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 2018

Página do curso:
https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=64495

17/10/2018

Estados Ligados e não Ligados

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

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 ψ não tende a zero conforme $x \to \pm\infty$ 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.

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

Partícula dentro da caixa $0 \le x \le L$

Dentro da caixa V(x) = 0, fora V(x)=infinito

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

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

Para sair disto precisamos lembrar que para um estado estacionário podemos ter uma superposição de ondas :

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

$$\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{n}, n = 1,2,3...$$

$$\psi(x) = 2iA_1 senkx = Csenkx$$

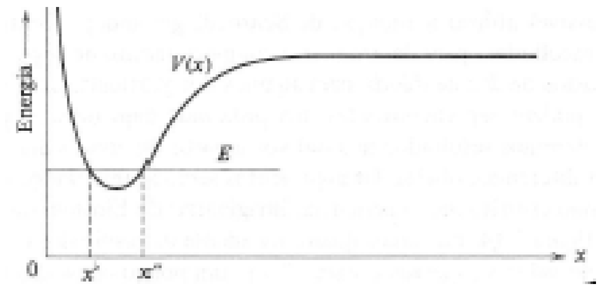
$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2L}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

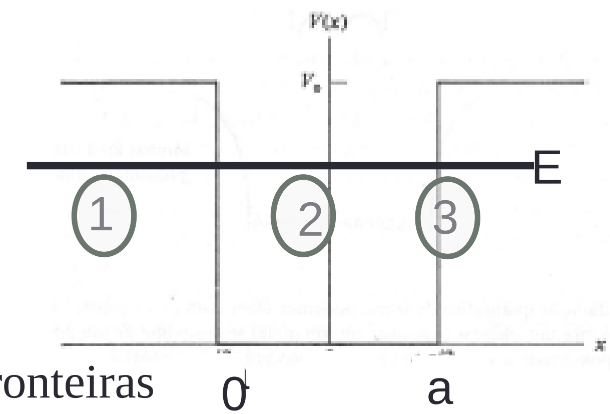
$$V(x) = \begin{cases} V_o & x<0 & \text{região 1} \\ 0 & 0<x<a & \text{região 2} \\ V_o & x>a & \text{região 3} \end{cases}$$



Região 2 – dentro do poço

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

$$\psi_2(x) = C\,sen\,k_2x + D\cos k_2x$$



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

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1x} + Be^{-k_1x} \qquad \psi_3(x) = Fe^{k_1x} + Ge^{-k_1x}$$

1) Condição de finitude

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

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

F=0

B=0

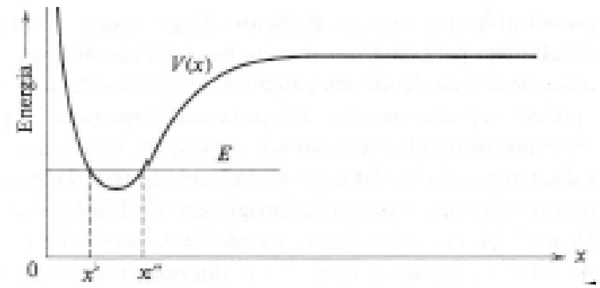
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Partícula presa em um poço finito quadrado

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$$ Região 1

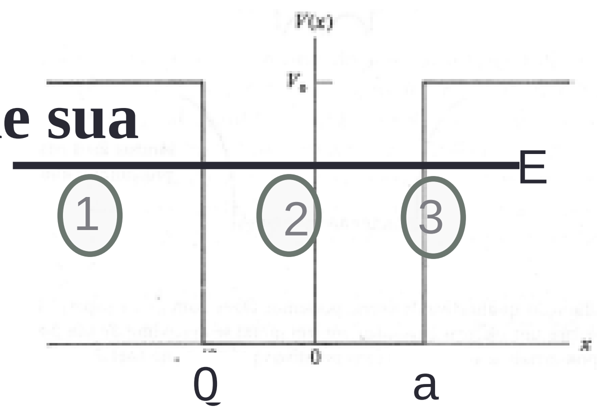
$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$$ Região 3

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



$$\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}\,k_2 x + D\cos k_2 x$$ Região 2

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



2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

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

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

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

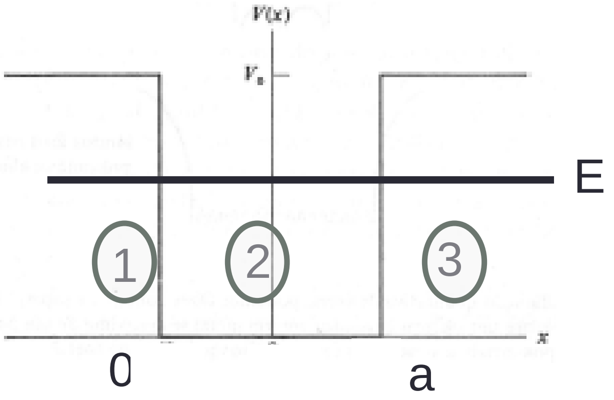
$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x} \quad \text{Região 1}$$

$$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x} \quad \text{Região 3}$$

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

$$\psi_2(x) = C\,\mathrm{sen}\,k_2 x + D\cos k_2 x \quad \text{Região 2}$$

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



2) Condição de continuidade a função

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

$$Ae^0 = C\,\mathrm{sen}0 + D\cos 0$$

$$\boxed{A = D}$$

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

$$C\,\mathrm{sen}\,k_2 a + D\cos k_2 a = Ge^{-k_1 a}$$

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Partícula presa em um poço finito quadrado

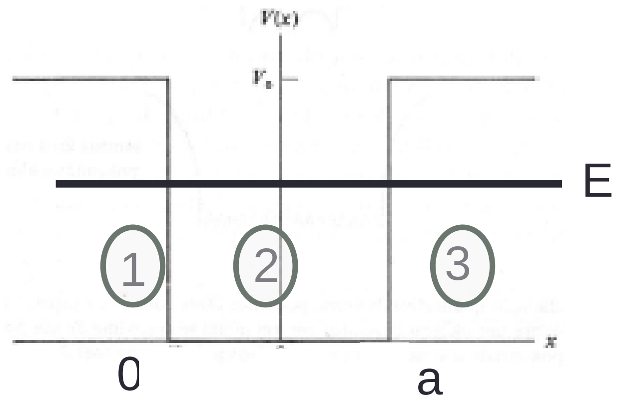
$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}$ Região 1

$\psi_3(x) = Ge^{-k_1 x}$ Região 3

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

$\psi_2(x) = C\,sen\,k_2 x + D\cos k_2 x$ Região 2

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



2) Condição de continuidade da derivada da função

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

$$k_1 A = Ck_2 \cos 0 - Dk_2 sen 0$$

$$\boxed{k_1 A = Ck_2}$$

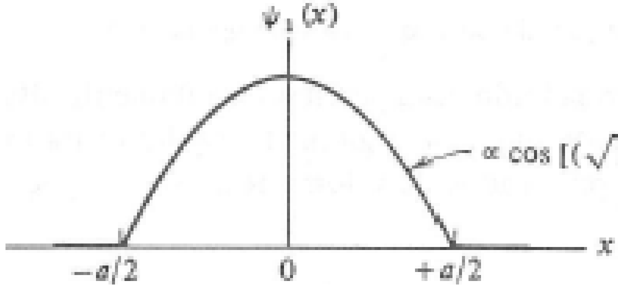
$$\frac{d}{dx}\psi_{2(x=a)} = \frac{d}{dx}\psi_{3(x=a)}$$

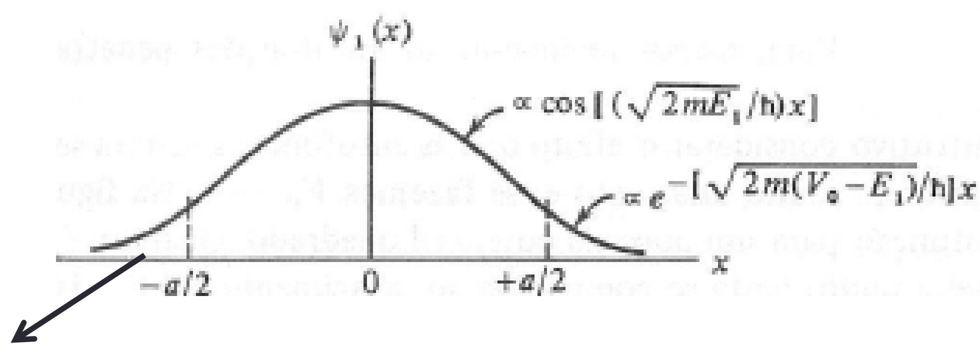
$$Ck_2 \cos k_2 a - Dk_2 sen k_2 a = -k_1 G e^{-k_1 a}$$

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 δ** dado por:

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

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

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

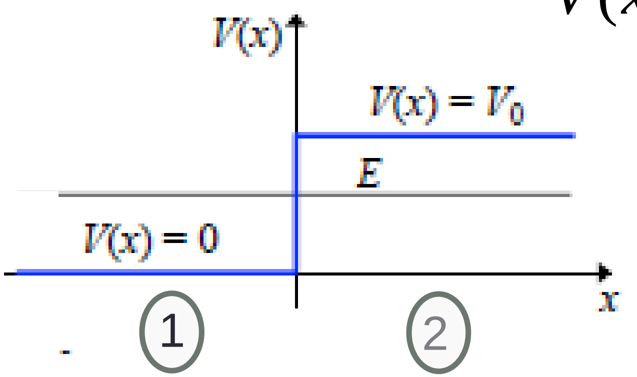
Energia da partícula ligada no poço finito

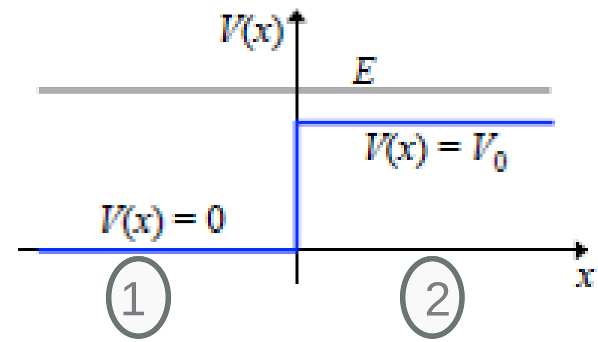
"Potencial Degrau"

E < Vo

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

E > Vo



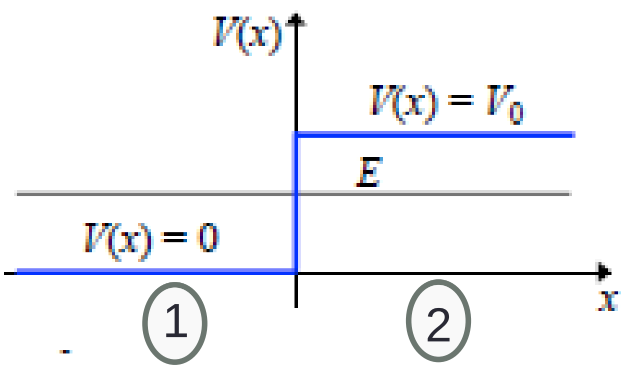


Região 1 x<0

1) Caso E< Vo

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

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



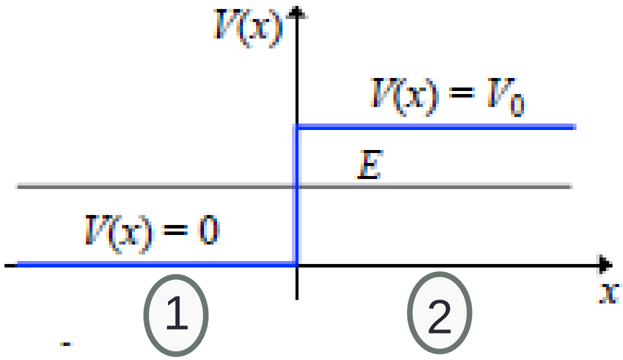
Região 2 x>0

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

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

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

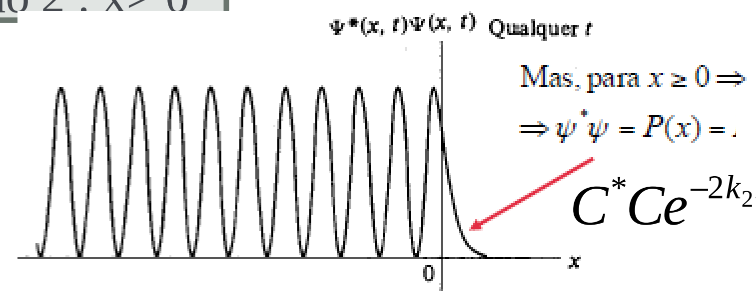
$$\psi^*(x).\psi(x)$$

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

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

Região 2 : x> 0

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$$ Região 2



$$C^* C e^{-2k_2x} > 0$$

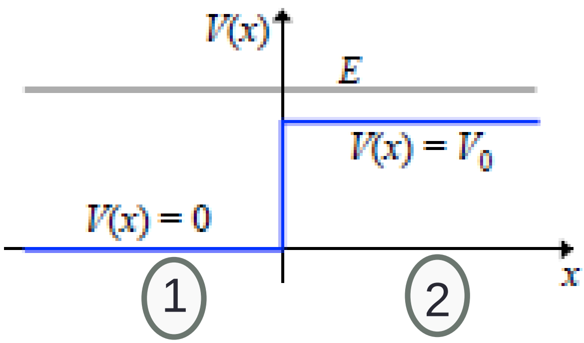
Nesta região temos E<Vo e portanto energia cinética seria negativa

- 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 muitos 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"



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

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

1) Condição de finitude $x \to \infty, \psi(x) \to 0$

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

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

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

$$\boxed{A + B = C}$$

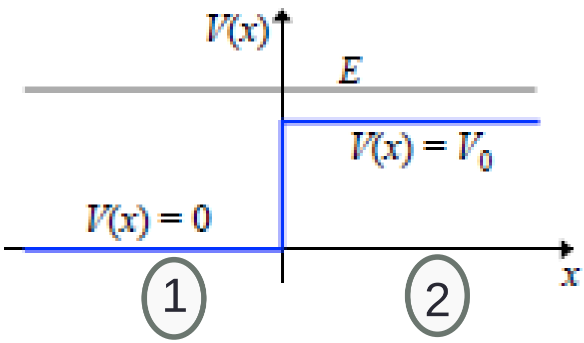
$$\frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} = \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)}$$

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Potencial Degrau"



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

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

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

$$A + B = C \qquad 1$$

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

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

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

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

Substituindo em 1

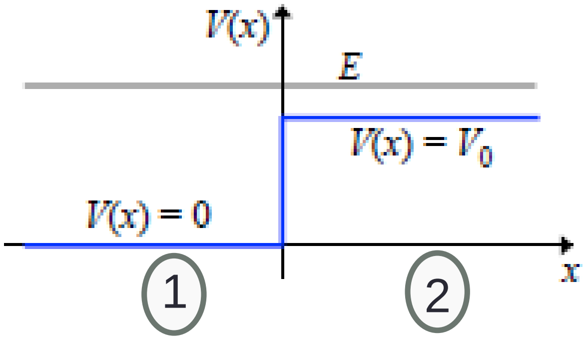
$$\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} + 1\right)A = C$$

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Potencial Degrau"

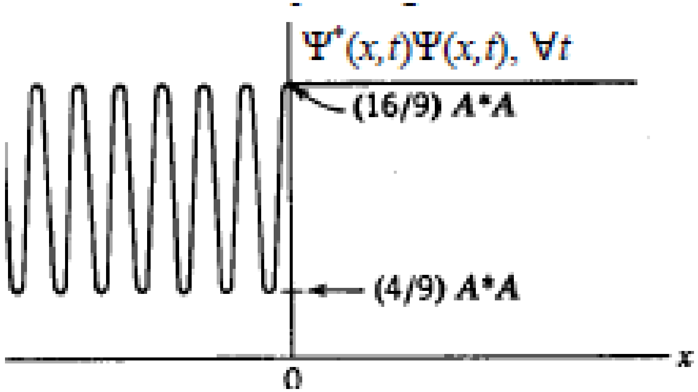


$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{Região 1} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

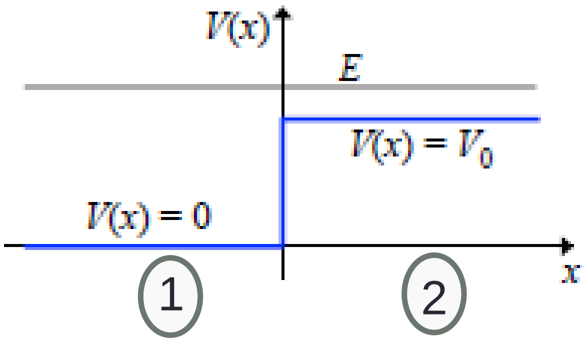
$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A\left(\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)e^{-ik_1x} & \text{Região 1 : x< 0} \\ A\dfrac{2k_1}{k_1 + k_2}e^{ik_2x} & \text{Região 2 : x> 0} \end{cases}$$

Caso de $k_1 = 2k_2$



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Potencial Degrau"



Coeficiente de Reflexão e Transmissão:

Vamos definir fluxo de probabilidade (j)

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

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

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

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$$ Região 1

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2 x}$$ Região 2

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

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

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

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

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

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

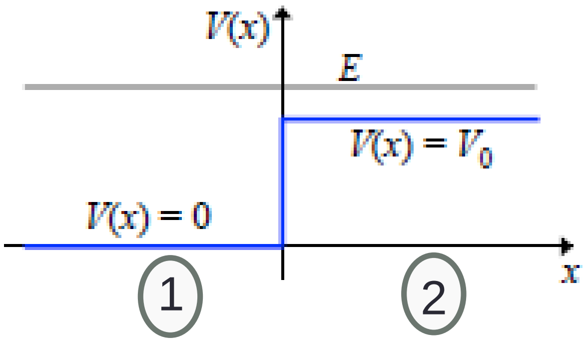
$$\boxed{R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2}$$

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Potencial Degrau"



Coeficiente de Reflexão e Transmissão:

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

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

reflexão: + transmissão:

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

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

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

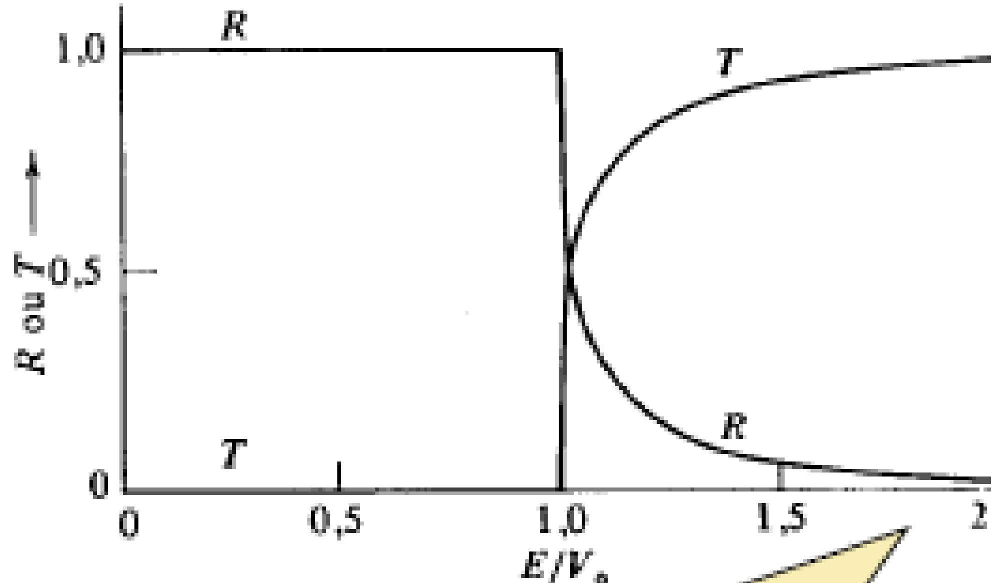
$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}\right)$$

$$\boxed{E > V_0}$$

$$R = 1 - T = 1$$

$$\boxed{E < V_0}$$

Como $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$ e $T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$ temos que $R + T = 1$



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

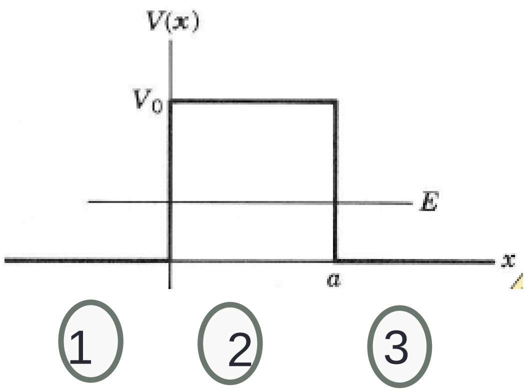
Fazer Ex. 6-3, pág. 257 (Eisberg)

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.

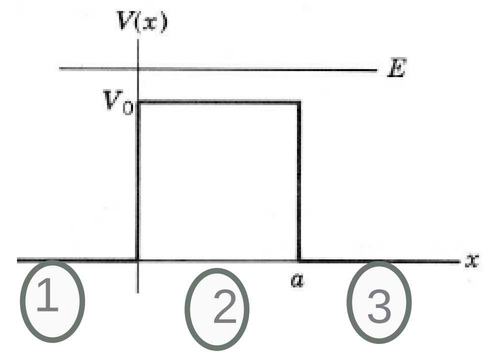
Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Barreira de Potencial"

E < Vo

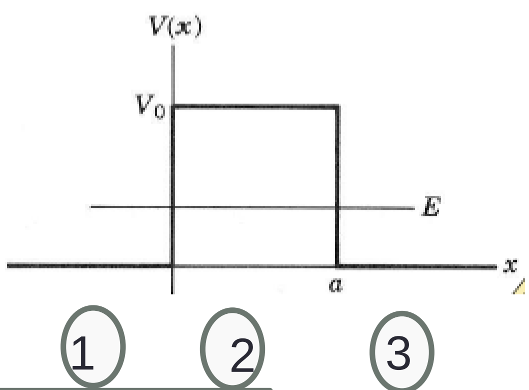


E > Vo



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

1) Caso E< Vo



Região 1 x<0

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

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

Região 2 0<x>a

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

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

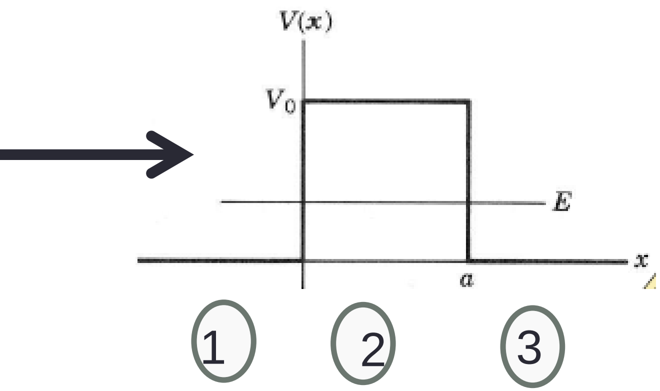
Região 3 x>a

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

E < Vo

“Barreira de Potencial”



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

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

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

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

$$\left.\begin{aligned} \psi_{1(x=0)} &= \psi_{2(x=0)} \\ \frac{d}{dx}\psi_{1(x=0)} &= \frac{d}{dx}\psi_{2(x=0)} \end{aligned}\right\}$$

$$A + B = C + D$$

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

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

$$\left.\begin{aligned} \psi_{2(x=a)} &= \psi_{3(x=a)} \\ \frac{d}{dx}\psi_{2(x=a)} &= \frac{d}{dx}\psi_{3(x=a)} \end{aligned}\right\}$$

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

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

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

$$\boxed{A + B = C + D}$$

1

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

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

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

2

1+2

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

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

1-2

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Barreira de Potencial”

Região	
Região 1	x<0
Região 2	0<x>a
Região 3	x>a

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

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

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

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

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

2) Condição de continuidade a função e de sua derivada

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

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

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

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

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

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

"Barreira de Potencial"

Região	
Região 1	x<0
Região 2	0<x>a
Região 3	x>a

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

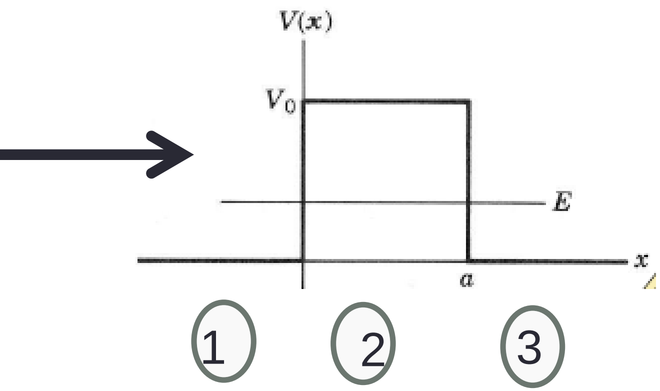
$$B = \frac{C}{2}(1-\frac{ik_2}{k_1}) + \frac{D}{2}(1+\frac{ik_2}{k_1})$$

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

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

E < Vo

"Barreira de Potencia"



Coeficiente de Transmissão:

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

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

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

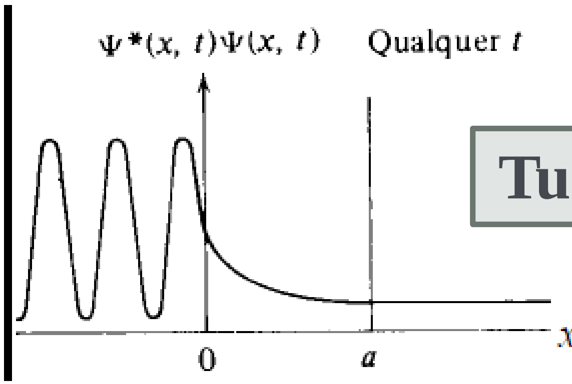
$$T = \frac{F^* F}{A^* A} = \left[1 + \frac{senh^2 k_2 a}{4\frac{E}{V_0}(1 - \frac{E}{V_0})} \right]^{-1}$$

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

Na situação em que $k_2 a >> 1$

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

430

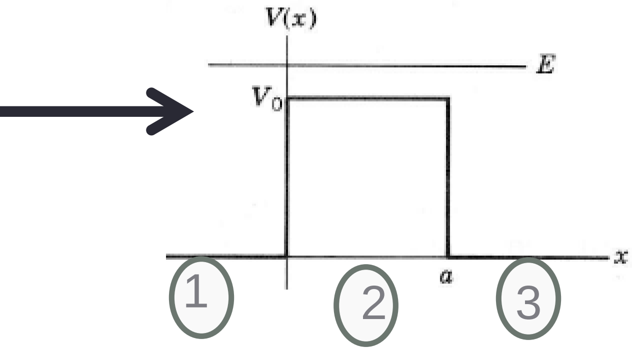


Tunelamento

Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

“Barreira de Potencia”

E > Vo



Coeficiente de Transmissão:

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

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

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**

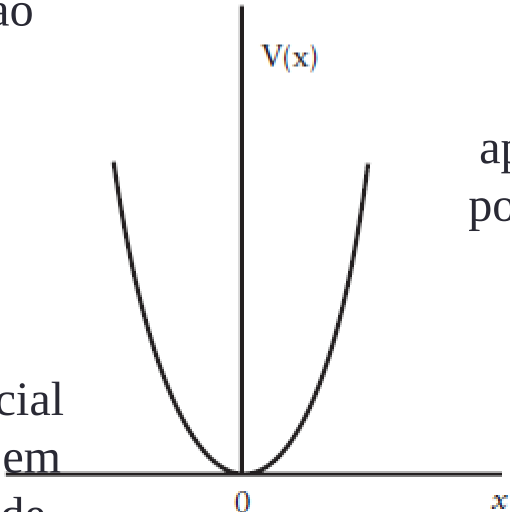
Partícula sujeita a uma força de restauração F=-Kx
Cuja energia potencial é:

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

Frequência angular de vibração

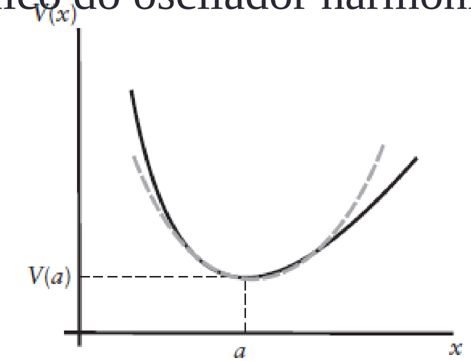
$$\omega = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} = 2\pi f$$

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



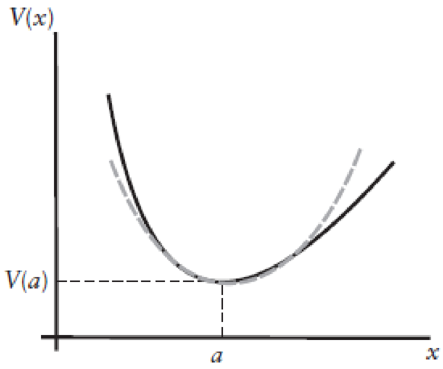
Classicamente temos um potencial deste tipo onde a partícula fica em equilíbrio na origem (x=0), onde V(x) é mínimo e a força é nula

$$F_x = -\frac{dV}{dx} = 0$$



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger

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



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

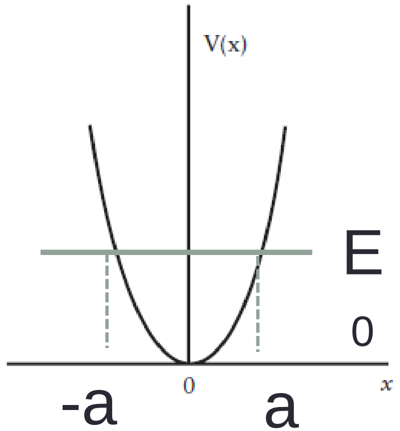
$$\frac{d^2V}{dx^2} > 0$$ No ponto de equilíbrio estável

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

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 resolve-la

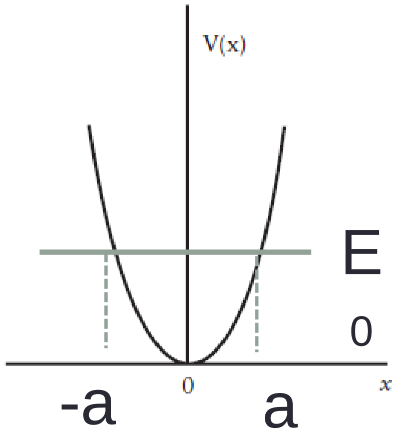
Como a partícula está confinada dentro do potencial pelas paredes, centrada em x=0, eu tenho zero probabilidade de encontra-la em x=infinito

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

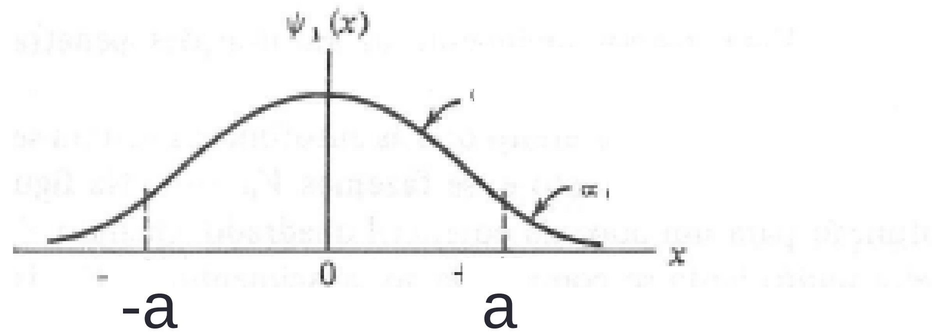
Sobre a energia:
Energia pode ser zero? Se E=0 então em x=0 V=0 então Ec=0
Mas se x=0 e p=0 o princípio de incerteza é violado já que conheço exatamente a posição e momento

$$\Rightarrow \quad E\neq 0$$

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 dos paredes do potencial, A função de onda decai rapidamente para zero do outro lado da barreira

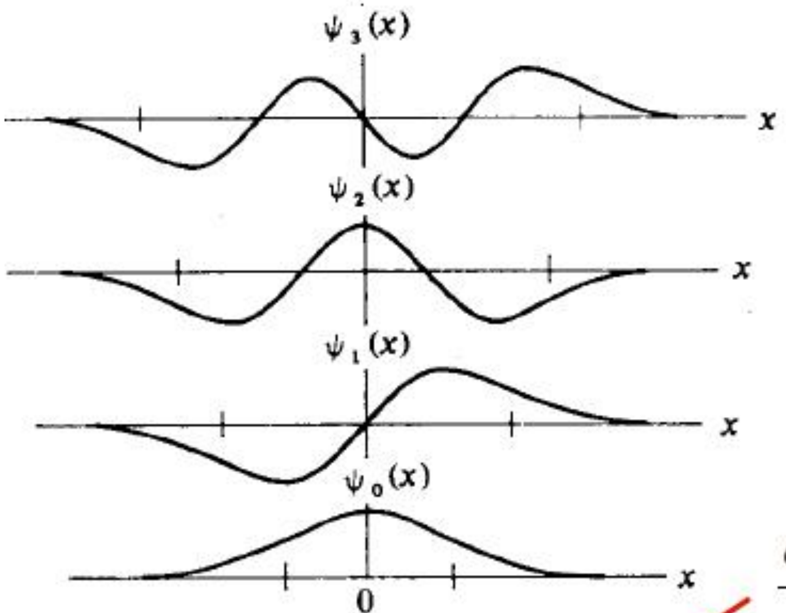


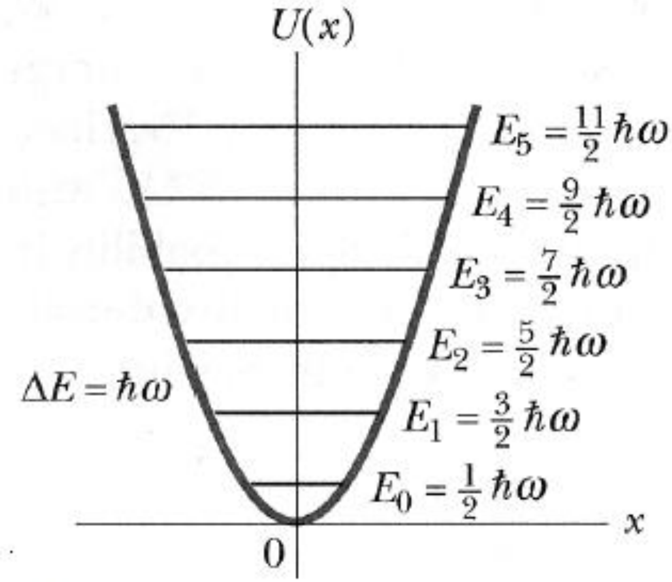
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{C}{2}x^2\psi(x)=E\psi(x) \qquad \beta^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

x<<<0 próximo do equilíbrio

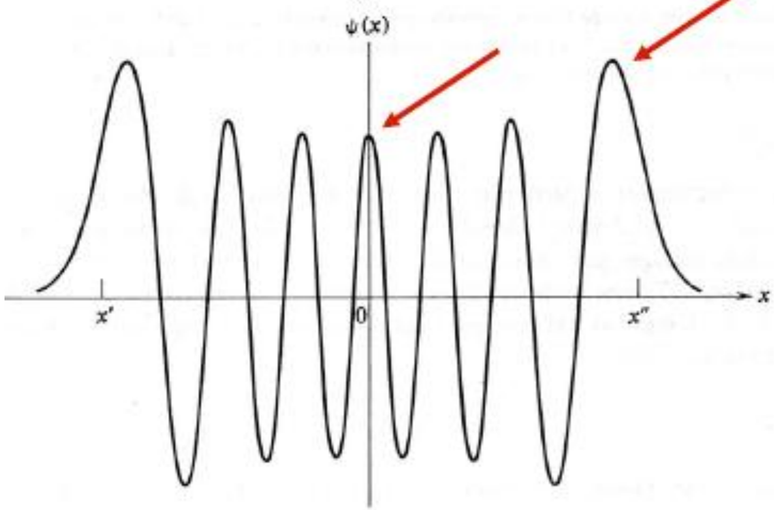
$$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=-\beta^2\psi(x) \qquad \psi(x)=A\cos\beta x+A\mathrm{sen}\,\beta x}$$

Voltando ao oscilador harmônico

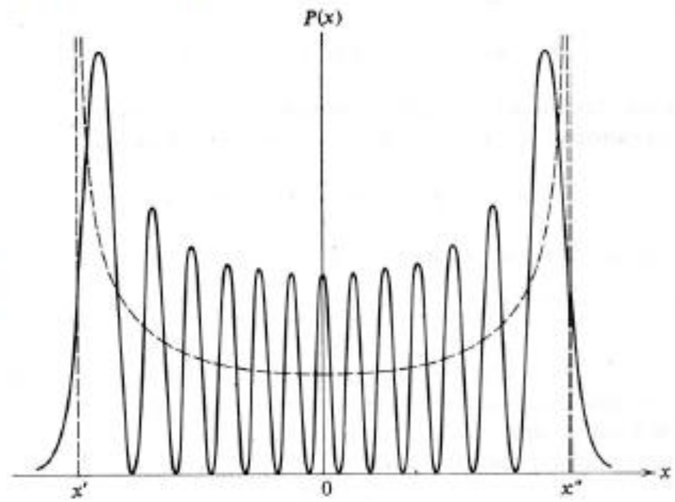




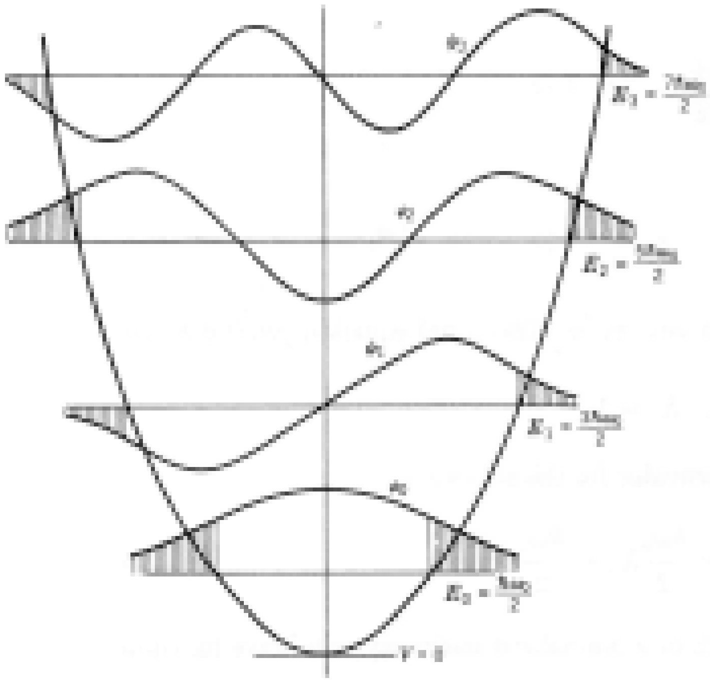
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi$$



$|\psi|^2$



Mecânica Quântica – Equação de Schrödinger



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

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>=0

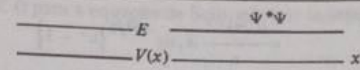
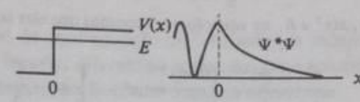
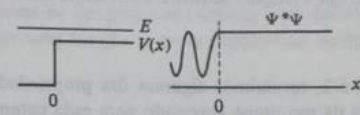
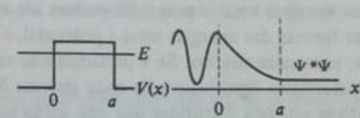
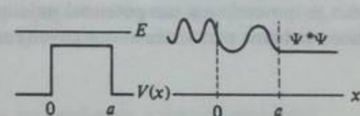
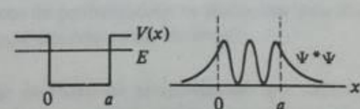
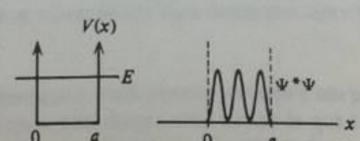
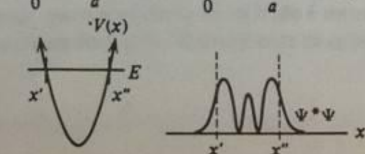
As funções H_n são relacionadas aos polinômios de Hermite que são tabelados

$$H_0[u(x)] = 1$$
$$H_1[u(x)] = 2u(x)$$
$$H_2[u(x)] = 4u(x)^2 - 2$$
$$H_3[u(x)] = 8u(x)^3 - 12u(x)$$

$$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}} \qquad \psi_2 = A_2(1 - 2u^2)e^{-\frac{u^2}{2}}$$

$$\psi_1 = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}} \qquad \psi_3 = A_3(3u - 2u^3)e^{-\frac{u^2}{2}}$$

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			Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal			Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo			Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula α tentando escapar de barreira coulombiana			Efeito túnel
Barreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados			Nenhuma reflexão em certas energias
Poço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo			Quantização da energia
Poço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa			Aproximação para um poço de potencial finito
Potencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando			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**
  - **Principios 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)