcleo
 - Elétron em um átomo e que pode se desprender (átomo ionizado)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0 & \text{região 1} \\ 0 & 0 < x < a & \text{região 2} \\ V_0 & x > a & \text{região 3} \end{cases}$$

Região 1 e 3

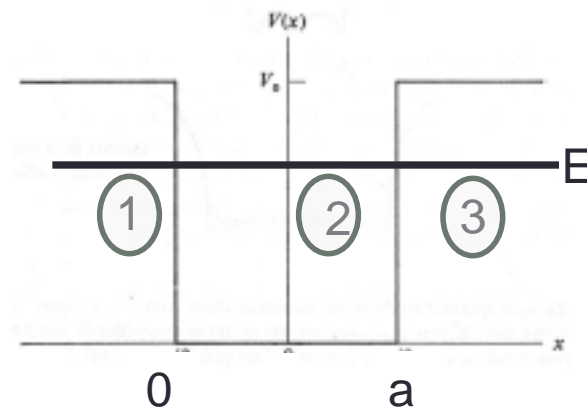
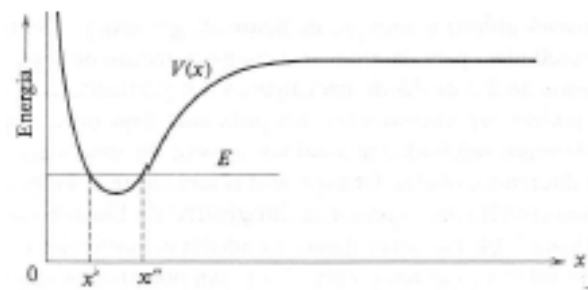
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)\psi(x)$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = k_1^2\psi(x)$$

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} + Be^{-k_1x}$$

$$\psi_3(x) = Fe^{k_1x} + Ge^{-k_1x}$$



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

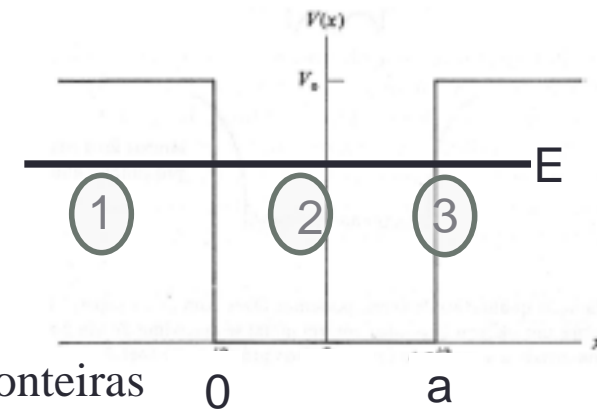
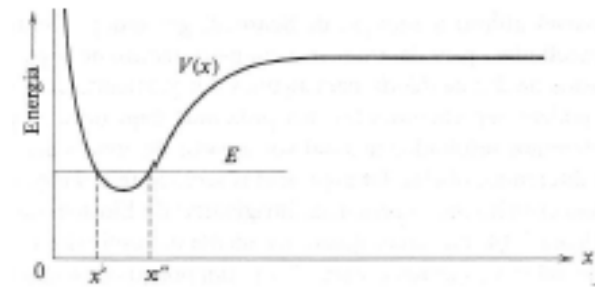
“Partícula presa em um poço finito quadrado

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0 & \text{região 1} \\ 0 & 0 < x < a & \text{região 2} \\ V_0 & x > a & \text{região 3} \end{cases}$$

Região 2 – dentro do poço

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = C \sin k_2 x + D \cos k_2 x$$



Aqui não conseguimos exigir que a função de onda se anule nas fronteiras

$$\psi_1(x) = A e^{k_1 x} + B e^{-k_1 x} \quad \psi_3(x) = F e^{k_1 x} + G e^{-k_1 x}$$

1) **Condição de finitude**

$$x \rightarrow \infty, \psi(x) \rightarrow 0$$

$$x \rightarrow -\infty, \psi(x) \rightarrow 0$$

$$F=0$$

$$B=0$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

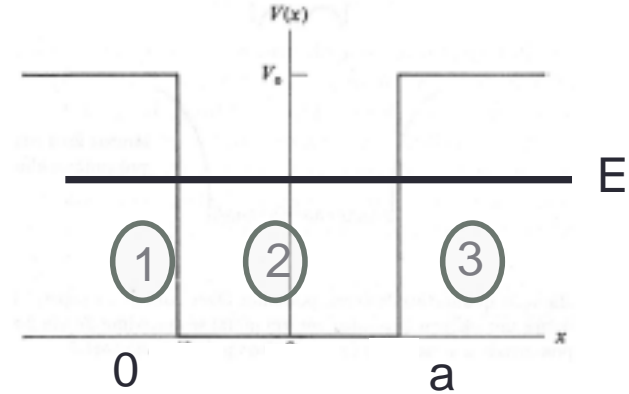
“Partícula presa em um poço finito quadrado

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad \text{Região 3}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = C\sin k_2x + D\cos k_2x \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



2) Condição de continuidade a função

$$\psi_{1(x=0)} = \psi_{2(x=0)}$$

$$Ae^0 = C\sin 0 + D\cos 0$$

$$A = D$$

$$\psi_{2(x=a)} = \psi_{3(x=a)}$$

$$C\sin k_2a + D\cos k_2a = Ge^{-k_1a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

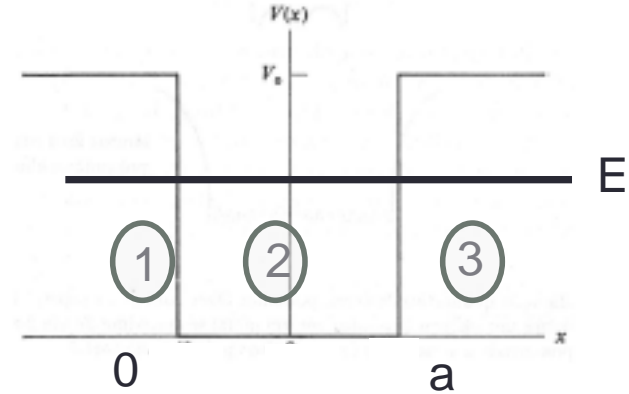
“Partícula presa em um poço finito quadrado

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad \text{Região 3}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = C\text{sen}k_2x + D\text{cos}k_2x \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



2) Condição de continuidade da derivada da função

$$\frac{d}{dx} \psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx} \psi_{2(x=0)}$$

$$k_1A = Ck_2 \cos 0 - Dk_2 \text{sen} 0$$

$$k_1A = Ck_2$$

$$\frac{d}{dx} \psi_{2(x=a)} = \frac{d}{dx} \psi_{3(x=a)}$$

$$Ck_2 \text{cos}k_2a - Dk_2 \text{sen}k_2a = -k_1Ge^{-k_1a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

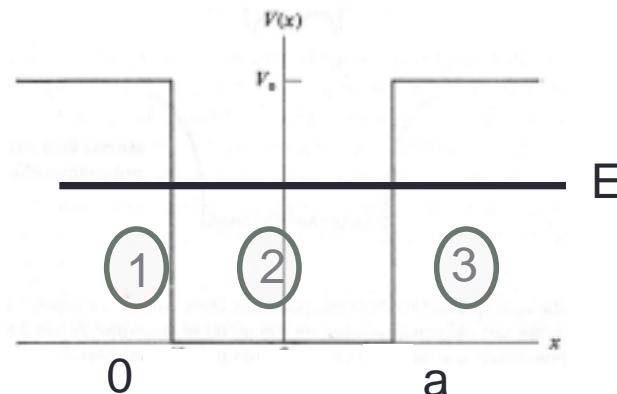
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1x} \quad \text{Região 3}$$

$$\psi_2(x) = Csenk_2x + Dcosk_2x \quad \text{Região 2}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$



$$A = D$$

$$k_1A = Ck_2$$

$$Csenk_2a + Dcosk_2a = Ge^{-k_1a}$$

$$Ck_2cosk_2a - Dk_2senk_2a = -k_1Ge^{-k_1a}$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{C}{D}$$

$$\frac{\frac{k_1}{k_2}cosk_2a - senk_2a}{\frac{k_1}{k_2}senk_2a + cosk_2a} = \frac{k_1}{k_2}$$

Isto está relacionado a profundidade do poço (V_0) e com a largura do poço (a)

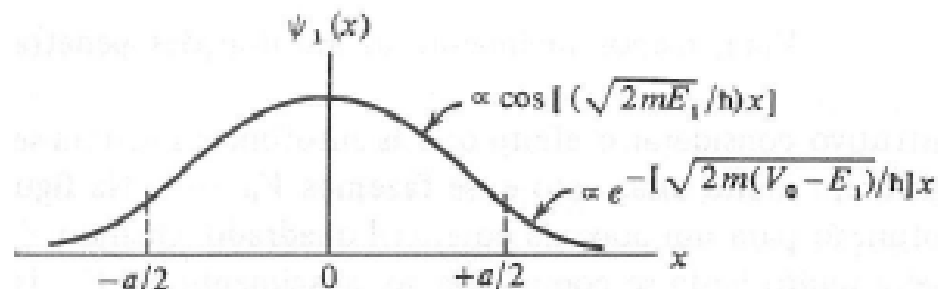
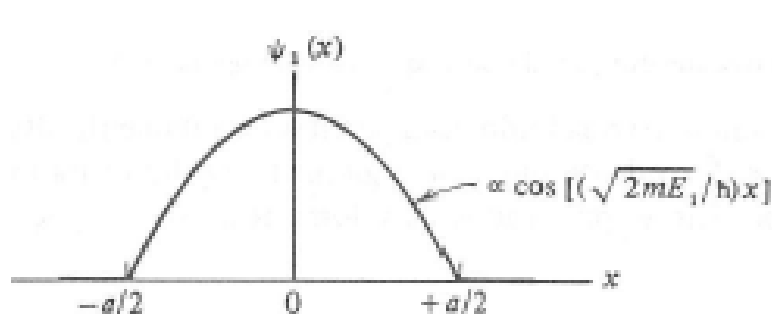
E esta relação só pode ser satisfeita para certos valores de E . A solução não pode ser resolvida explicitamente para E . Deve ser obtida pelo método geométrico.



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado”

Comparando o primeiro estado do sistema do poço infinito com o poço finito



O fato da função de onda não ser zero nas paredes aumenta o comprimento de onda de de Broglie na parede (em comparação com o poço infinito), e isto torna menor a energia e o momento da partícula. Esta observação pode ser usada para aproximar as energias permitidas para a partícula ligada. A função de onda penetra na região exterior, numa escala de comprimento definido pela profundidade de penetração δ dado por:

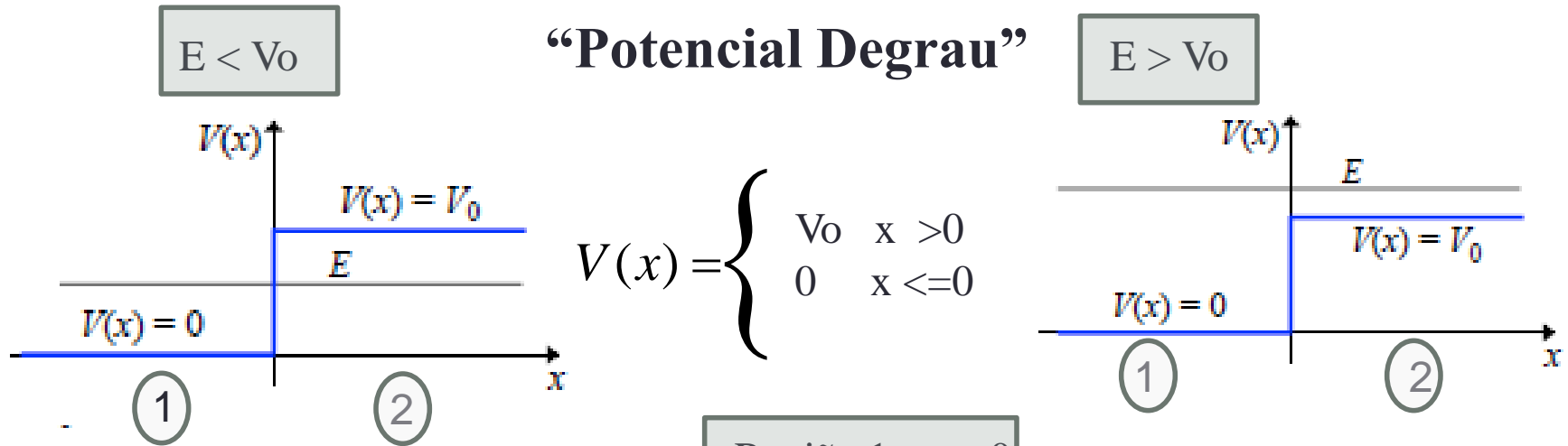
$$\delta = \frac{1}{k_1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

A função de onda no exterior é essencialmente zero além da distância δ , em ambos os lados do poço de potencial

$$E_n \approx \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(L + 2\delta)^2}$$

Energia da partícula ligada no poço finito

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



Região 1 $x < 0$

1) Caso $E < V_0$

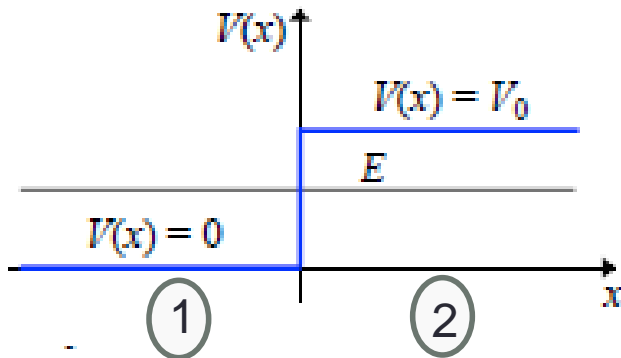
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Solução da partícula livre}$$

Região 2 $x > 0$

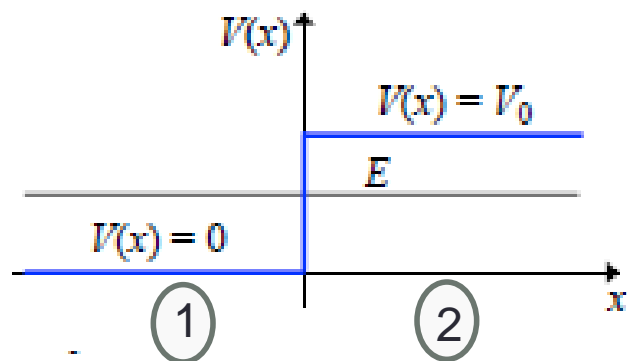
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x)$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x} \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$x \rightarrow \infty, \psi(x) \rightarrow 0$$

- 1) **Condição de finitude**
 $x > 0$ região 2

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$

$$D=0$$

- 2) **Condição de continuidade a função e da derivada**

$$\psi_{1(x=0)} = \psi_{2(x=0)}$$

$$Ae^0 + Be^0 = C$$

$$A + B = C$$

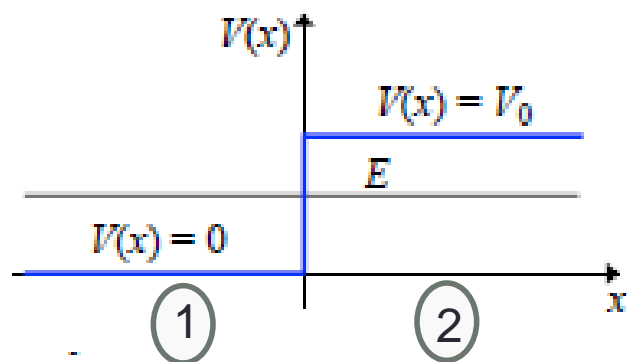
$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

$$Aik_1e^0 - Bik_1e^0 = -Ck_2e^0$$

$$A - B = i\frac{k_2}{k_1}C$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$A + B = C \quad (1)$$

$$A - B = i \frac{k_2}{k_1} C \quad (2)$$

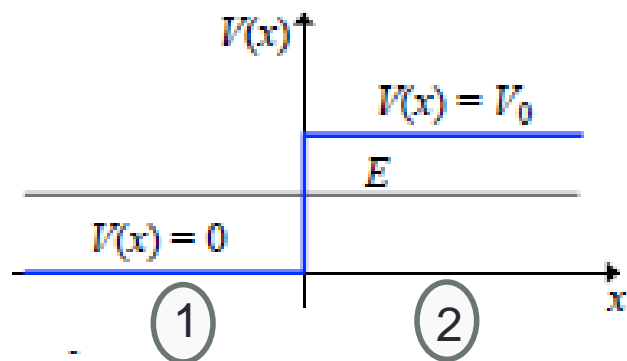
$$(1) + (2) \quad A = \frac{C}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

$$(2) - (1) \quad B = \frac{C}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} + \frac{C}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : } x < 0 \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : } x > 0 \end{cases}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} \quad \text{Região 2}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} + \frac{C}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : } x < 0 \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : } x > 0 \end{cases}$$

Coeficiente de Reflexão:

O fluxo de partículas na direção da onda, ou seja número de partículas que atravessam, uma certa posição por unidade de tempo é dado por

$$\psi^*(x) \cdot \psi(x) \quad \text{Veze a velocidade das partículas}$$

$$R = \frac{v_r \psi_r^* \psi_r}{v_i \psi_i^* \psi_i}$$

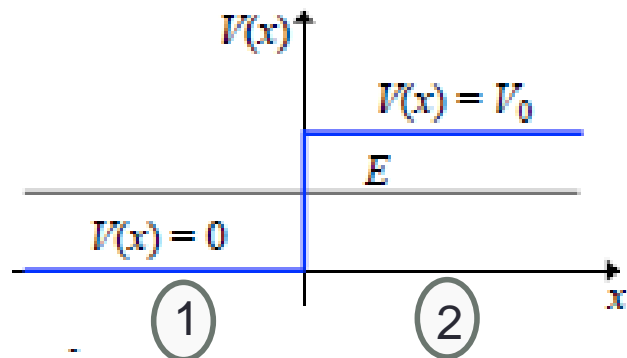
$$R = \frac{B^* B}{A^* A} \quad v_r = v_i$$

$$\boxed{R = 1}$$

De pleno acordo com a mecânica clássica para $x < 0$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



Coeficiente de Reflexão:

O fluxo de partículas na direção da onda, ou seja número de partículas que atravessam, uma certa posição por unidade de tempo é dado por

$$\psi^*(x) \cdot \psi(x)$$

$$\psi^*(x) \cdot \psi(x) = C^* C e^{-2k_2 x}$$

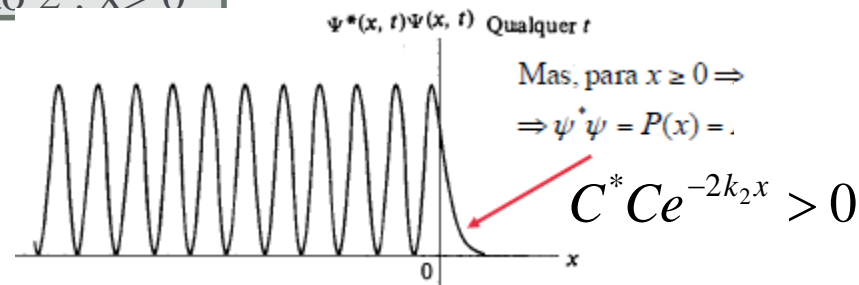
$$\psi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

Região 1

Região 2 : $x > 0$

$$\psi_2(x) = C e^{-k_2 x}$$

Região 2



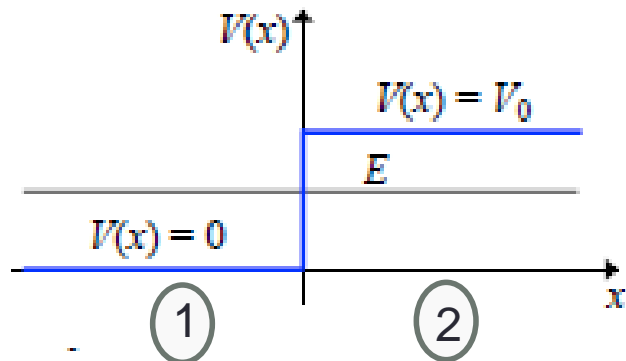
Nesta região temos $E < V_0$ e portanto energia cinética seria negativa

- classicamente esta é uma região proibida para as partículas
- Quanticamente pode-se encontrar a partícula nesta região, sendo que cada vez menos provável encontrar a partícula com o aumento de x .
- A penetração da partícula na região proibida (por intervalo muito pequenos) é possível devido ao princípio de incerteza
- A profundidade de penetração é pequena

$$\delta = \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} \quad \text{Região 2}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} + \frac{C}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : } x < 0 \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : } x > 0 \end{cases}$$

$$\frac{C}{2} (\alpha (\cos k_1x + i \operatorname{sen} k_1x) + \alpha^* (\cos k_1x - i \operatorname{sen} k_1x))$$

$$C \left(\cos k_1x - \frac{k_2}{k_1} \operatorname{sen} k_1x \right)$$

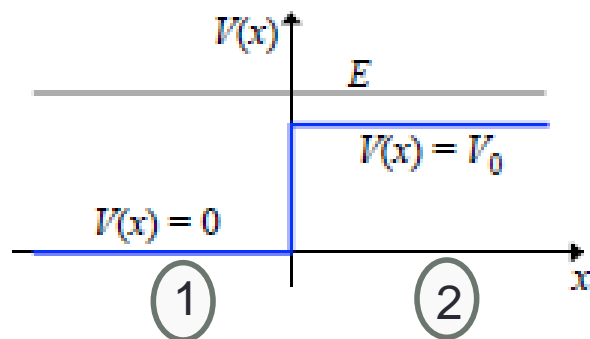
$$\alpha = \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

$$e^{ik_1x} = \cos k_1x + i \operatorname{sen} k_1x$$

$$\psi(x) = \begin{cases} C \cos k_1x - C \frac{k_2}{k_1} \operatorname{sen} k_1x & \text{Região 1 : } x < 0 \\ Ce^{-k_2x} & \text{Região 2 : } x > 0 \end{cases}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

1) **Condição de finitude** $x \rightarrow \infty, \psi(x) \rightarrow 0$
 $x > 0$ região 2

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$$

D=0 A onda não volta

2) **Condição de continuidade a função e da derivada**

$$\psi_{1(x=0)} = \psi_{2(x=0)}$$

$$Ae^0 + Be^0 = C$$

$$A + B = C$$

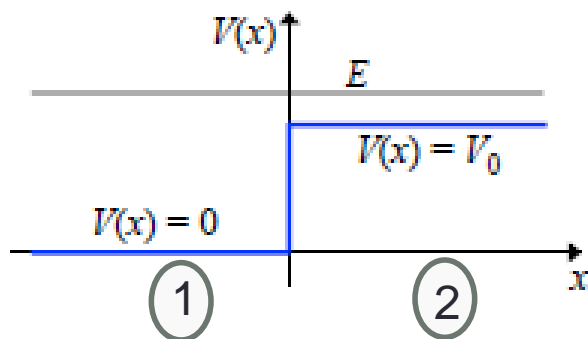
$$\frac{d}{dx} \psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx} \psi_{2(x=0)}$$

$$Aik_1e^0 - Bik_1e^0 = Cik_2e^0$$

$$A - B = \frac{k_2}{k_1} C$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\textcircled{1} \rightarrow \textcircled{2} \quad \frac{k_2}{k_1} (A + B) = A - B$$

$$A + B = C \quad \textcircled{1}$$

$$k_2(A + B) = k_1(A - B)$$

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A$$

$$A - B = \frac{k_2}{k_1} C \quad \textcircled{2}$$

$$(k_1 + k_2)B = (k_1 - k_2)A$$

Substituindo em 1

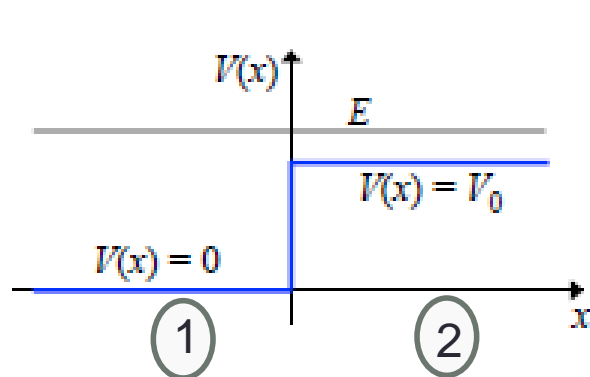
$$\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} + 1\right)A = C$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : } x < 0 \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} & \text{Região 2 : } x > 0 \end{cases}$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”

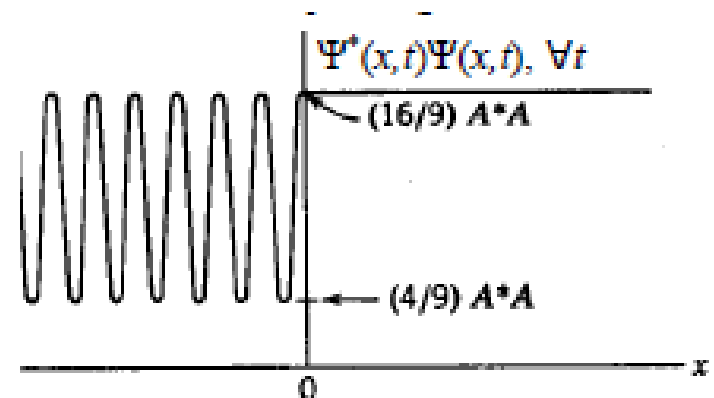


$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} \quad \text{Região 2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

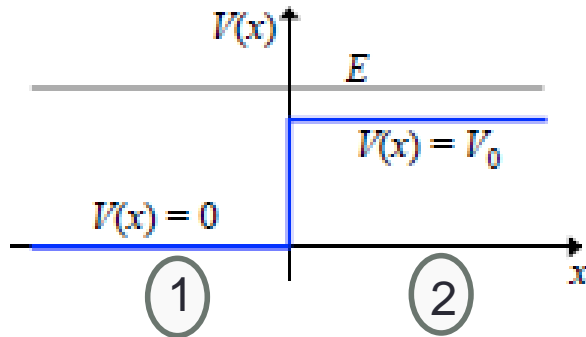
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : } x < 0 \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} & \text{Região 2 : } x > 0 \end{cases}$$

Caso de $k_1 = 2k_2$



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



Coeficiente de Reflexão e Transmissão:

Vamos definir fluxo de probabilidade (j)

$$j_{\text{incidente}} = v_{\text{inc}} A^* A$$

$$j_{\text{refletido}} = v_{\text{ref}} B^* B$$

$$j_{\text{transmitido}} = v_{\text{tran}} C^* C$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} \quad \text{Região 2}$$

reflexão:

$$R = \frac{j_{\text{refletido}}}{j_{\text{incidente}}} = \frac{v_{\text{ref}} B^* B}{v_{\text{inc}} A^* A}$$

$$v_{\text{inc}} = \frac{p_{\text{inc}}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$v_{\text{ref}} = \frac{p_{\text{ref}}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$v_{\text{trans}} = \frac{p_{\text{trans}}}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

transmissão:

$$T = \frac{j_{\text{transmitido}}}{j_{\text{incidente}}} = \frac{v_{\text{trans}} C^* C}{v_{\text{inc}} A^* A}$$

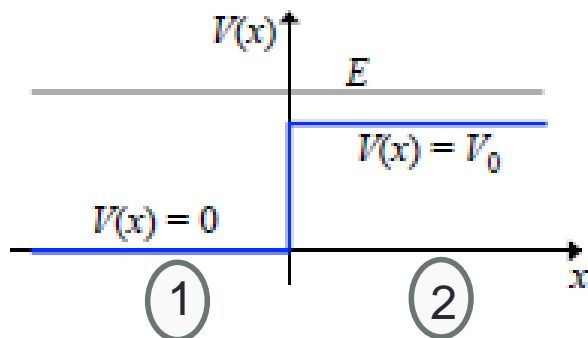
$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Potencial Degrau”



Coeficiente de Reflexão e Transmissão:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2$$

reflexão:

+

transmissão:

$$R + T = \frac{4k_2k_1}{(k_1 + k_2)^2} + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = 1$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

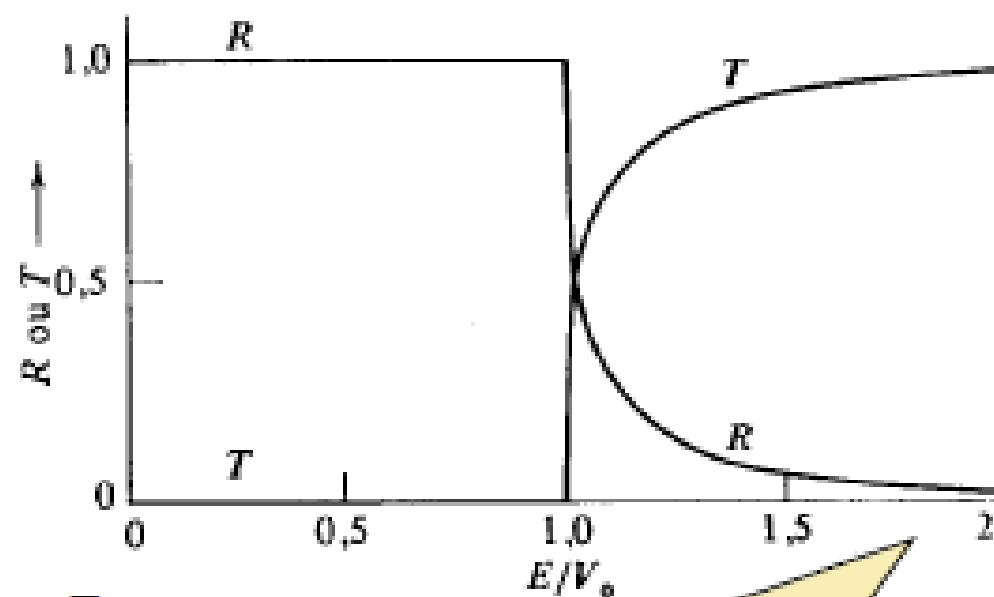
$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} \right)^2 \quad \boxed{E > V_0}$$

$$R = 1 - T = 1$$

$$\boxed{E < V_0}$$

Como $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$ e $T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$ temos que $R + T = 1$



$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2, \text{ se } \frac{E}{V_0} > 1$$

Fazer Ex. 6-3, pág. 257 (Eisberg)

R e T são simétricos pela troca $k_1 \leftrightarrow k_2$. Portanto, em termos de coeficientes de reflexão e transmissão, tanto faz se a partícula sobe ou desce o degrau.