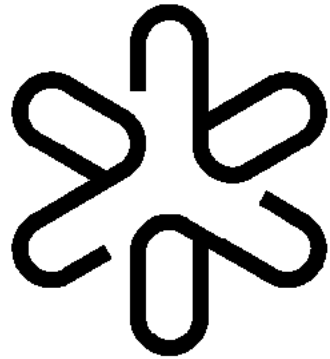




**Universidade de São Paulo  
Instituto de Física**

# **FÍSICA MODERNA I**

---

## **AULA 19**

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto  
Pelletron – sala 220  
rizzutto@if.usp.br**

**2o. Semestre de 2017**

Página do curso:

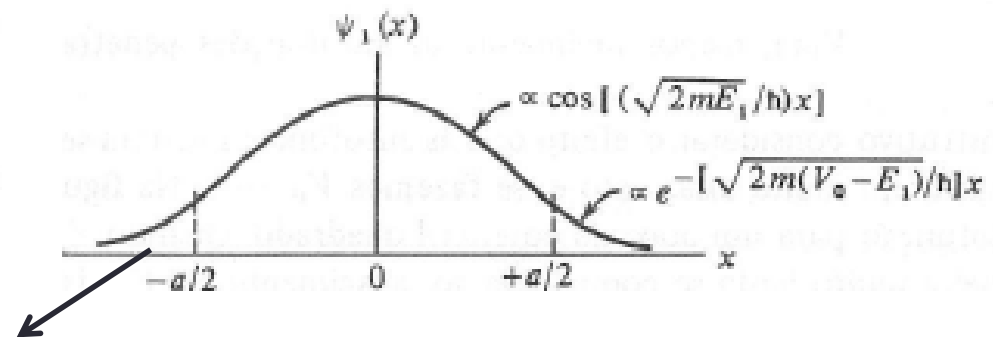
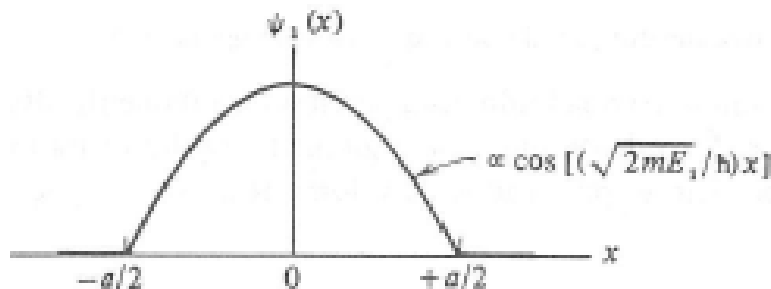
<https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=53869>

**18/10/2017**

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Partícula presa em um poço 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**  $\delta$  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  $\delta$ , 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

# Estados Ligados e não Ligados

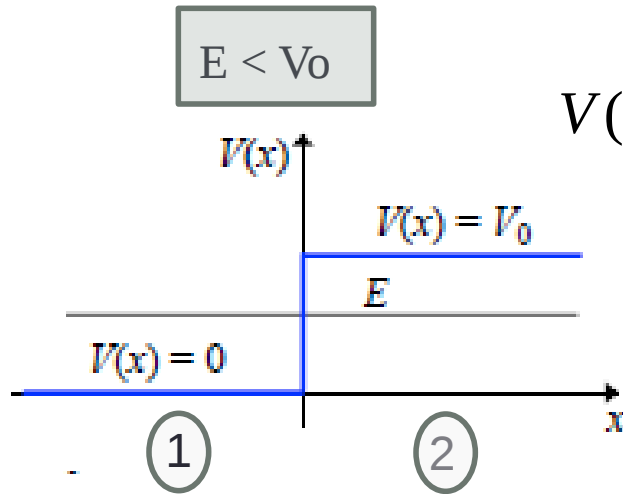
Um estado no qual  $\psi(x) \rightarrow 0$  quando  $x \rightarrow \infty, e, x \rightarrow -\infty$

se denomina **estado ligado**. Para um estado ligado, a probabilidade de encontrar a partícula se concentra em sua maior parte em uma região finita do espaço.

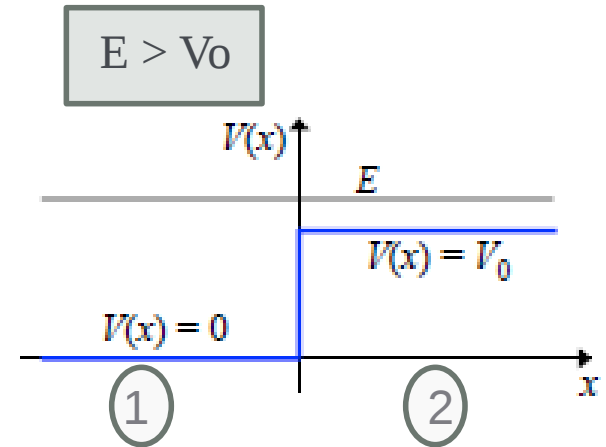
Para um estado **não ligado**, a função de onda  $\psi$  não tende a zero conforme  $x \rightarrow \pm\infty$  e não é normalizável.

- Para a partícula em um poço retangular:  
os estados com  $E < V_0$  são ligados e  
os estados com  $E > V_0$  são não ligados.
- Para a partícula na caixa de paredes infinitas, todos os estados são ligados,
- Para a partícula livre, todos os estados são não ligados.

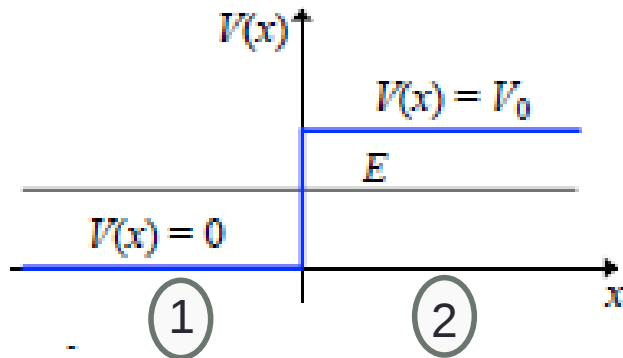
## “Potencial Degrau”



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases}$$



### 1) Caso $E < V_0$



Região 1  $x < 0$

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

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

Região 2  $x > 0$

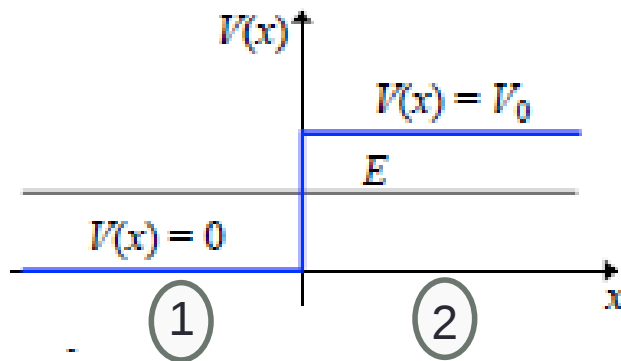
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x)$$

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

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

# 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

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

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

$$A + B = C$$

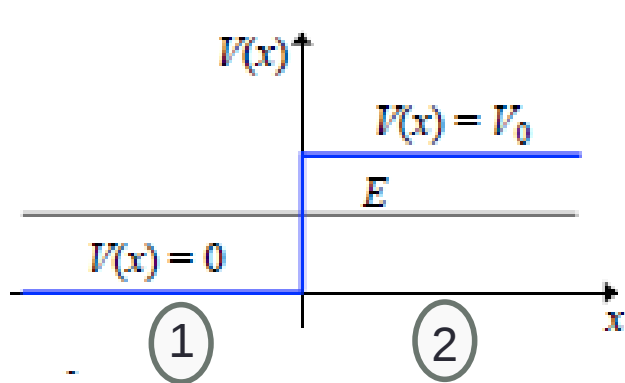
$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

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

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

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Potencial Degrau”



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

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

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

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

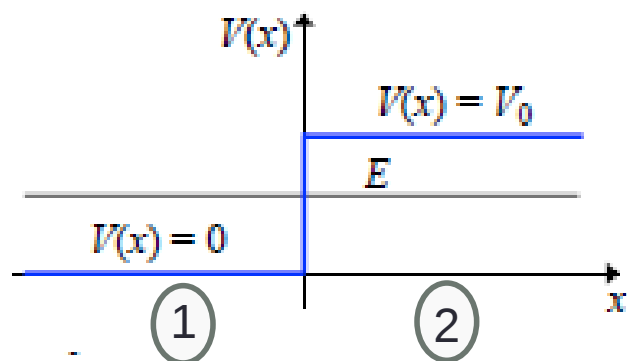
$$(1) + (2) \quad A = \frac{C}{2} \left( 1 + i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

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

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

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Potencial Degrau”



### 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

$\psi^*(x) \cdot \psi(x)$  vezes a velocidade das partículas

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

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

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

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

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

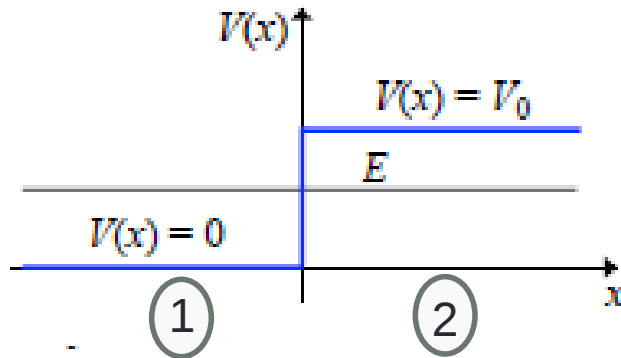
Região 1 :  $x < 0$

$$\boxed{R = 1}$$

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

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

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

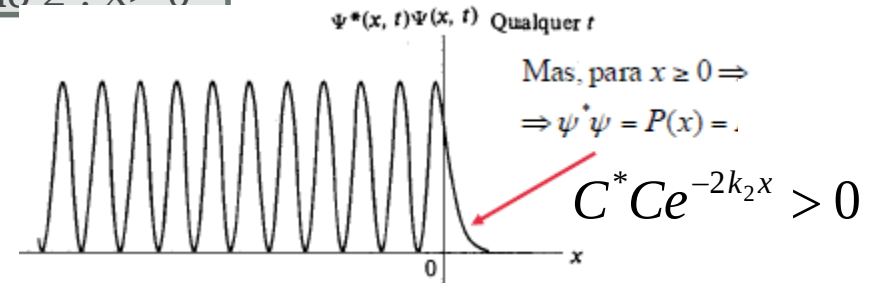
$$\psi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

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

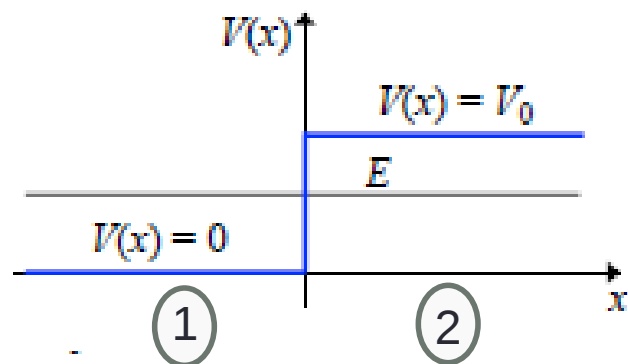
- classicamente esta é uma região proibida para as partículas
- Quanticamente pode-se encontrar a partícula nesta região, sendo que cada vez menos provável encontrar a partícula com o aumento de  $x$ .
- A penetração da partícula na região proibida (por intervalo muito pequenos) é possível devido ao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



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

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

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

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

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

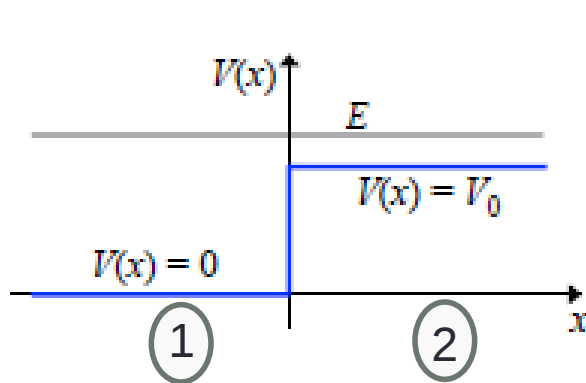
$$\alpha = \left( 1 + i \frac{k_2}{k_1} \right)$$

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

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

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Potencial Degrau”



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

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

A onda está indo da esquerda

- 1) Condição de finitude para a direita e não volta  
 $x > 0$  região 2

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

**D=0** A onda não volta

- 2) Condição de continuidade a função e da derivada

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

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

$$A + B = C$$

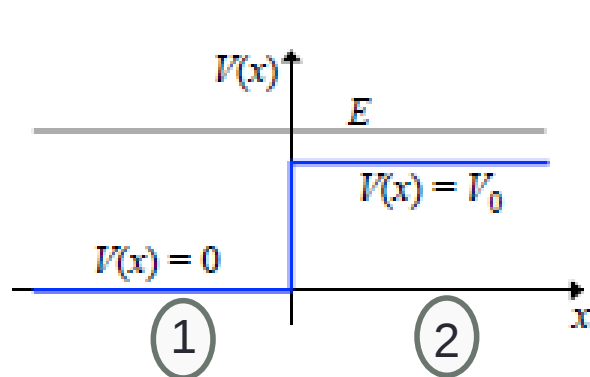
$$\frac{d}{dx} \psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx} \psi_{2(x=0)}$$

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

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

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Potencial Degrau”



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

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

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

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

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

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

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

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

Substituindo em 1

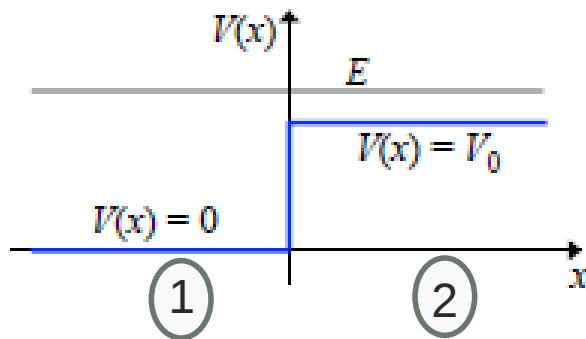
$$\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} + 1\right)A = C$$

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

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

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Potencial Degrau”

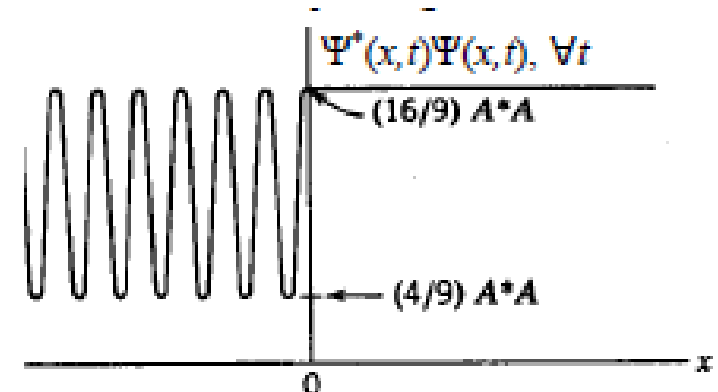


$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

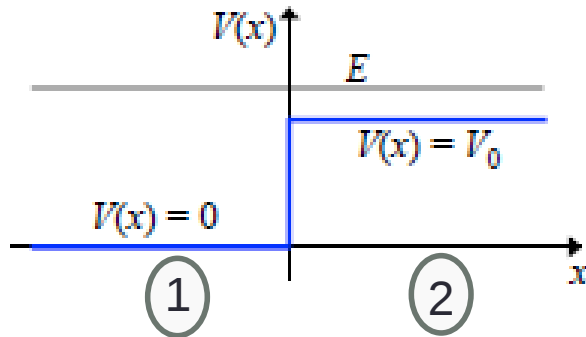
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : } x < 0 \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} & \text{Região 2 : } x > 0 \end{cases}$$

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:

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

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

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

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

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

transmissão:

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

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

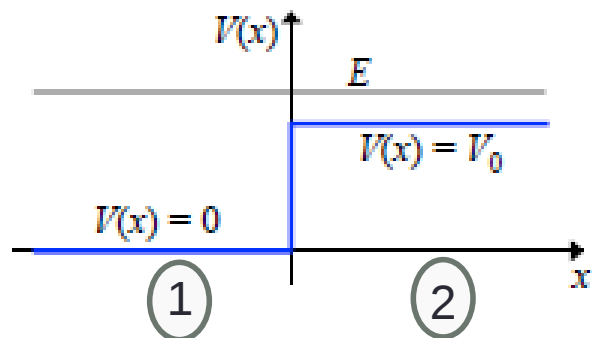
$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

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

# 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:

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

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

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

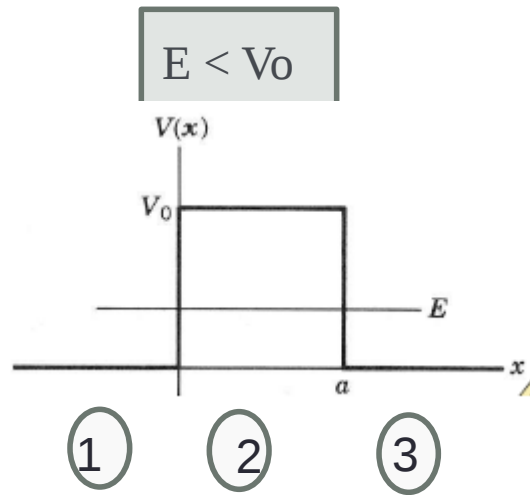
$$R = 1 - T = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} \right)^2$$

$$E > V_0$$

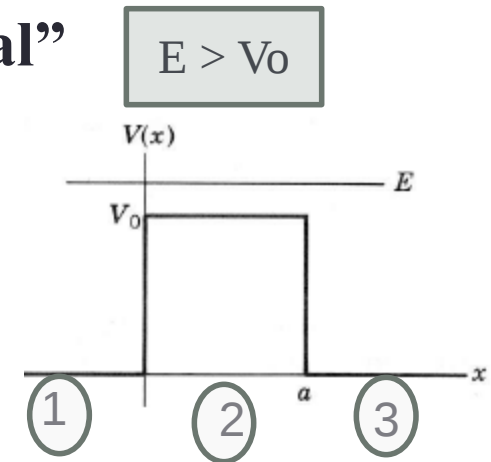
$$R = 1 - T = 1$$

$$E < V_0$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



“Barreira de Potencial”



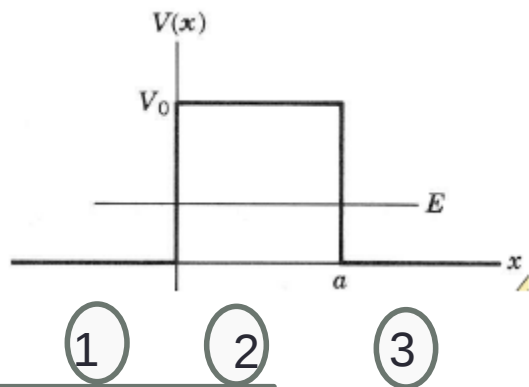
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

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  $0 < x < a$

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

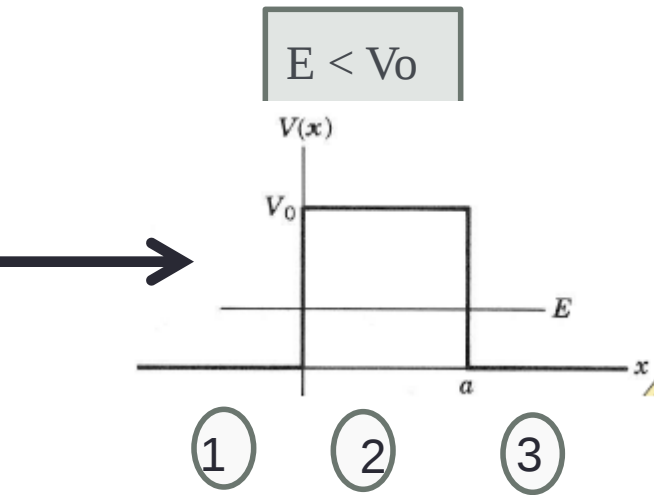
Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

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

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencial”



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

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

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

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

Região 2  $0 < x < a$

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

Onda vindo da esquerda para a direita e não volta e para estabelecer esta condição precisamos ter  $G = 0$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencial”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

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

Região 2  $0 < x < a$

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

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

## 2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$\left. \begin{aligned} \psi_{1(x=0)} &= \psi_{2(x=0)} \\ \frac{d}{dx} \psi_{1(x=0)} &= \frac{d}{dx} \psi_{2(x=0)} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik_1A - ik_1B &= -k_2C + k_2D \\ \frac{ik_1}{k_2}(A - B) &= -C + D \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_{2(x=a)} &= \psi_{3(x=a)} \\ \frac{d}{dx} \psi_{2(x=a)} &= \frac{d}{dx} \psi_{3(x=a)} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} Ce^{-k_2a} + De^{k_2a} &= Fe^{ik_1a} \\ -k_2Ce^{-k_2a} + k_2De^{k_2a} &= ik_1Fe^{ik_1a} \end{aligned}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencial”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

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

Região 2  $0 < x < a$

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

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

## 2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$A + B = C + D$$

①

$$ik_1A - ik_1B = -k_2C + k_2D$$

$$\frac{ik_1}{k_2}(A - B) = -C + D$$

$$A - B = \frac{ik_2}{k_1}(C - D)$$

②

1+2

$$2A = C\left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) + D\left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

$$2B = C\left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) + D\left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

1-2

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencial”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

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

Região 2  $0 < x < a$

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

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

## 2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

$$2De^{k_2a} = F\left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right)e^{ik_1a}$$

$$Ce^{-k_2a} + De^{k_2a} = Fe^{ik_1a}$$

$$-k_2Ce^{-k_2a} + k_2De^{k_2a} = ik_1Fe^{ik_1a}$$

$$-Ce^{-k_2a} + De^{k_2a} = \frac{ik_1}{k_2}Fe^{ik_1a}$$

$$D = \frac{F}{2}\left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right)\frac{e^{ik_1a}}{e^{k_2a}}$$

$$C = \frac{F}{2}\left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right)\frac{e^{ik_1a}}{e^{-k_2a}} = \frac{F}{2}\left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right)e^{(ik_1+k_2)a}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencial”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

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

Região 2  $0 < x < a$

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

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

**Deixar tudo em função de F  
que é amplitude da onda  
transmitida**

$$D = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

$$C = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{-k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 + k_2)a}$$

$$A = \frac{C}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

$$A = \frac{F}{4} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 + k_2)a} + \frac{F}{4} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”

Região 1  $x < 0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

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

Região 2  $0 < x < a$

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

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

Região 3  $x > a$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_1x}$$

**Deixar tudo em função de F  
que é amplitude da onda  
transmitida**

$$D = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

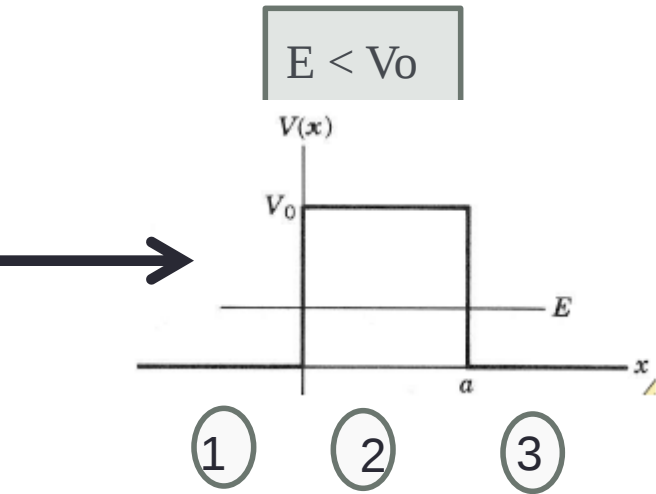
$$C = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \frac{e^{ik_1a}}{e^{-k_2a}} = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) e^{(ik_1 + k_2)a}$$

$$B = \frac{C}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) + \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

$$B = \frac{F}{4} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 + k_2)a} + \frac{F}{4} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2}\right) \left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right) e^{(ik_1 - k_2)a}$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”



### Coeficiente de Transmissão:

$$T = \frac{j_{transmitida}}{j_{incidente}} = \frac{v_{trans} F^* F}{v_{inc} A^* A}$$

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

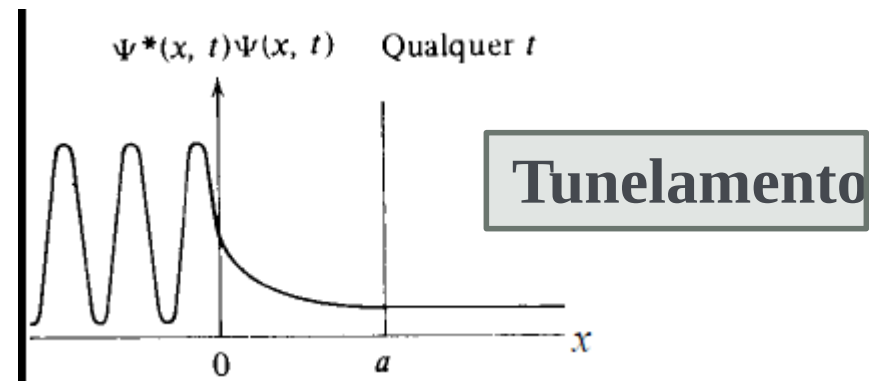
$$v_{trans} = \frac{p_{trans}}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$T = \frac{F^* F}{A^* A} = \left[ 1 + \frac{\sinh^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}$$

Na situação em que  $k_2 a \gg 1$

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2k_2 a}$$

Ao chegar a fronteira das regiões 2 e 3 a função de onda volta a apresentar o comportamento senoidal – probabilidade de encontrar a partícula do outro lado da barreira

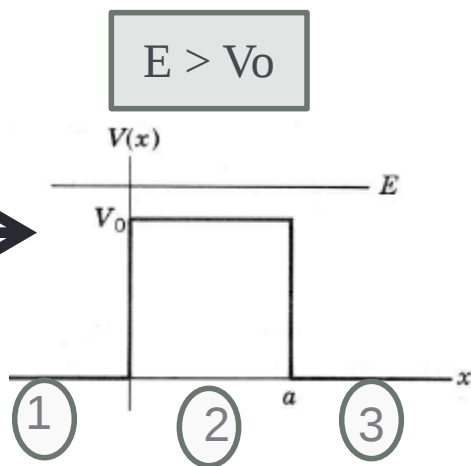


# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

## “Barreira de Potencia”

Coeficiente de Transmissão:

$$T = \frac{C^* C}{A^* A}$$



$$T = \frac{C^* C}{A^* A} = \left[ 1 + \frac{\sin^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left( \frac{E}{V_0} + 1 \right)} \right]^{-1}$$

Fazer como exercício:

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula sujeita ao potencial dos oscilador harmônico simples”  
É muito importante na física pois é um modelo de qualquer sistema que envolva oscilações:

- **Vibração de uma molécula em gases e sólidos**
- **Moléculas diatômicas**
- **Átomos na estrutura cristalina**
- **Partículas no núcleo atômico**

Partícula sujeita a uma força de restauração  $F = -Kx$

Cuja energia potencial é:

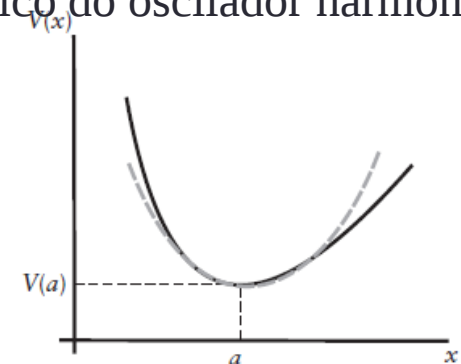
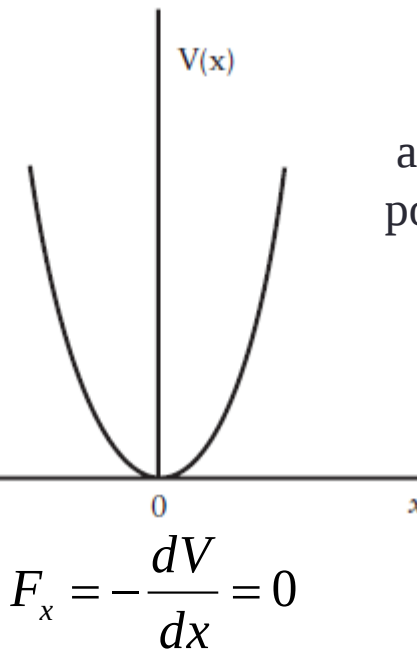
$$V(x) = \frac{1}{2} Kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x$$

Quanticamente sempre podemos aproximar o ponto de equilíbrio de um potencial qualquer,  $V(x)$ , pelo potencial parabólico do oscilador harmônico

Frequência angular de vibração

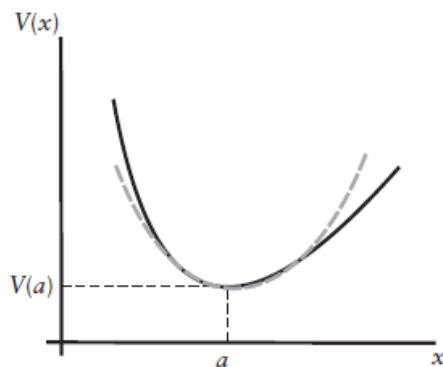
$$\omega = \left( \frac{K}{m} \right)^{1/2} = 2\pi f$$

Classicamente temos um potencial deste tipo onde a partícula fica em equilíbrio na origem ( $x=0$ ), onde  $V(x)$  é mínimo e a força é nula



# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Em torno do ponto  $x=a$  temos que  $V(x)$  tem um mínimo



$$\frac{d^2V}{dx^2} > 0 \quad \text{No ponto de equilíbrio estável}$$

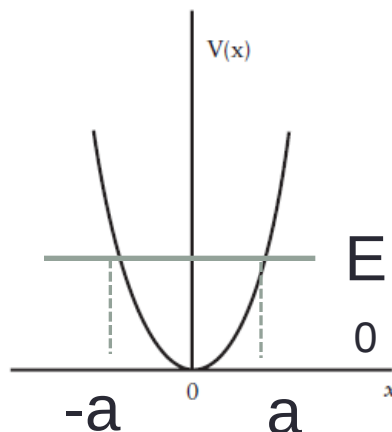
$$\frac{d^2V}{dx^2} < 0 \quad \text{No ponto de equilíbrio instável}$$

Próximo ao ponto de equilíbrio estável (como  $a$ ),  $V(x)$  pode ser ajustada a uma parábola

## Equação de Schrödinger

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

Queremos estudar agora descrição quântica quando a partícula é afastada da posição de equilíbrio passa a oscilar entre  $x=-a$  e  $x=a$



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

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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

Vamos analisá-la antes de resolvê-la

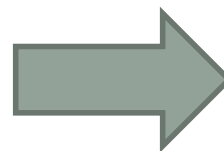
Sobre a energia:

Energia pode ser zero? Se  $E=0$   
então em  $x=0$   $V=0$  então  $E_c=0$

Mas se  $x=0$  e  $p=0$  o princípio de incerteza é violado já que conheço exatamente a posição e momento

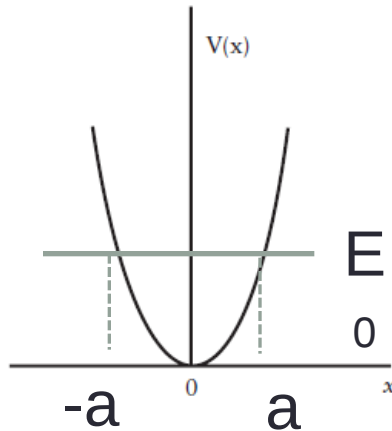
Como a partícula está confinada dentro do potencial pelas paredes, centrada em  $x=0$ , eu tenho zero probabilidade de encontrá-la em  $x=\text{infinito}$

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

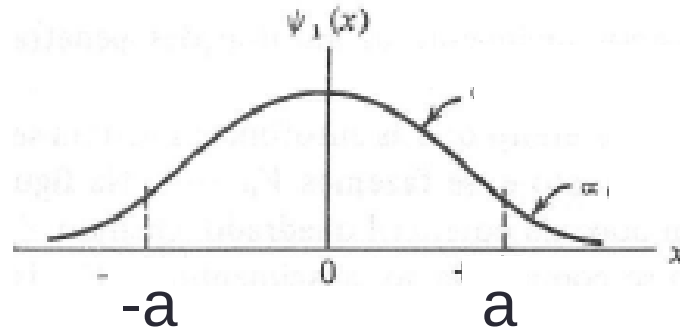


$$E \neq 0$$

# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



Sabemos que a função de onda não é zero em  $x = +a$  ou em  $x = -a$ , há uma pequena probabilidade de encontrar a partícula fora das paredes do potencial. A função de onda decai rapidamente para zero do outro lado da barreira.



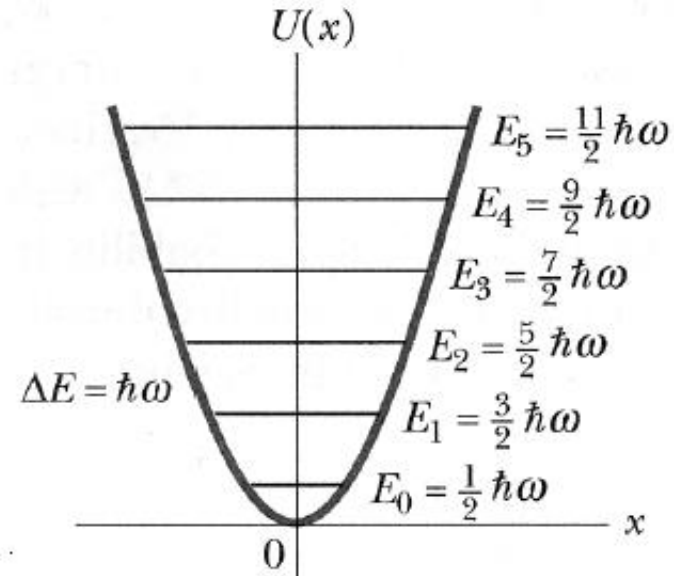
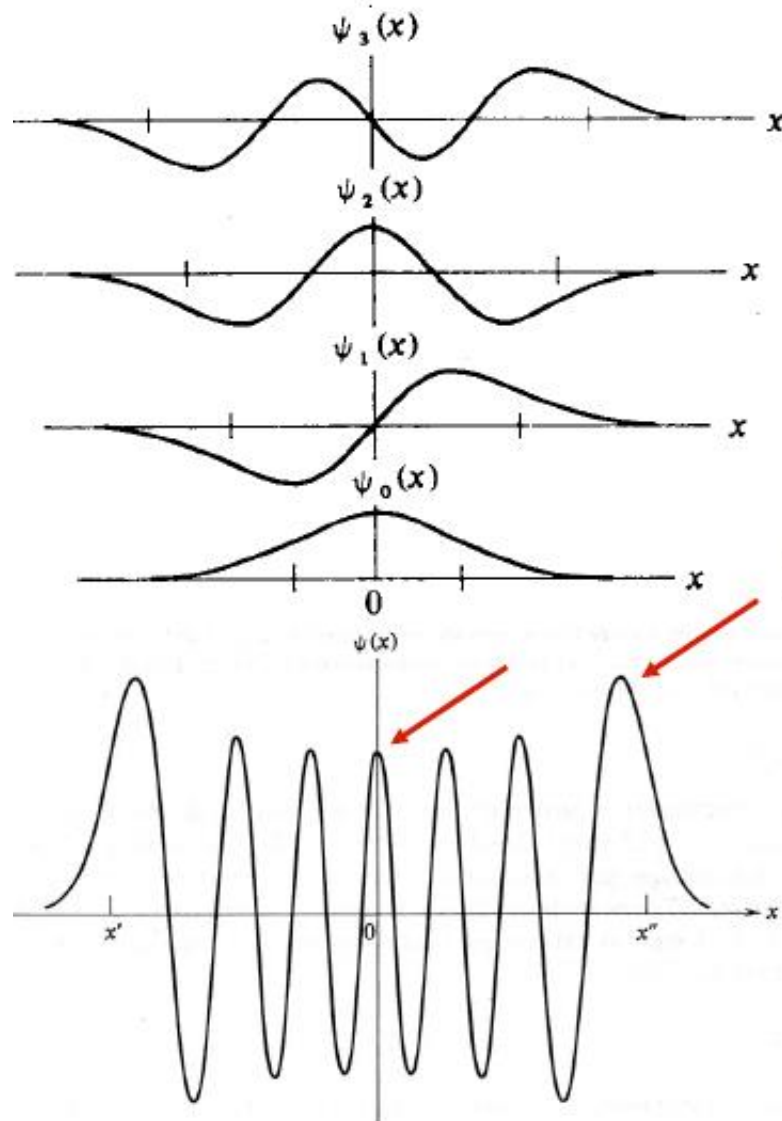
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{C}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\beta^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$x \ll 0$  próximo do equilíbrio

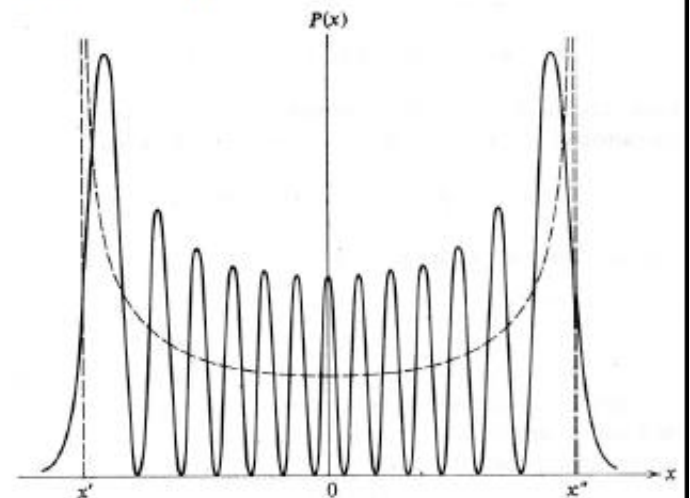
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\beta^2 \psi(x) \quad \psi(x) = A \cos \beta x + A \sin \beta x$$

# Voltando ao oscilador harmônico

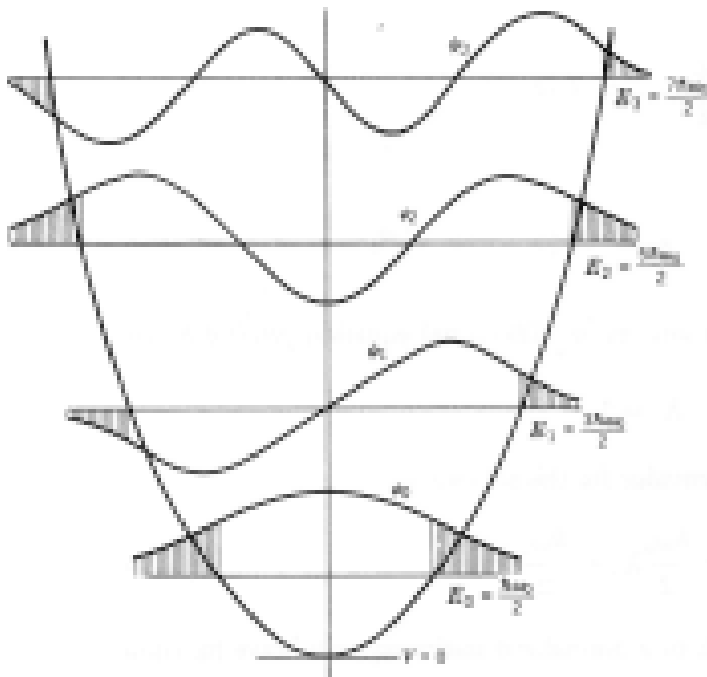


$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi$$

$$|\psi|^2 \rightarrow$$



# Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



$$E_n = (n + 1/2)h\nu \quad n=0,1,2,3....$$

Podemos escrever a solução da função de onda como:

$$\psi_n(x) = H_n[u(x)]e^{-\frac{u(x)^2}{2}}$$

$$u(x) = \left[ \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} \right] x$$

Onde  $H_n$  são polinômios de ordem  $n$ , com  $n \geq 0$

As funções  $H_n$  são relacionadas aos polinômios de Hermite que são tabelados

$$H_0[u(x)] = 1$$

$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$

$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$

$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$

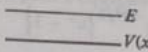
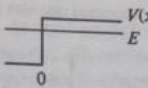
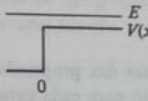
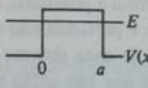
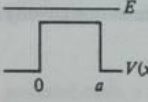
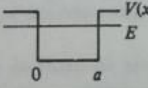
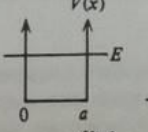
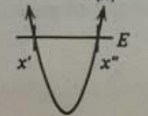
$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_2 = A_2 (1 - 2u^2) e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_1 = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_3 = A_3 (3u - 2u^3) e^{-\frac{u^2}{2}}$$

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

| Nome do Sistema                                | Exemplo Físico                                              | Energias Total e Potencial                                                          | Densidade de Probabilidade | Característica Significativa                     |
|------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|--------------------------------------------------|
| Potencial nulo                                 | Próton em um feixe de um cíclotron                          |    | $\Psi^* \Psi$              | Resultados usados para outros sistemas           |
| Potencial degrau (energia abaixo do topo)      | Elétron de condução próximo à superfície do metal           |    | $\Psi^* \Psi$              | Penetração na região proibida                    |
| Potencial degrau (energia acima do topo)       | Nêutron tentando escapar de um núcleo                       |    | $\Psi^* \Psi$              | Reflexão parcial na descontinuidade do potencial |
| Barreira de potencial (energia abaixo do topo) | Partícula $\alpha$ tentando escapar de barreira coulombiana |    | $\Psi^* \Psi$              | Efeito túnel                                     |
| Barreira de potencial (energia acima do topo)  | Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados |    | $\Psi^* \Psi$              | Nenhuma reflexão em certas energias              |
| Poço de potencial quadrado finito              | Nêutron num estado ligado no núcleo                         |   | $\Psi^* \Psi$              | Quantização da energia                           |
| Poço de potencial quadrado infinito            | Molécula estritamente confinada a uma caixa                 |  | $\Psi^* \Psi$              | Aproximação para um poço de potencial finito     |
| Potencial do oscilador harmônico simples       | Átomo de uma molécula diatômica vibrando                    |  | $\Psi^* \Psi$              | Energia de ponto zero                            |

# Conteúdo P2

- **Panorama da Física no final do século XIX**
- **Natureza Ondulatória da Radiação eletromagnética**
  - **Radiação Térmica – Hipótese de Planck**
- **Dualidade onda – partícula: Radiação eletromagnética e as propriedades corpusculares**
  - **Efeito fotoelétrico**
  - **Efeito Compton**
  - **Produção e aniquilação de pares**
  - **Difração de raios-X**
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades corpusculares**
  - **Natureza atômica da matéria**
  - **Modelo de Thomson**
  - **Modelo de Rutherford**
  - **Modelo de Bohr**
  - **Modelo de Sommerfeld –FranckHertz**
- **Dualidade onda – partícula: Matéria e as propriedades ondulatórias**
  - **Postulado de de Broglie**
  - **Difração de elétrons,**
  - **Difração de Bragg**
  - **Princípios de incerteza**
- **Teoria de Schroedinger da Mecânica Quântica**
  - **Equação de Schroedinger – equação de onda para o elétron**
  - **Autofunções e autovalores**
  - **Valores esperados**
  - **Equação de Schroedinger Depende e independente do tempo**
  - **Potenciais nulo, degrau e poço quadrado**
- **Átomo de Hidrogênio**

# BIBLIOGRAFIA

- 1) Física Quântica, Eisberg e Resnick (ER);  
Capítulo 3, 4 (4.8 até 4.12) , 5 , 6
- 2) Modern Physics for scientists and engineers, T. Thornton e Andrew Rex (TR);  
Capítulo 4 (4.7), 5, 6
- 3) Modern Physics de Serway, Moses e Moyer (SMM);  
Capítulo 4 (4.5), 5, 6,7
- 4) Física Moderna, Paul A. Tipler e Ralph A. Liewellyn (TL);  
Capítulo 4 (4.5), 5 , 6
- 5) Notas de aula do Professor Roberto V. Ribas (RR)  
Capítulo 4 (4.4), 5, 6
- 6) Física Moderna, Francisco Caruso e Vitor Oguri (FV)  
Capítulo 14, 15(até 15.3)