Física IV

Introdução à Física Moderna

Prof. Dr. Lucas Barboza Sarno da Silva

A equação de Schrödinger

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U\right)\psi$$

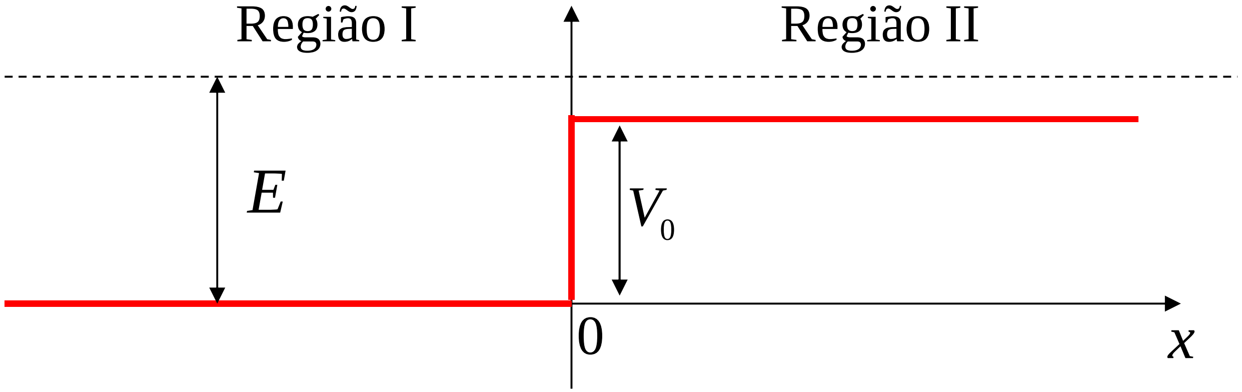
Equação de Schrödinger independente do tempo

U = energia potencial

Em princípio, se a energia potencial *U(x)* do sistema for conhecida, podemos resolver a equação de Schrödinger e ter **as funções de onda** e também **as energias dos estados permitidos**.

Uma vez que *U* varia com a posição, é necessário <u>resolver a equação em diferentes regiões do espaço</u>. Neste processo, as <u>funções de onda das diferentes regiões têm que se acoplar suavemente nas fronteiras</u> ($\psi(x)$) seja contínua)

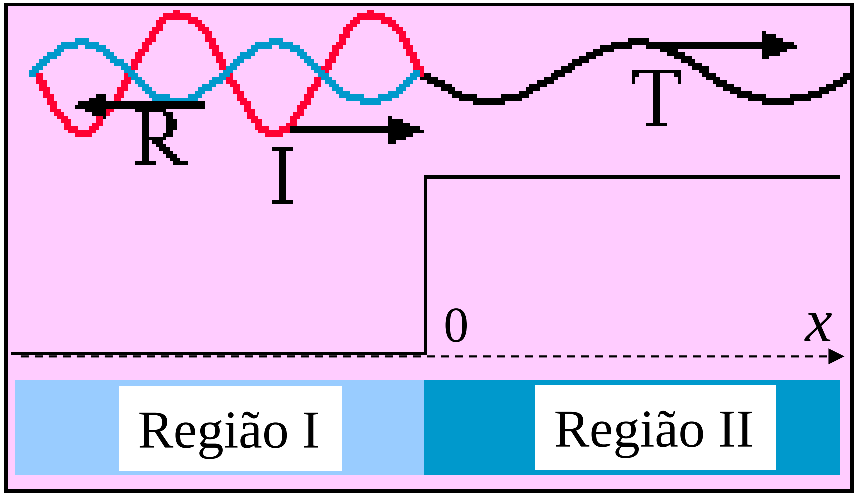
O potencial degrau ($E > V_0$)



$E > V_0$:

Região I: se $x < 0$; $\dfrac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + k_I^2\Psi_I(x) = 0$; onde $k_I^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: se $x > 0$; $\dfrac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + k_{II}^2\psi_{II}(x) = 0$; onde $k_{II}^2 = \dfrac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$



Soluções gerais:

Região I: $\psi_I(x) = A\exp(ik_I x) + B\exp(-ik_I x)$; onde $k_I^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

$x < 0$ Incidente Refletida

Região II: $\psi_{II}(x) = C\exp(ik_{II} x) + D\exp(-ik_{II} x)$; onde $k_{II}^2 = \dfrac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

$x > 0$ Transmitida Refletida

mas : $\boldsymbol{D = 0}$, pois não há onda refletida para $x > 0$.

Condições de contorno:

$$\Psi_I = \Psi_{II} \qquad \frac{d\Psi_I}{dx} = \frac{d\Psi_{II}}{dx} \longrightarrow x = 0$$

$$\begin{cases} \Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II} x} \end{cases}$$

$$\longrightarrow \quad Ae^{ik_{II} x} + Be^{-ik_I x} = Ce^{ik_{II} x}$$

$$Ae^{ik_{II} 0} + Be^{-ik_I 0} = Ce^{ik_{II} 0}$$

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

$$\begin{cases} \Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II} x} \end{cases}$$

$$\frac{d\Psi_I}{dx} = \frac{d\Psi_{II}}{dx} \longrightarrow x = 0$$

$$\frac{d\Psi_I}{dx} = Aik_I e^{ik_I x} - Bik_I e^{-ik_I x}$$

$$\frac{d\Psi_{II}}{dx} = Cik_{II} e^{ik_{II} x}$$

$$\longrightarrow \quad Aik_I e^{ik_I x} - Bik_I e^{-ik_I x} = Cik_{II} e^{ik_{II} x}$$

$$Aik_I e^{ik_I 0} - Bik_I e^{-ik_I 0} = Cik_{II} e^{ik_{II} 0}$$

$$Aik_I - Bik_I = Cik_{II}$$

$$k_I(A - B) = Ck_{II}$$

$$\begin{cases} A+B=C \\ k_I(A-B)=Ck_{II} \end{cases}$$

$$k_I(A-B)=k_{II}(A+B)$$

$$k_I A-k_I B=k_{II}A+k_{II}B$$

$$B(k_I+k_{II})=A(k_I-k_{II})$$

$$\boxed{B=\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}A}$$

$$C=A+\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}A$$

$$C=\left(1+\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}\right)A$$

$$C=\left(\frac{k_I+k_{II}+k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}\right)A$$

$$\boxed{C=\left(\frac{2k_I}{k_I+k_{II}}\right)A}$$

$$\frac{B}{A}=\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}$$ → amplitude de reflexão

$$\frac{C}{A}=\frac{2k_I}{k_I+k_{II}}$$ → amplitude de transmissão

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left(\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}\right)^2$$ → coeficiente de reflexão

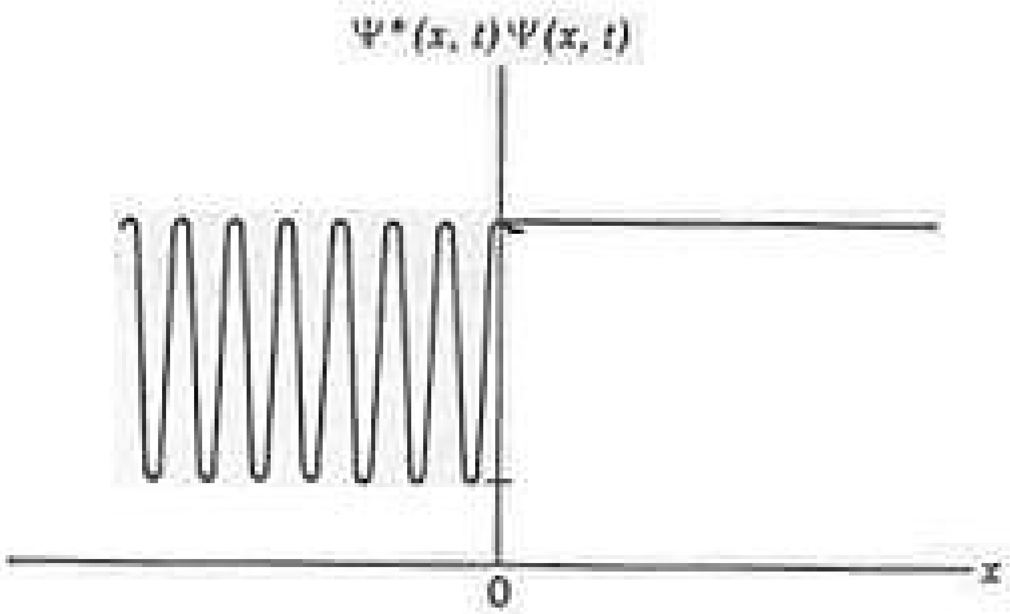
$$T=\frac{k_{II}}{k_I}\left|\frac{C}{A}\right|^2=\frac{4k_Ik_{II}}{(k_I+k_{II})^2}$$ → coeficiente de transmissão

$$R+T=1$$

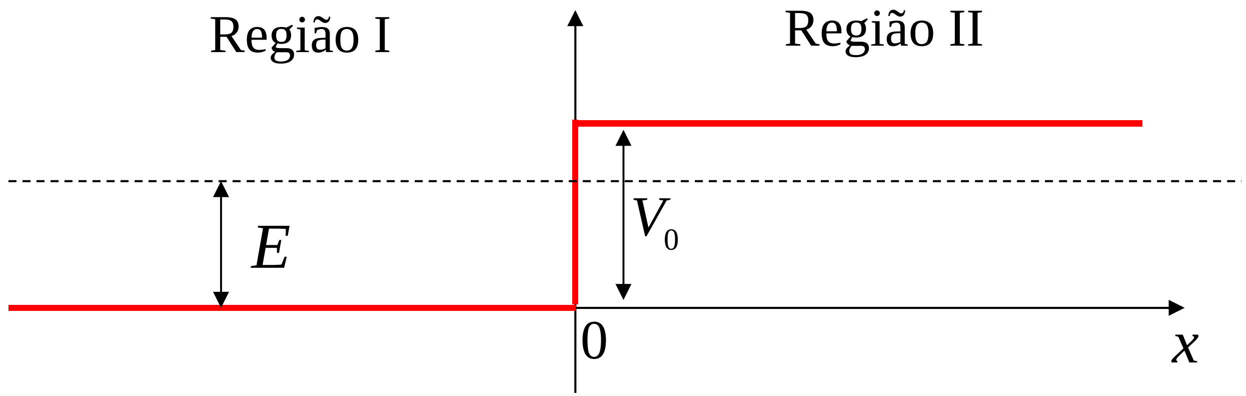
Densidade de probabilidade:

Sabendo que a parte real da função de onda, para $x \geq 0$, se propaga de acordo com a função $\cos(k_{II} x)$ e que a densidade de probabilidade

$$\Psi_{II}^*(x)\Psi_{II}(x) = y^* e^{-ik_{II}x} y e^{ik_{II}x} = 1$$



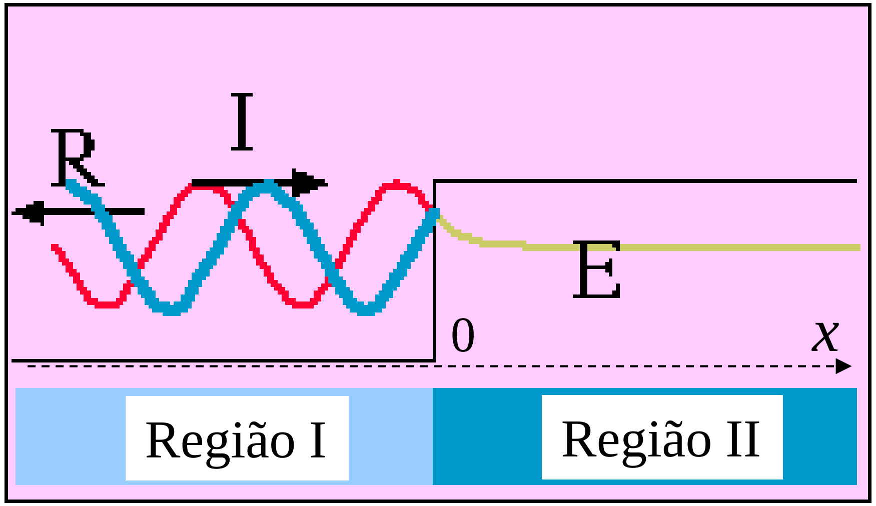
O potencial degrau ($E < V_0$)



$E < V_0$:

Região I: se $x < 0;\ \dfrac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + k_I^2 \psi_I(x) = 0$;onde $k_I^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: se $x > 0;\ \dfrac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} - k_{II}^2 \psi_{II}(x) = 0$;onde $k_{II}^2 = \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$



Soluções gerais:

Região I: $\psi_I(x) = A\exp(ik_I x) + B\exp(-ik_I x)$; onde $k_I^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

$x < 0$ Incidente Refletida

Região II: $\psi_{II}(x) = C\exp(k_{II} x) + D\exp(-k_{II} x)$; onde : $k_{II}^2 = \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

$x > 0$ Transmitida

mas : $C = \mathbf{0}$, para evitar valores infinitos para ψ em $x > 0$.

$$\frac{B}{A} = \frac{k_I - ik_{II}}{k_I + ik_{II}}$$ → amplitude de reflexão

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1$$ → coeficiente de reflexão

$$T = 0$$ → coeficiente de transmissão

$$\psi_{II}(x) = D\exp(-k_{II}x) \Rightarrow \lambda = \frac{1}{k_{II}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Comprimento de penetração

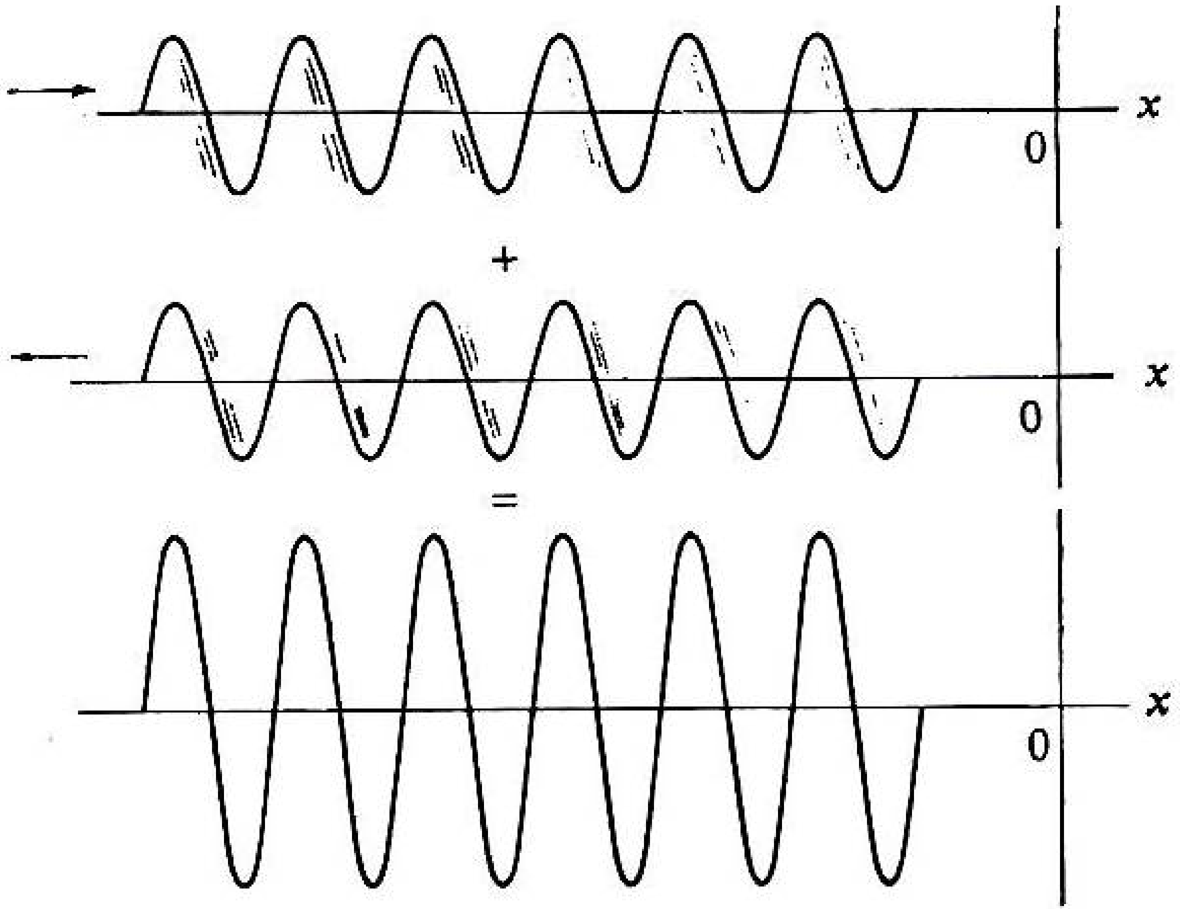
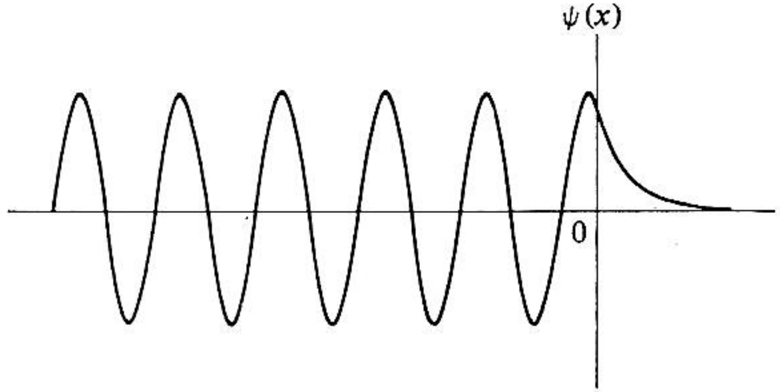
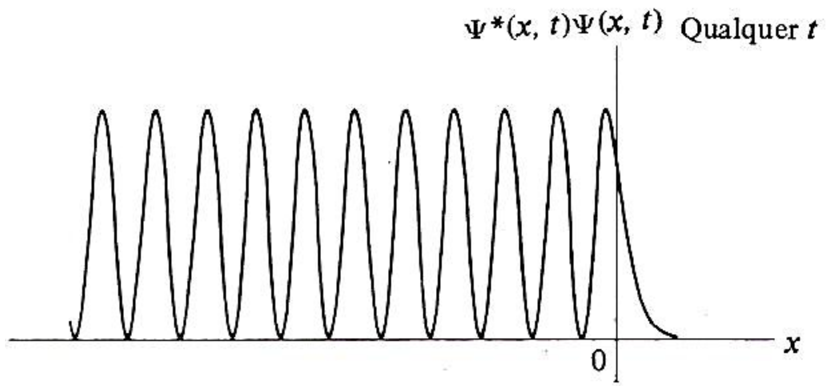


Ilustração esquemática da combinação de uma onda incidente e de uma onda refletida de mesmas intensidades, formando uma onda estacionária. A função de onda é refletida por um degrau de potencial em $x = 0$. Observe que os nós das ondas incidente e refletida se movem para a direita ou para a esquerda, mas os da onda resultante são estacionários.

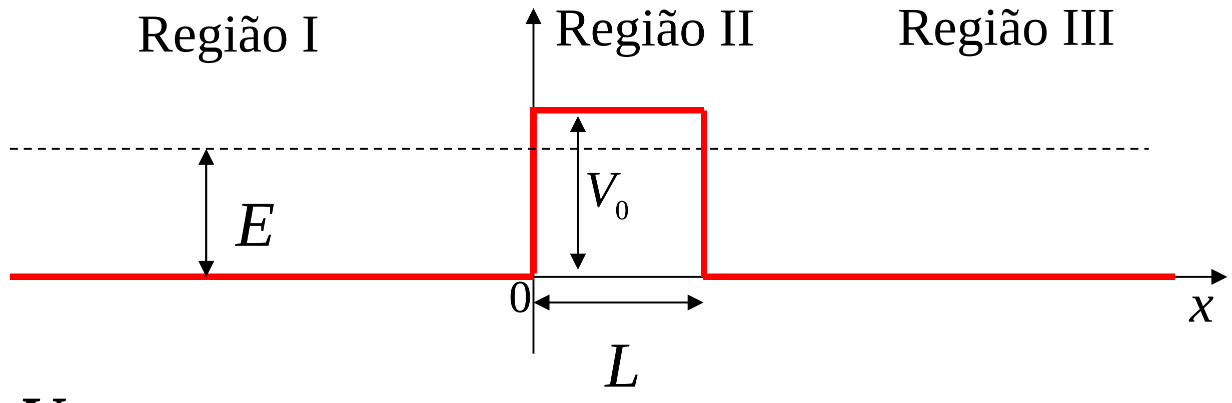


Funções de onda, ψ



Densidade de probabilidade, $|\psi|^2$

A barreira de potencial ($E < V_0$)



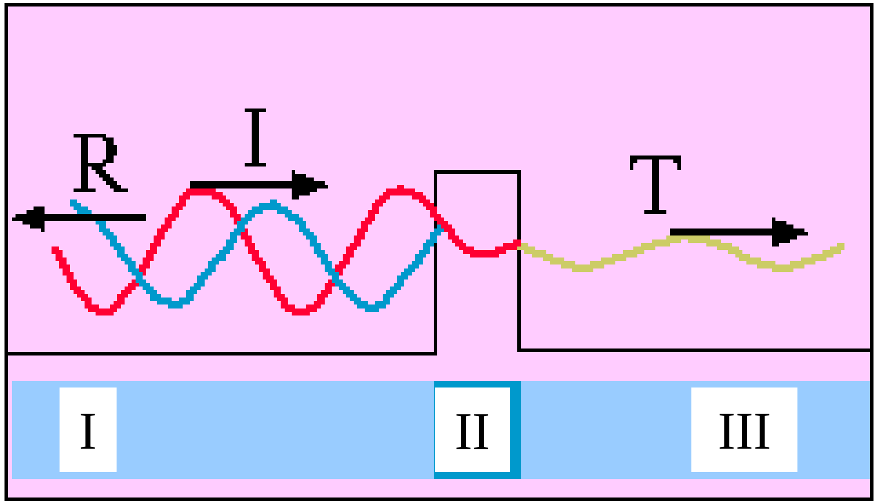
$E < V_0$:

Região I: se $x < 0$; $\dfrac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + k_I^2\psi_I(x) = 0$; onde $k_I^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

Região II: se $L > x > 0$; $\dfrac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} - k_{II}^2\psi_2(x) = 0$; onde $k_{II}^2 = \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$

Região III: se $x > L$; $\dfrac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} + k_{III}^2\psi_{III}(x) = 0$; onde $k_{III}^2 = k_I^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

Regiões:



Região I: $$\psi_I(x) = A\exp(ik_I x) + B\exp(-ik_I x) \quad ;\text{ onde} \quad k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Região II: $$\psi_{II}(x) = C\exp(-k_{II} x) + D\exp(k_{II} x) \quad ;\text{ onde} \quad k_{II}^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Região III: $$\psi_{III}(x) = E\exp(ik_{III} x) + \underset{0}{\cancel{F}}\exp(-ik_{III} x) \quad ;\text{onde} \quad k_{III}^2 = k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Coeficiente de transmissão:

$$T \approx \exp(-2k_{II}L)$$

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Coeficiente de reflexão:

$$R = 1 - T = 1 - \exp(-2k_{II}L)$$