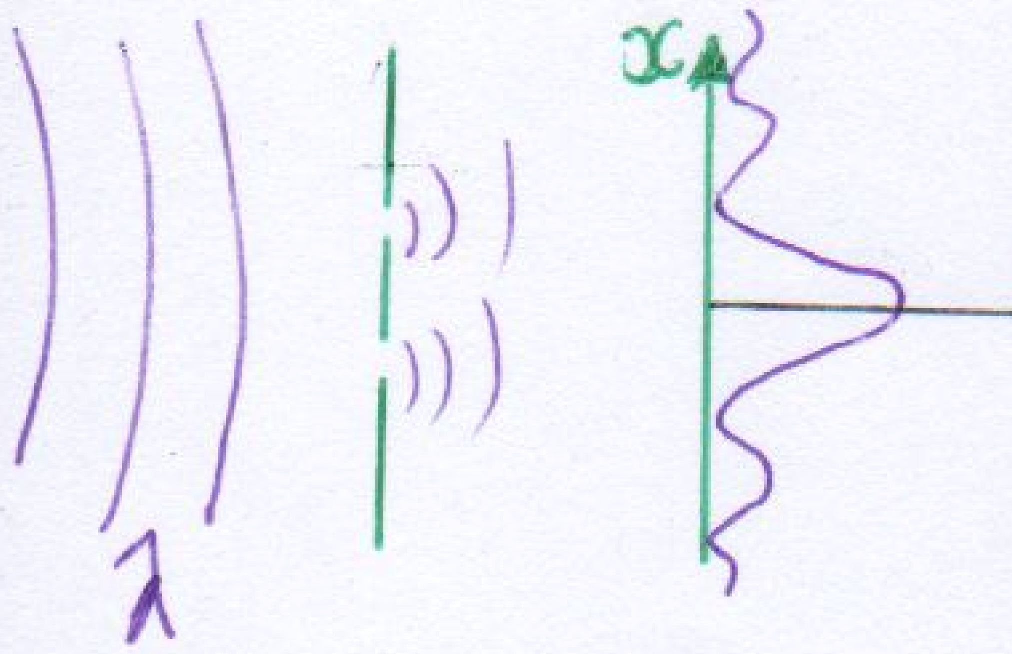
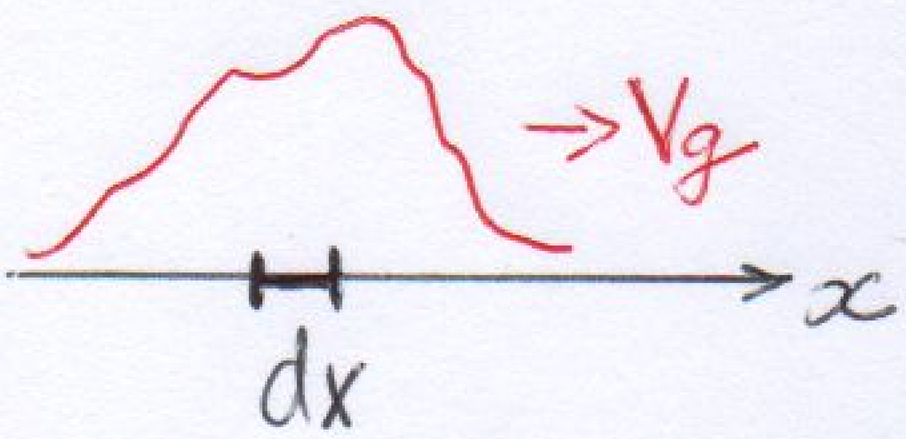
A Eq. de Schrödinger - Cap. 6

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V(x,t)\,\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$



$P(x) \sim |\Psi|^2$ interpretado por Max Born como densidade de probab.



Probab. de encontrar a partícula em dx é

$$dP = |\Psi|^2 \cdot dx$$

Se a partícula só pode estar entre $x=a$ e $x=b$, então,

$$\int_a^b dP = 1 \Longrightarrow \int_a^b |\Psi|^2\, dx = 1$$ ← normalização

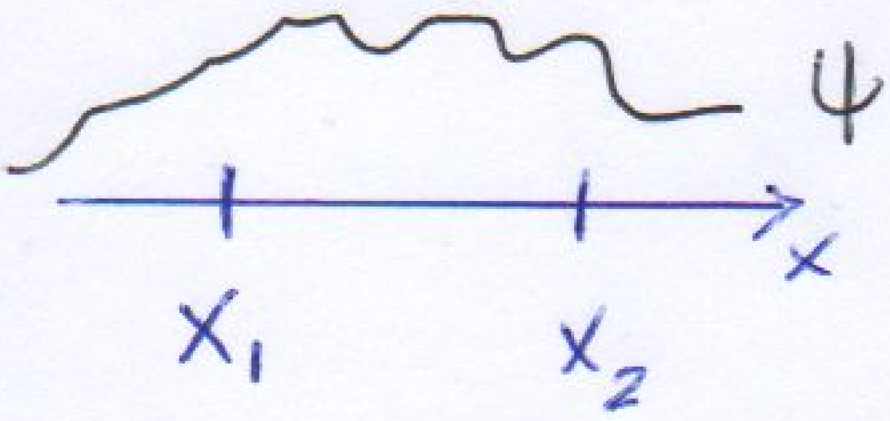
Ψ quadrado integrável

Em 3d, $\int_V |\Psi|^2\, dv = 1$,

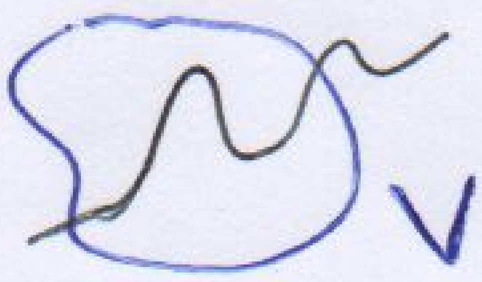
sempre que a partícula ñ puder sair do V.

Notação $|\Psi|^2 \equiv \rho$.

Mas se a partícula puder cruzar uma certa fronteira, ou Volume:



ou



, então,

Como a probab. varia no tempo dentro do segmento $x_1 x_2$, ou dentro de V?

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} =$$

$$= \psi^*\left(\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + \cancel{V\psi}}{i\hbar}\right) + \psi\left(\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + \cancel{V\psi^*}}{-i\hbar}\right)$$

$$-\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right) = -\frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

$$\longrightarrow \underline{\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}j}\ ,\ \underline{j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)}$$

Eq. de continuidade

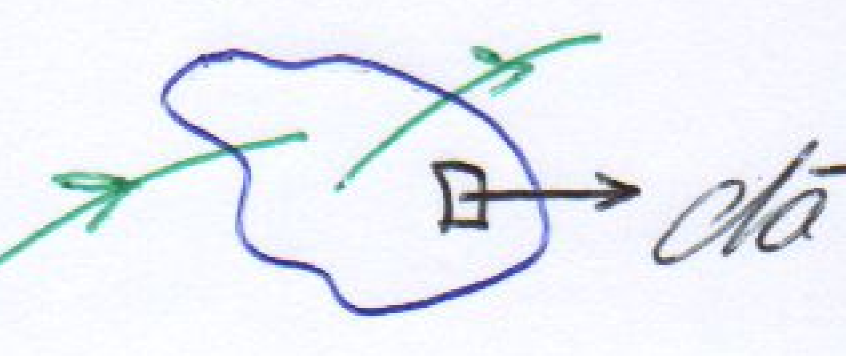
Em 3d, $\underline{\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{j}}\ ,\ \underline{\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)}$

corrente

V

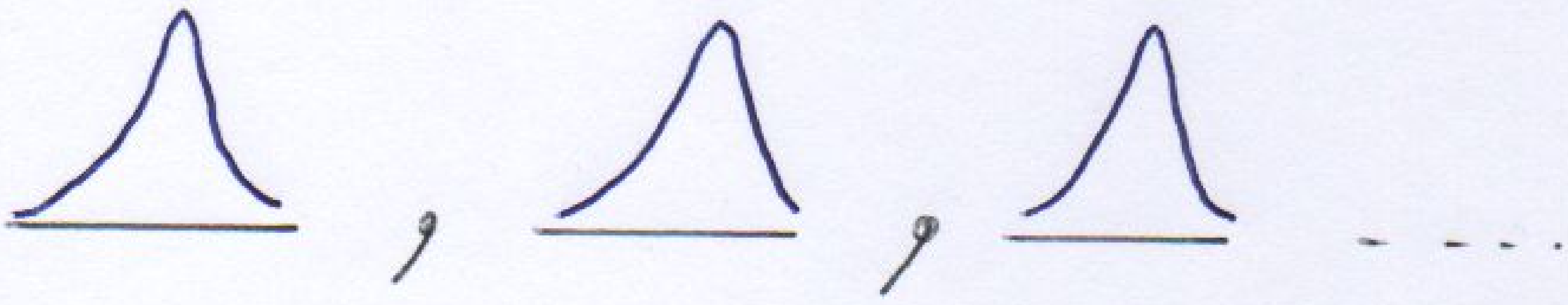
$$\int_V \frac{\partial\rho}{\partial t}dV = -\int_V \vec{\nabla}\cdot\vec{j}\,dV \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt}\int\rho\, dV = -\oint\vec{j}\cdot d\vec{a}$$



Valor médio da posição x

Suponha que eu faça N cópias do mesmo pacote de uma partícula:



Se eu medir a posição da partícula em cada uma das cópias os valores serão $x_1, x_2, x_2, \dots, x_N$. Então, o valor médio é

$$\langle x \rangle = \int x \, dP(x) = \int x |\psi|^2 dx =$$

$$= \int x \psi^* \psi \, dx = \int \psi^* x \psi \, dx .$$

Tanto faz o jeito de escrever.

Mas, terá situações em que fará diferença

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx$$

Não existe $x(t)$, mas como $\psi = \psi(x,t)$, então, em geral $\langle x \rangle (t)$.

Definição:

$$\langle O \rangle = \int \psi^* O \psi \, dx$$

Potenciais independentes do tempo

$$V(\vec{r},t) = V(\vec{r})$$

Podemos mostrar que nestes casos

$$\psi(\vec{r},t) = \phi(\vec{r}) \cdot f(t)$$

é uma solução da Eq. de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \phi(\vec{r}) f(t) + V(\vec{r})\,\phi(\vec{r}) f(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\vec{r}) f(t)$$

$\div\ \phi(\vec{r}) f(t)$:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi}\nabla^2\phi + V(\vec{r})}_{\text{funç. de } \vec{r}} = \underbrace{\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt}}_{\text{funç. de } t} \equiv \underset{\uparrow}{E}$$

cte

Então, $\dfrac{df}{dt} = \dfrac{E}{i\hbar} f \Rightarrow f = e^{-iEt/\hbar}$.

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + V(\vec{r})\phi = E\phi$$

Eq. do Schrödinger indep. do t

Então, <u>uma</u> solução da Eq. de Schrödinger é da forma: $\psi(\vec{r},t) = \phi(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar}$

Operador Hamiltoniano

Então, para encontrar uma possível solução $\Psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-iEt/\hbar}$ precisamos resolver

$$H\phi = E\phi \quad , \text{onde} \quad H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \, .$$

Recordando:

p/ partícula livre $\Psi(x,t) = e^{i(px-Et/\hbar}$:

$$\Psi(x,t) = \phi(x)\, e^{-iEt/\hbar} \quad , \text{c/} \quad \phi(x) = e^{ipx/\hbar}$$

Então,

$$H\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\leftarrow E}\phi$$

que neste caso (livre) identifica E como como $p^2/2m$, a energia (cinética) da partícula!

"no caso geral, com $V(x)$, postulamos que a cte **E** representa as possíveis energias do sistema".

H se chama operador energia, ou, Hamiltoniano

Note que H pode ser escrito como

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \quad , \text{onde} \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \, .$$

lembra $\frac{p^2}{2m} + V(x)$ $\qquad$ operador momento linear

Eq. do Schröd. como Eq. de autovalor

$$H\phi = E\phi$$

tem o formato de Eq. de autovalor:

$MV = \lambda V \Rightarrow \begin{cases} \text{resultava em } n \text{ autovalores } \lambda \\ \text{c/ } n \text{ autovetores } V \end{cases}$

Aqui tb $H\phi = E\phi \Rightarrow \begin{cases} E_n \\ \phi_n \end{cases}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

Cada soluçõ $\phi_n(x)$ resulta na soluçõ

$$\phi_n(x)\, e^{-iE_nt/\hbar}$$

mas como a Eq. de Schrödinger dependente do tempo é linear, a combinaçõ

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n\, \phi_n(x)\, e^{-iE_nt/\hbar}$$

é a soluçõ geral.

$\Psi_n = \phi_n(x)\, e^{-iE_nt/\hbar}$ é uma soluçõ particular

$|\Psi_n|^2 = |\phi_n(x)|^2$ independe do tempo, por isso é denominada estacionária.

$|\Psi(x,t)|^2$ ñ é estacionário, em geral.

Continuidade de $\psi(x)$ e $\psi'(x)$

Sempre demandamos que $\psi(x)$ seja **contínua**

para garantir que a probabilidade de se achar a partícula ñ dê "saltos".

Mas, e qto à derivada $\frac{d\psi}{dx} \equiv \psi'(x)$?

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

Para saber se ψ' é contínua em x_0, integro ψ'' entre $x_0-\varepsilon$ e $x_0+\varepsilon$, $\varepsilon \to 0$:

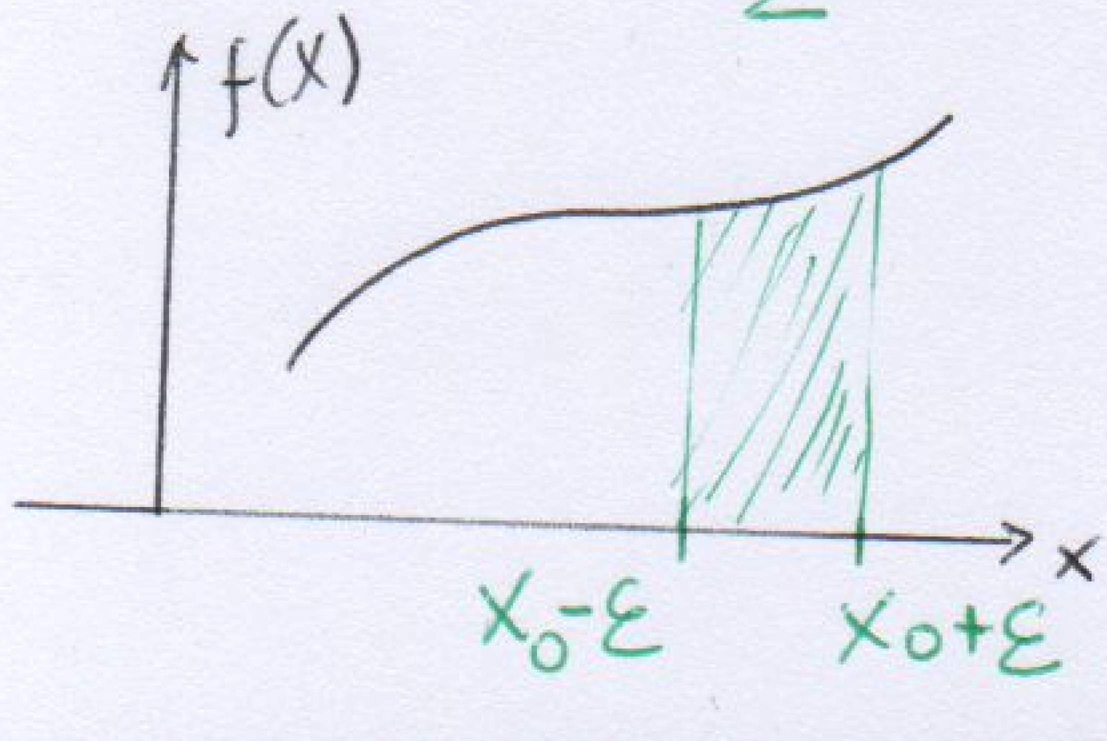
$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \psi'' dx = \psi'(x_0+\varepsilon) - \psi'(x_0-\varepsilon) \equiv \Delta\psi'$$

Então

$$\Delta\psi' = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} E\psi(x)\,dx + \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} V(x)\psi(x)\,dx$$

uso que

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} f(x)\,dx = \frac{f(x_0+\varepsilon)+f(x_0-\varepsilon)}{2}\cdot 2\varepsilon \quad , \; \varepsilon \to 0$$



Assim, a 1ª integral vale

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} E\,\psi(x)\,dx = E \cdot \frac{\psi(x_0+\varepsilon)+\psi(x_0-\varepsilon)}{2} \cdot 2\varepsilon \to 0$$

pois E é cte e ψ é contínua.

A segunda integral,

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} V(x)\psi(x)\,dx = \Big(V(x_0+\varepsilon)\psi(x_0+\varepsilon) + V(x_0-\varepsilon)\psi(x_0-\varepsilon)\Big)\cdot\varepsilon$$

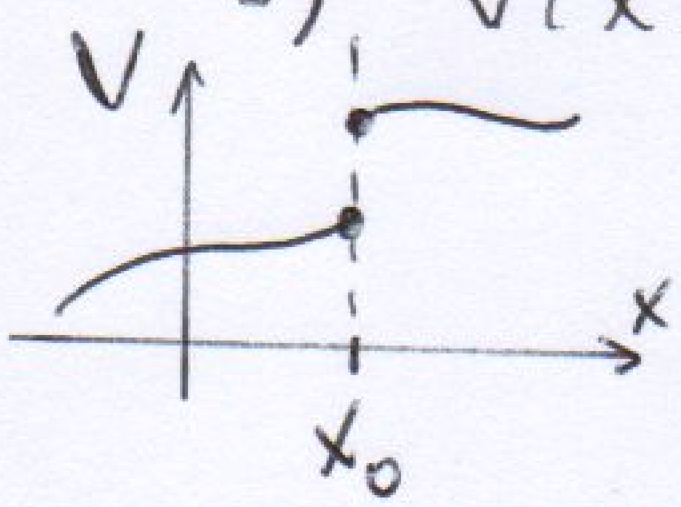
$$= \Big(V(x_0+\varepsilon) + V(x_0-\varepsilon)\Big)\psi(x_0)\cdot\varepsilon \quad , \quad \varepsilon \to 0.$$

Pode acontecer:

a) V(x) contínua:

$$2V(x_0)\cdot\psi(x_0)\cdot\varepsilon \to 0 \implies \Delta\psi' = 0$$

b) $V(x)$ "salta" de V_0 a V_1 em x_0:



$$(V_0 + V_1)\psi(x_0)\cdot\varepsilon \to 0 \quad \Delta\psi' = 0$$

c) $V(x)$ tem "salto" p/ ∞:

aí vamos ter $\infty \cdot \varepsilon \to ?$

$\Delta\psi' \neq 0$

Eq. diferenciai em 1 página

1ª ordem

$$\frac{d\psi}{dx} = \alpha\psi \Rightarrow \psi = A e^{\alpha x}, \forall \alpha \text{ cte}$$

1 cte arbitrária

2ª ordem

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha^2\psi \Rightarrow \psi = A e^{\alpha x}, B e^{-\alpha x}$$

sol. geral, $\psi = A e^{\alpha x} + B e^{-\alpha x}$

ou,

$$\psi = A \cosh\alpha x + B \operatorname{senh}\alpha x .$$

(lembre-se que $e^{\pm\alpha x} = \cosh\alpha x \pm \operatorname{senh}\alpha x$)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\alpha^2\psi \Rightarrow \psi = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x}$$

ou, $\psi = A \cos\alpha x + B \operatorname{sen}\alpha x .$

(lembre-se que $e^{\pm i\alpha x} = \cos\alpha x \pm i \operatorname{sen}\alpha x$)

Aviso: seja α real e > 0

$e^{\alpha x}$ diverge p/ $x \to \infty$

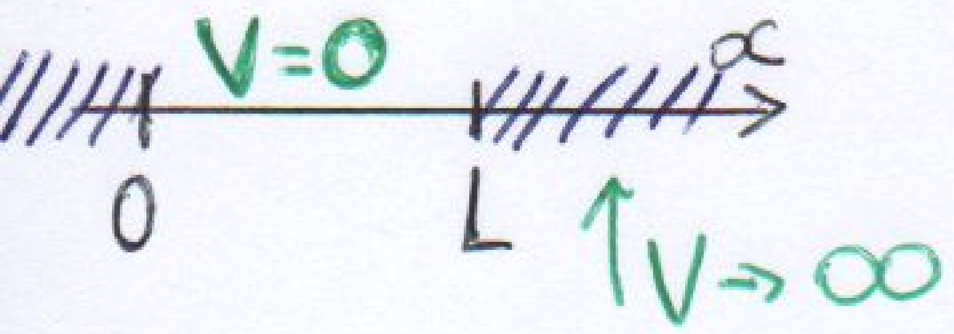
$e^{-\alpha x}$ " p/ $x \to -\infty$

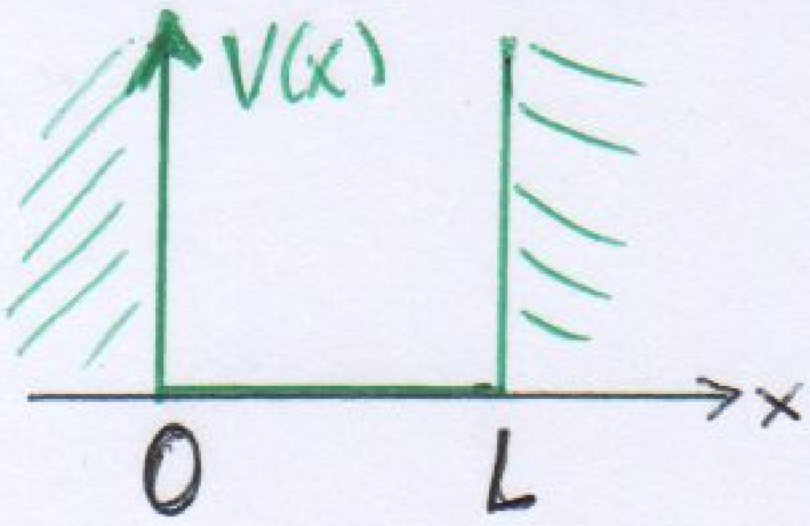
Mas, $e^{\pm i\alpha x}$ NÃO DIVERGE

$$|e^{\pm i\alpha x}| = 1$$

Confinamento

Partícula só pode ser encontrada entre 0 e L:





"caixa" de potencial
ou
"poço" infinito

- P/ $x \leq 0$ ou $x \geq L$ $\quad \psi(x) = 0$
- P/ $0 \leq x \leq L$; $V(x) = 0$, logo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \implies \underline{\underline{\frac{d^2\psi}{dx^2} = -K^2\psi}} \; , \; \underline{\underline{K^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}}}$$

Note que $E > 0$ (part. livre) $\Rightarrow$ K é real

solução geral: $\underline{\psi = A\,\text{sen}\,Kx + B\cos Kx}$

Condição de contorno

$\psi(x=0) = 0 \Rightarrow 0 = A\cdot 0 + B\cdot 1 \longrightarrow B = 0$

$\psi(x=L) = 0 \Rightarrow 0 = A\,\text{sen}\,KL \rightarrow \underline{KL = n\pi}$, $n = 1, 2, \ldots$

A condição de contorno quantizou K

$$\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \underline{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2} \quad , n = 1, 2, 3, \ldots$$

Esses são os únicos valores possíveis para a medida da energia da partícula!

E a função de onda?

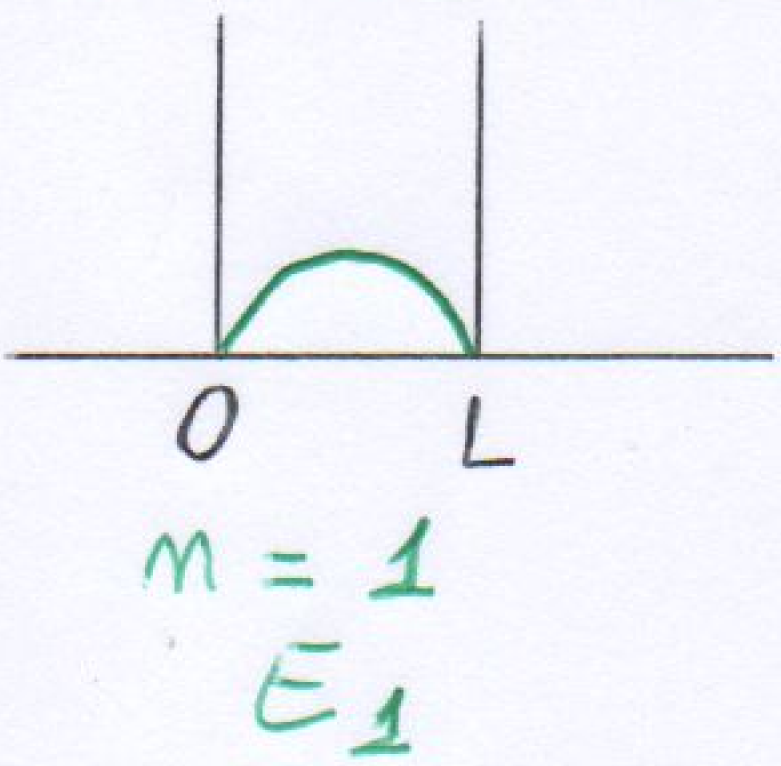
p/ $0 \leq x \leq L$ $\quad \psi_n(x) = A \operatorname{sen} \frac{n\pi}{L} x \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

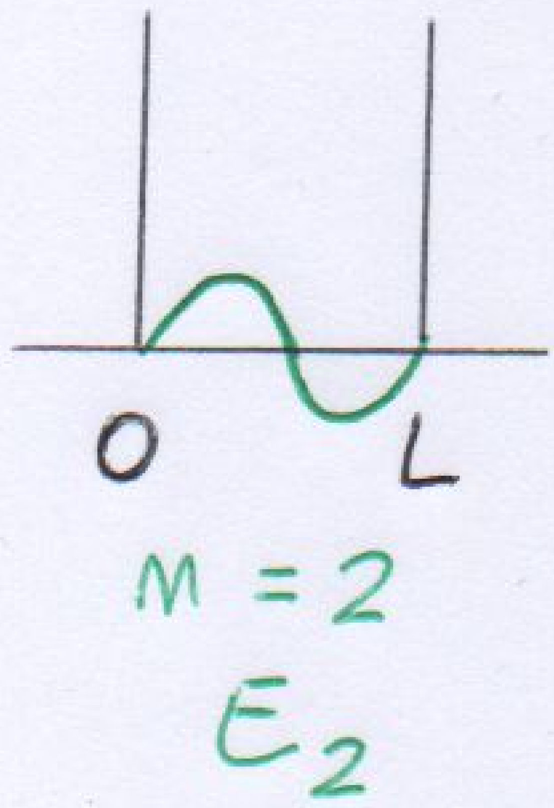
Normalizando:

$$1 = \int_0^L |\psi_n|^2 dx = |A|^2 \int_0^L \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi}{L} x \, dx = |A|^2 \frac{2}{L}$$

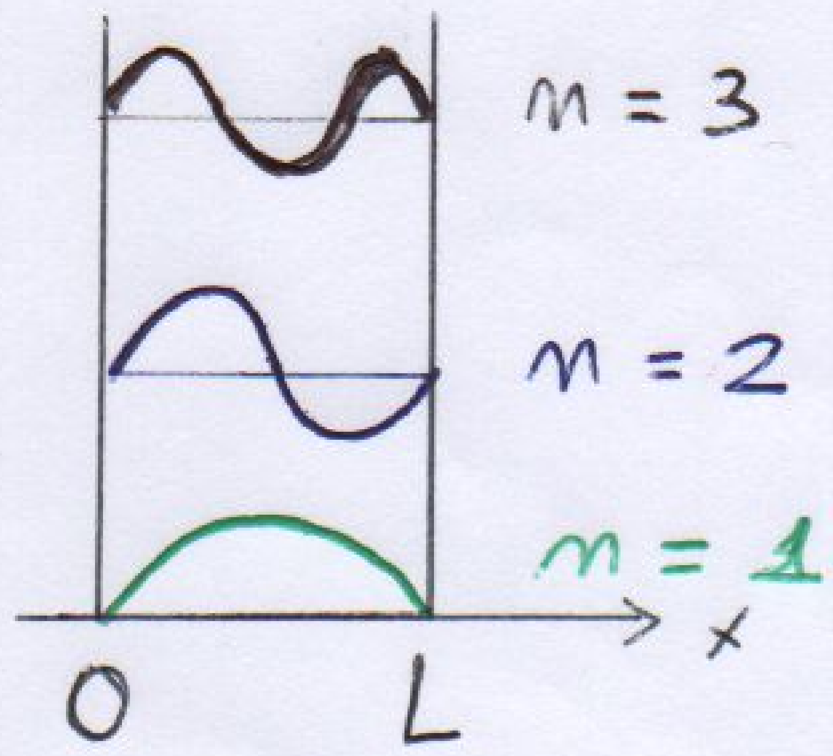
$$\rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{L}} \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}} \underbrace{e^{i\theta}}_{\text{cte de } |\ | = 1 \text{ descarto!}}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{L}$$



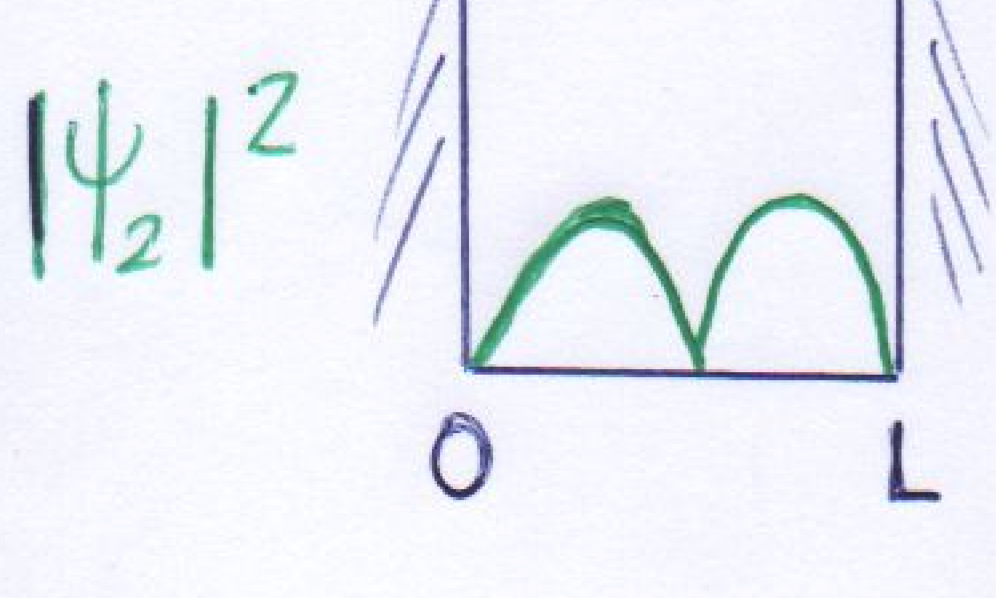


.....

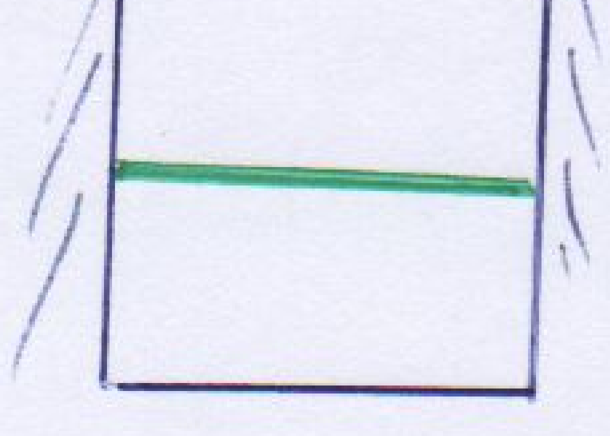


- Esses ψ_n são estados estacionários: $|\psi_n|^2$ não depende de t.
- São soluções de $H\psi_n = E_n \psi_n$, por isso tb chamados de <u>autofunções</u>
- $\psi(x)$ é contínua, mas $\psi'(x)$ não, neste caso.

Densidade de probabilidade:



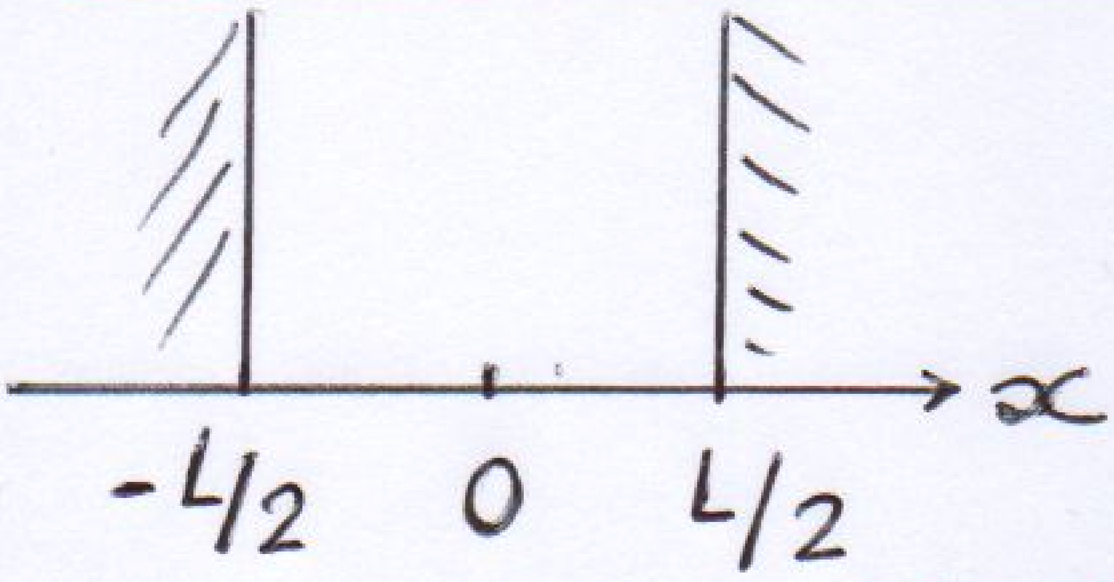
;



classicamente

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{L}, \text{ cte}$$

Partícula na caixa. De novo!



$V(x) = \infty$ p/ $|x| \geq L/2$

$V(x) = 0$ p/ $|x| \leq L/2$

$V(x)$ é par

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad , \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Solução geral: $\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

condição de contorno

$$x = -L/2 : \quad 0 = A e^{-ikL/2} + B e^{ikL/2}$$

$$\rightarrow A = -B e^{ikL}$$

$$\rightarrow \psi(x) = B\left(e^{-ikx} - e^{ik(x+L)}\right)$$

$$x = L/2 : \quad 0 = B\left(e^{-ikL/2} - e^{ik3L/2}\right)$$

$$\times e^{ikL/2} \Rightarrow 1 = e^{ik2L}$$

$$\rightarrow 2kL = 2n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L} , \; n = 1, 2, 3 \ldots$$

$$\psi_n(x) = B\left(e^{-ikx} - e^{in\pi} e^{ikx}\right)$$

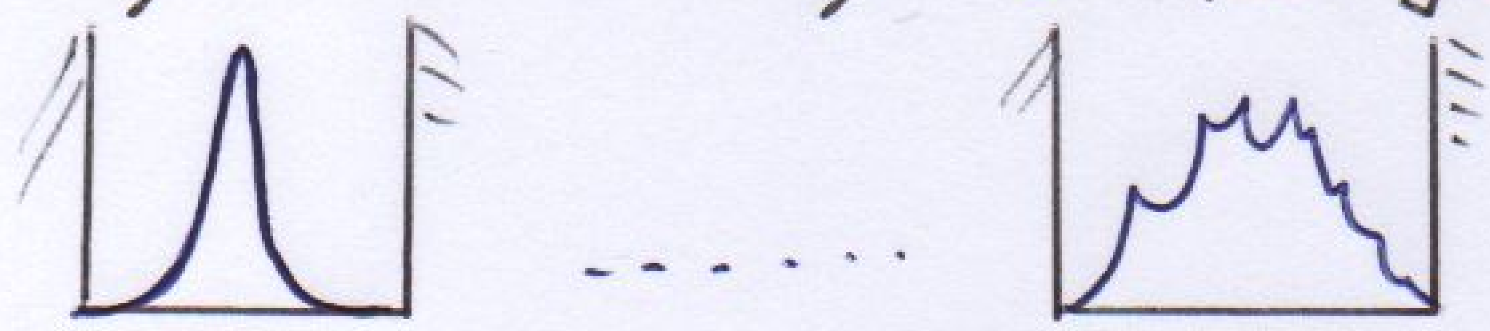
p/ $n = 1, 3, 5 \ldots$, $\psi_n = C \cos\frac{n\pi}{L}x$

p/ $n = 2, 4, 6 \ldots$ $\psi_n = C \,\text{sen}\, \frac{n\pi}{L}x$, $C = \sqrt{\frac{2}{L}}$

Qdo $V(x)$ for par, $\psi_n(x)$ são pares ou ímpares!

Explorando a "caixa"

O próximo passo seria colocar uma partícula na caixa, em $\mathbf{t=0}$, e perguntar $\Psi(x,\mathbf{t})$



$\Psi(x,\mathbf{0})$ .... $\Psi(x,\mathbf{t})$

O conjunto $\{\psi_n(x)\}$ serve para compor um pacote
$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x)\, e^{-iE_n t/\hbar},$$
onde as ctes C_n são achadas através de $\Psi(x,0)$

Vamos praticar isso só no próximo curso.

Valores médios nos estados estacionários

$$\langle x \rangle_n = \int_0^L \psi_n^* \, x \, \psi_n \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L x \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi}{L}x \, dx = \frac{L}{2}$$

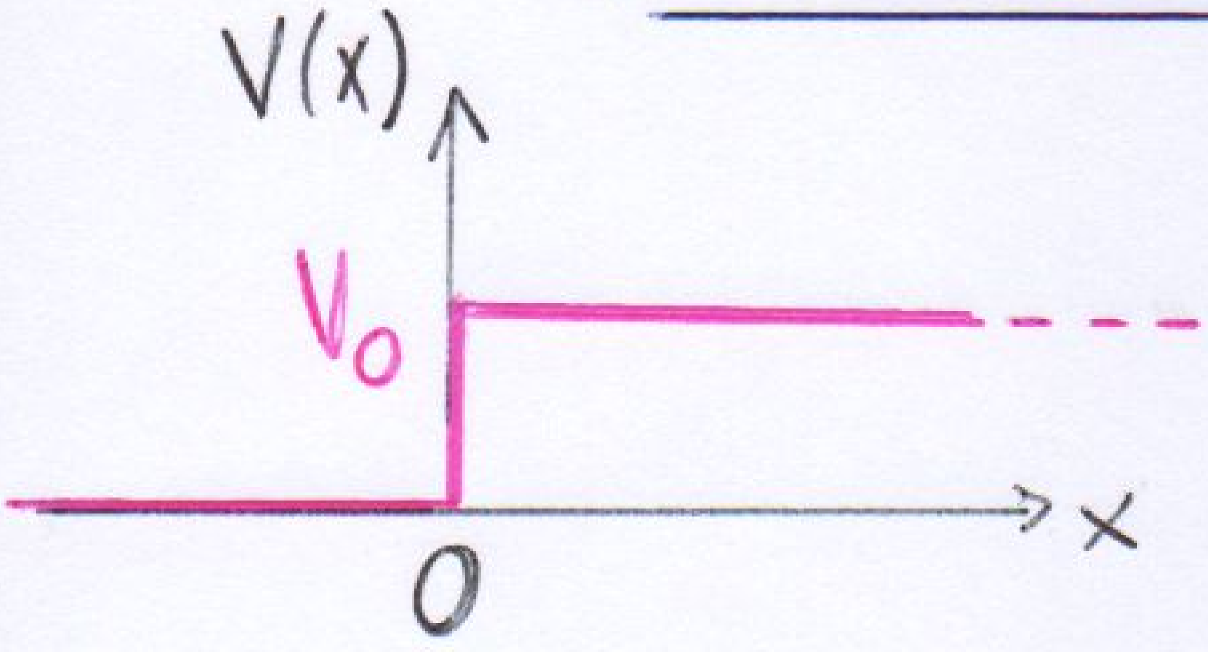
$$\langle \hat{p} \rangle_n = \int_0^L \psi_n^* \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi_n \, dx = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{L}\int_0^L \operatorname{sen}\frac{n\pi}{L}x \cos\frac{n\pi}{L}x \, dx = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2\pi^2 n^2} \; ; \; \langle \hat{p}^2 \rangle = \int_0^L \psi_n^* \left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 \psi_n \, dx = \frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2} n^2$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle 2m H \rangle = 2m \int_0^L \psi_n^* \hat{H} \psi_n \, dx = 2m E_n$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} n\hbar \left(1 - \frac{12}{2\pi^2 n^2}\right)^{1/2} \geq \frac{\hbar}{2} \text{, como deveria!}$$

Potencial degrau

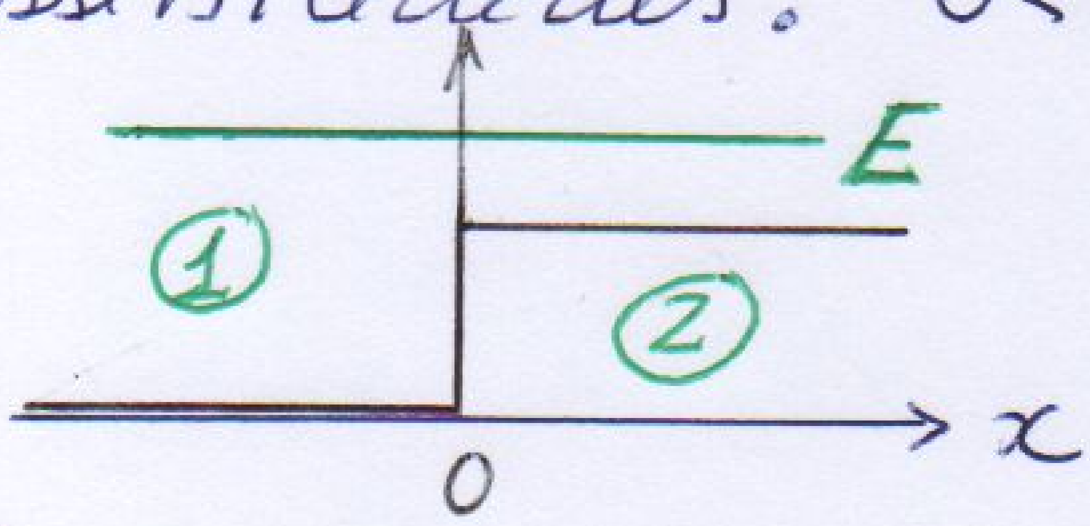


$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$

Uma partícula vem de $x = -\infty$ e caminha na direção de $x = 0$. Nesse trecho ela é livre, logo, pode ter $\forall\ E > 0$; não há quantização!

Duas possibilidades: $0 < E < V_0$ ou $E > V_0$

a) $E > V_0$



$$x \leq 0: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_1 = E\psi_1 \Rightarrow \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = -\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}E}_{\equiv k^2}\psi_1$$

$$\psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

representa uma onda caminhando para a direita, com amplitude A

representa uma onda caminhando para a esquerda; fruto da reflexão em $x = 0$.

A e K são escolhidos por nós.

$x \geq 0$: $\quad -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} + V_0\psi_2 = E\psi_2 \quad , E > V_0 > 0$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_2 \equiv -k'^2\psi_2 \quad ,$$

onde $k'^2 \equiv \dfrac{2m}{\hbar^2}(E-V_0) > 0$

solução: $\psi_2 = A' e^{ik'x} + B' e^{-ik'x}$

onda caminhando para a direita: onda transmitida.

onda caminhando para a esquerda. ñ deve haver onda vinda da esquerda: $B' = 0$

Condição de contorno:

$x = 0$: $\quad \psi_1(0) = \psi_2(0) \longrightarrow A + B = A'$

$\quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \longrightarrow ik(A-B) = ik'A'$

$$\longrightarrow \quad B = \frac{k-k'}{k+k'}A \quad e \quad A' = \frac{2k}{k+k'}A$$

Então,

$$\psi_1 = A\left(e^{ikx} + \frac{k-k'}{k+k'}e^{-ikx}\right), \quad x \leq 0$$

$$\psi_2 = \frac{2Ak}{k+k'}e^{ik'x}, \quad x \geq 0$$

Correntes

Qdo ψ for da forma Ae^{ikx}, j será

$$j = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx}\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

$$\left(\text{olhe só } j = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 = \frac{p}{m}|A|^2 = \mathbf{v}\cdot\rho,\ \rho = |\psi|^2\right)$$

Então,

corrente incidente $\vec{J}_i = \frac{\hbar k}{m}|A|^2\,\hat{x}$

corrente refletida $\vec{J}_r = \frac{\hbar k}{m}|A|^2\,(-\hat{x})$

corrente transmitida $\vec{J}_t = \frac{\hbar k'}{m}|A'|^2\,\hat{x}$.

Corrente total para $x \leq 0$:

$$\vec{J}_i + \vec{J}_r = \frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) = \frac{\hbar k}{m}\frac{4kk'}{(k+k')^2}|A|^2$$

Corrente total para $x \geq 0$:

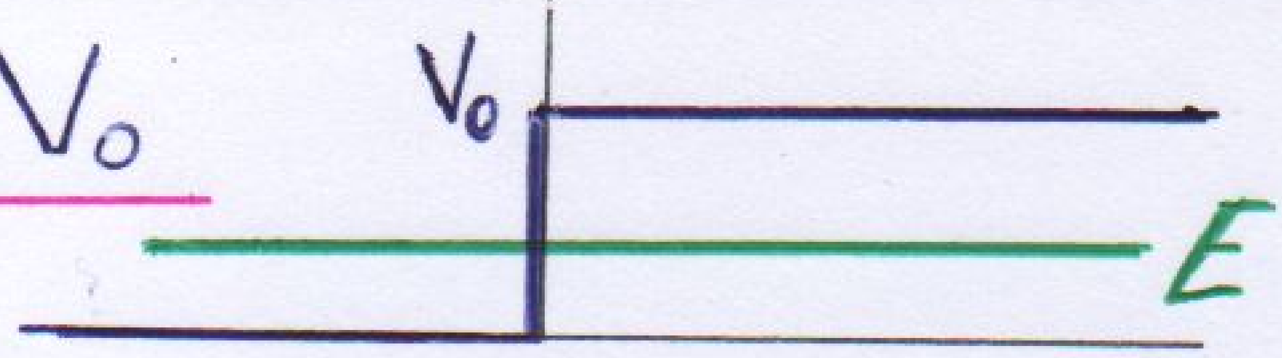
$$\vec{J}_t = \frac{\hbar k'}{m}\left(\frac{2k}{k+k'}A\right)^2 = \frac{\hbar k}{m}\frac{4kk'}{(k+k')^2}|A|^2$$

$$\underline{\vec{J}_i + \vec{J}_r = \vec{J}_t}$$

Coeficiente $\begin{cases} \text{de reflexão: } R = \left|\frac{j_r}{j_i}\right| = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 \\ \text{transmissão: } T = \left|\frac{j_t}{j_i}\right| = \frac{4k^2}{(k+k')^2} \end{cases}$

$\underline{R + T = 1}$

b) $\underline{E < V_0}$



$x \leq 0$: $\psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$, $\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} = E > 0$

k é real, logo, temos oscilações : 

$x \geq 0$: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + V_0\psi_2 = E\psi_2$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi_2 \equiv q^2\psi_2 ,$$

com $q^2 \equiv \dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0 \Rightarrow q$ real.

Então, a solução é

$$\psi_2 = C e^{-qx} + D e^{qx} \quad , \; x \geq 0 .$$

Mas, ψ deve ser quadrado integrável, ou seja, $\int |\psi|^2 dx$ tem que ser finita.

Logo, $\underline{\psi \text{ deve ir a zero para } x \to \infty}$ *

$$\Longrightarrow D = 0$$

* excessão : onda plana

e^{ikx} ou e^{-ikx}

NÃO divergem, nem p/ $x \to \infty$, nem p/ $x \to -\infty$

$e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \,\text{sen}\, kx$ e $|e^{\pm ikx}| = 1$

Então, temos: $\psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad x \leq 0$

$$\psi_2 = C e^{-qx}, \quad x \geq 0.$$

Condições de contorno:

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) & \Rightarrow A + B = C \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) & \Rightarrow ik(A-B) = -qC \end{cases}$$

$$\Rightarrow B = \frac{k - iq}{k + iq} A \quad e \quad C = \frac{2k}{k+iq} A$$

Correntes

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \hat{x}; \quad \vec{J}_r = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2 \hat{x} = -\frac{\hbar k}{m} |A|^2 \hat{x}$$

$$\Rightarrow \vec{J}_i + \vec{J}_r = 0 \ !$$

De fato, $\vec{J}_t = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_2^* \frac{d\psi_2}{dx} - \psi_2 \frac{d\psi_2^*}{dx} \right) =$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left(C^* e^{-qx} C(-q) e^{-qx} - \right.$$

$$\left. - C e^{-qx} C^* (-q) e^{-qx} \right) = 0$$

$$R = \left| \frac{j_r}{j_i} \right| = \frac{\hbar k/m \, |B|^2}{\hbar k/m \, |A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{k+iq}{k-iq} \right|^2 = 1$$

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = 0.$$

Note que, embora $\psi_2 \neq 0$, ñ há corrente p/ $x \geq 0$. É possível encontrar a partícula em $x \geq 0$, mas ñ há propagação em $x \geq 0$; ñ há análogo clássico para isso!

- $R = 1$ significa que a partícula, ou sua probabilidade, é totalmente refletida.

- As ondas incidente e refletida tem a mesma amplitude ($|A| = |B|$) e formam uma onda estacionária p/ $x \leq 0$:

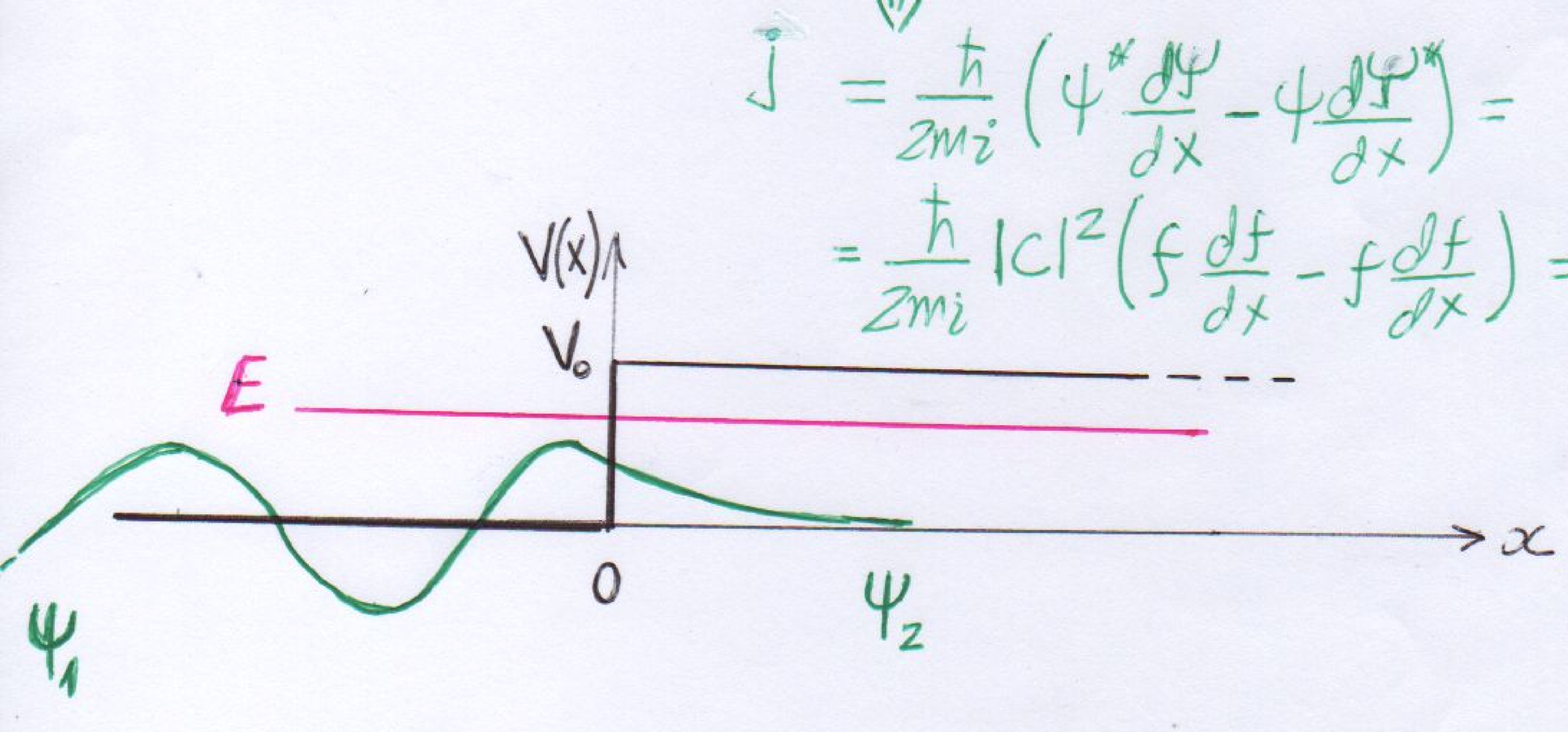
$$\psi_1 = A\, e^{ikx} + \frac{k - iq}{k + iq} A\, e^{-ikx} =$$

$$= \underbrace{\frac{2A}{k+iq}}_{cte} \underbrace{\left(k \cos kx + q \,\mathrm{sen}\, kx \right)}_{\text{função real de } x} \equiv C \cdot f(x)$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) =$$

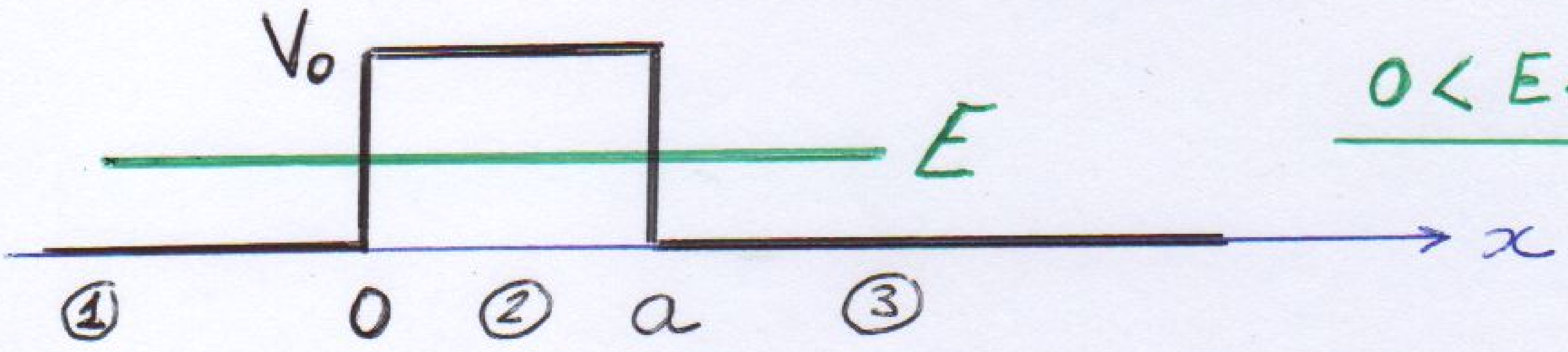
$$= \frac{\hbar}{2mi} |C|^2 \left(f \frac{df}{dx} - f \frac{df}{dx} \right) = 0$$



$x > 0$ é uma região ñ clássica, ou classicamente proibida, já que

$$E_c = \frac{p^2}{2m} = E - V_0 < 0$$

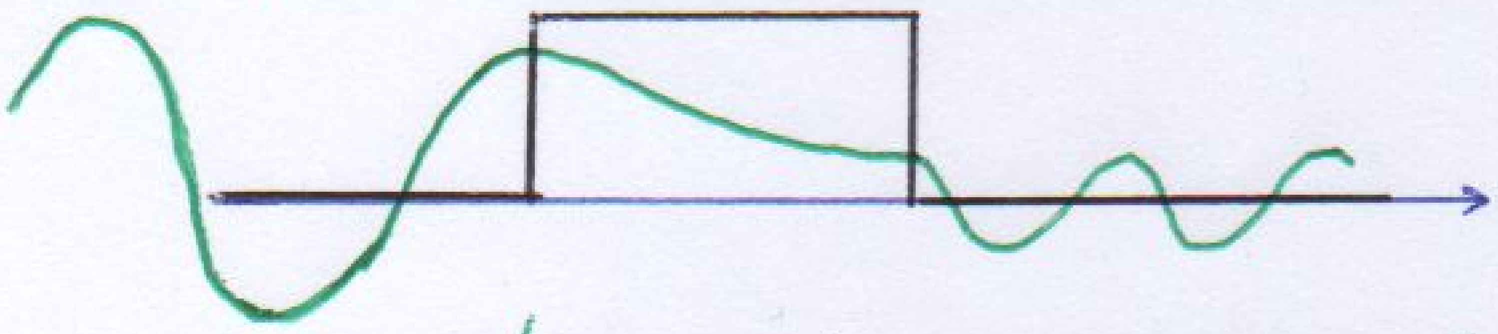
Barreira de Potencial



$0 < E < V_0$

o que esperamos da solução

Efeito túnel



$(E > V = 0)$ oscilação ← → oscilação $(E > V = 0)$

$E < V = V_0 \Rightarrow$ solução ñ oscilantes

Resolvendo:

$$x \leq 0 : \psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx} , \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

$$0 \leq x \leq a : \psi_2 = C e^{qx} + D e^{-qx} , \quad E = V_0 - \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

$$x \geq a \quad \psi_3 = F e^{ikx} + \underbrace{G e^{-ikx}}_{=0}$$

$G = 0$: ñ há onda retornando p/ $x \geq a$

Cond. Contorno:

$$x = 0 \begin{cases} A + B = C + D \\ ik(A - B) = q(C - D) \end{cases} \quad (\mathrm{I})$$

$$x = a \begin{cases} C e^{+qa} + D e^{-qa} = F e^{ika} \\ q(C e^{qa} - D e^{-qa}) = ik\, e^{ika} \end{cases} \quad (\mathrm{II})$$

Queremos calcular o coef. de transmissão

$$T = \left| \frac{j_t}{j_i} \right| = \frac{\frac{\hbar k}{m} |F|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \left| \frac{F}{A} \right|^2$$

subtraindo em (I): $2A = C\left(1+\frac{q}{ik}\right) + D\left(1-\frac{q}{ik}\right)$ (III)

somando em (II): $2C\, e^{qa} = F\left(1+\frac{ik}{q}\right) e^{ika}$

subtraindo em (II): $2D\, e^{-qa} = F\left(1-\frac{ik}{q}\right) e^{ika}$

Substituo C e D em (III):

$$A = \frac{1}{4} F e^{ika}\left[4\cosh qa - 2\left(\frac{ik}{q}+\frac{q}{ik}\right)\operatorname{senh} qa\right]$$

$\therefore$

$$\left|\frac{A}{F}\right|^2 = \frac{4k^2q^2\cosh^2 qa + (q^2-k^2)^2\operatorname{senh}^2 qa}{4k^2q^2}$$

Uso que $k^2q^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 E(V_0-E)$ e

$$q^2-k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-2E)$$

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{1}{1+\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\operatorname{senh}^2 qa}$$

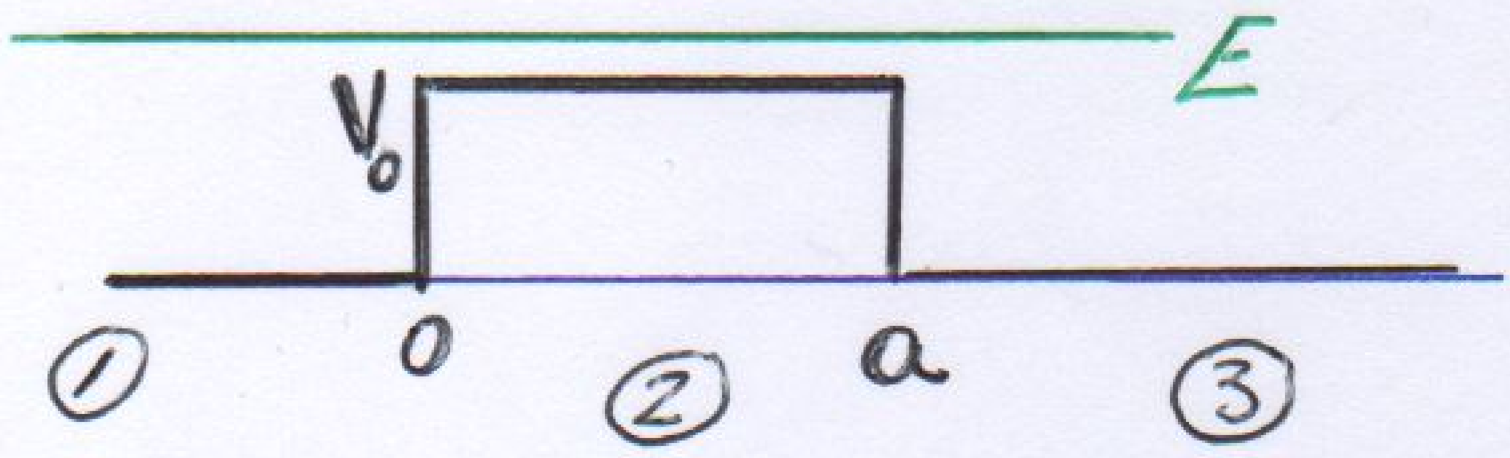
Coeficiente de reflexão

$$R = \left|\frac{j_r}{j_i}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \dots$$

ou,

$$R = 1 - T = \frac{1}{1+\frac{4E(V_0-E)}{V_0^2}\operatorname{senh}^{-2} qa}$$

Barreira p/ $E > V_0$:



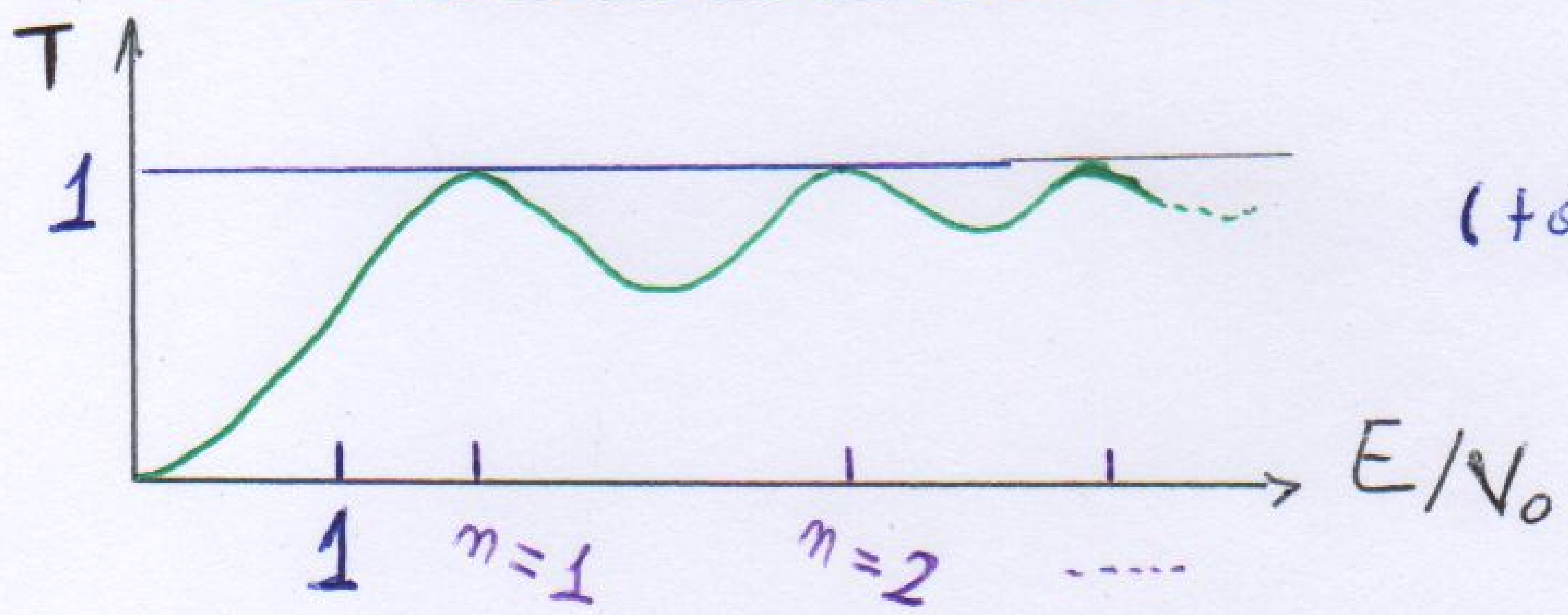
$$x \leq 0 : \quad \psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx} , \qquad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

$$0 \leq x \leq a : \quad \psi_2 = C e^{iqx} + D e^{-iqx} , \qquad \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + V_0 = E$$

$$x \geq a : \quad \psi_3 = F e^{ikx}$$

- Seguir os mesmos passos anteriores
- ou ver que basta fazer $q \to iq$ no anterior

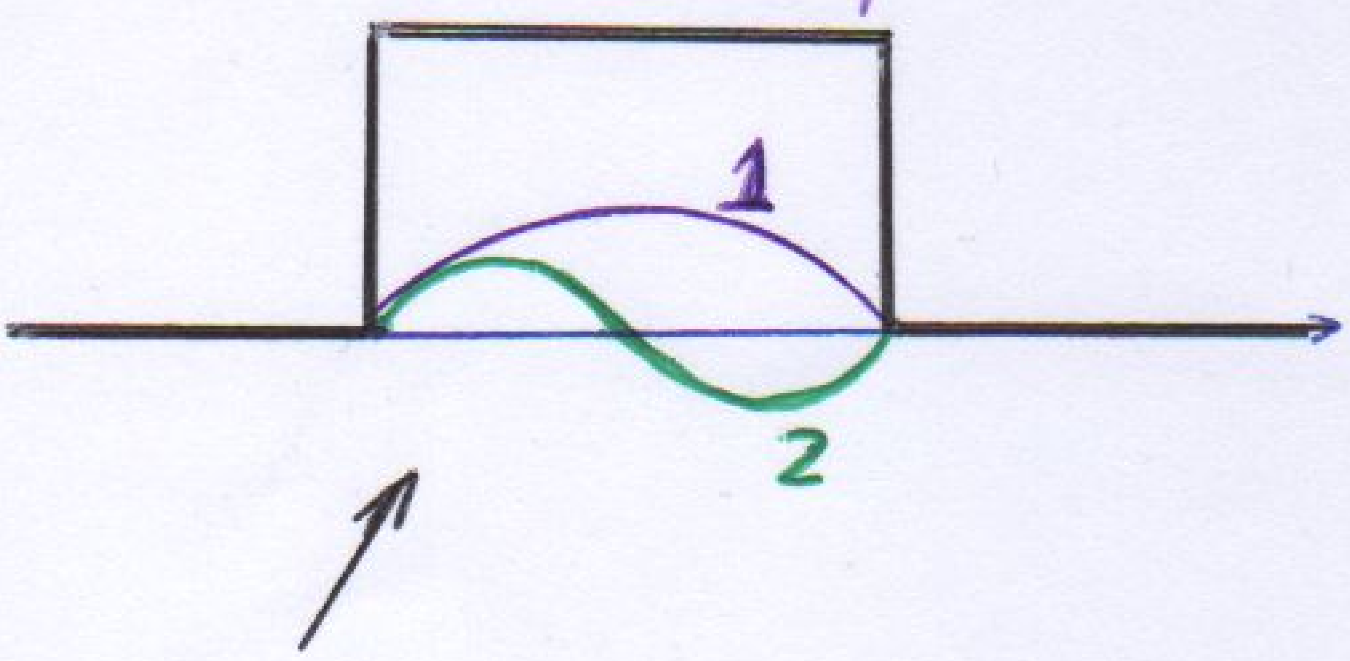
$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \operatorname{sen}^2 qa} \qquad E > V_0$$



(fora de escala)

$$T = 1 \Rightarrow \operatorname{sen} qa = 0 \Rightarrow \underline{qa = n\pi} , \quad n = 1, 2, 3 \ldots$$

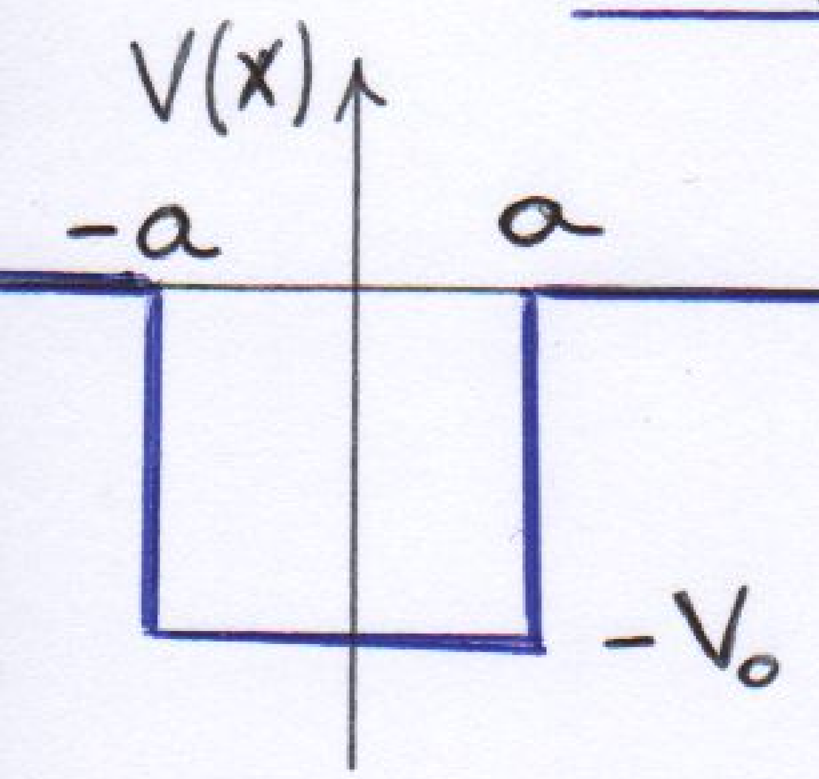
$$\Downarrow$$



$$E_n = V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

cuidado: parecem as autofunções da caixa de potencial, mas ñ são! Aqui tem corrente, lá ñ!

Poço de potencial



$$\underline{V(x) = V(-x)}$$
par

$-V_0 < E < 0$: estado ligado

$x \leq -a$: $\psi_1 = A e^{qx} + A' e^{-qx}$

$-a \leq x \leq a$: $\psi_2 = B \cos kx + B' \operatorname{sen} kx$

$x \geq a$: $\psi_3 = C' e^{qx} + C e^{-qx}$,

sendo $E = \frac{-\hbar^2 q^2}{2m}$ e $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0$.

Convergência em $x \to -\infty \Rightarrow A' = 0$

Convergência em $x \to +\infty \Rightarrow C' = 0$

$x \leq -a$: $\psi_1 = A e^{qx}$

$-a \leq x \leq a$: $\psi_2 = B \cos kx + B' \operatorname{sen} kx$

$x \geq a$: $\psi_3 = C e^{-qx}$

V(x) é par, logo, as autofunções são pares ou ímpares:

a) $\psi(x) = \psi(-x)$ ou (b) $\psi(x) = -\psi(-x)$

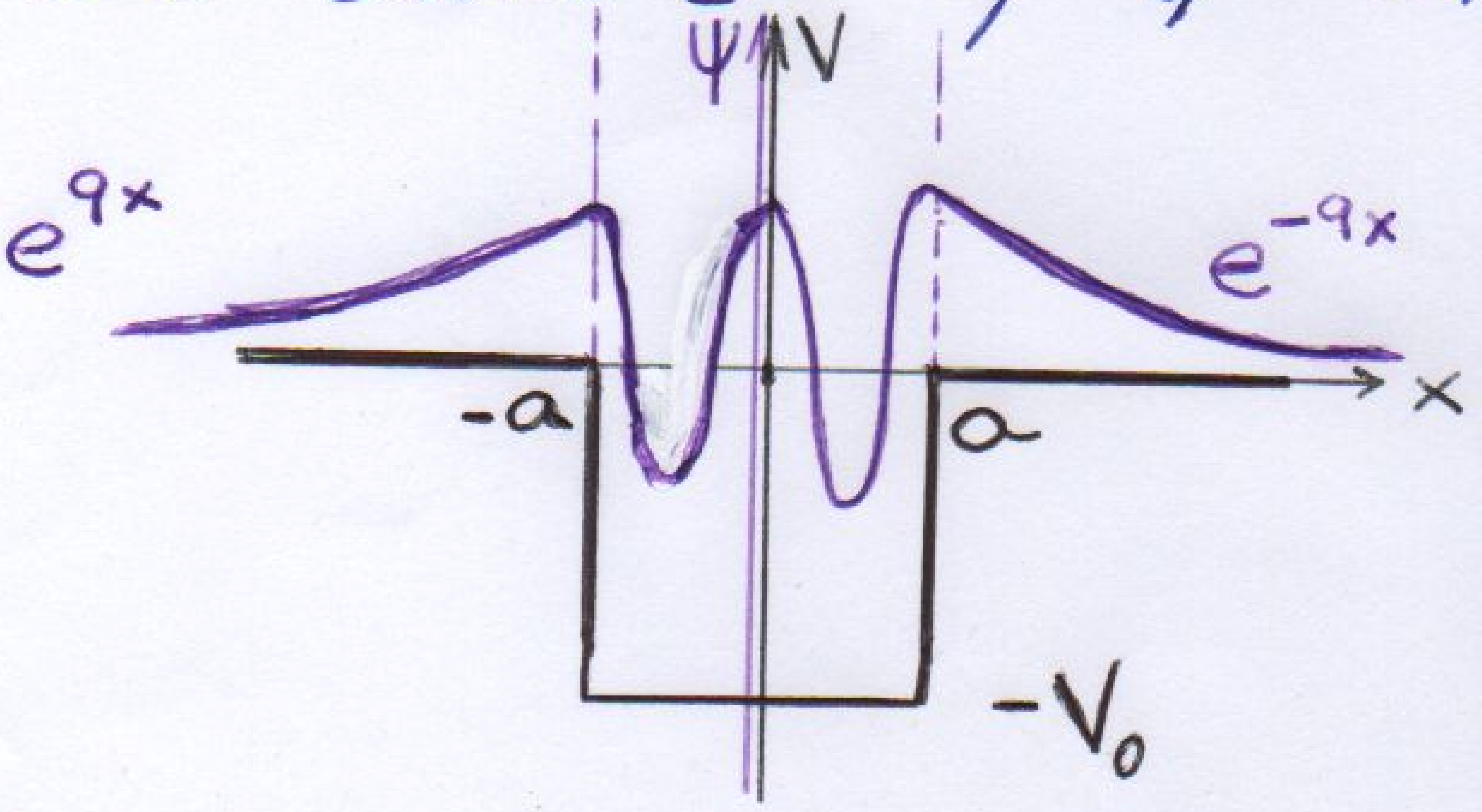
a) Pares : $A = C$ e $B' = 0$

$$\psi_1 = A e^{qx} \;, \quad \psi_3 = A e^{-qx}$$
$$\psi_2 = B \cos kx$$

c. cont. $\begin{cases} A e^{-qa} = B \cos ka \\ A q e^{-qa} = k B \,\text{sen}\, ka \end{cases} \Rightarrow A = B e^{+qa} \cos ka$

e $\quad \text{tg}\, ka = \dfrac{q}{k}$.

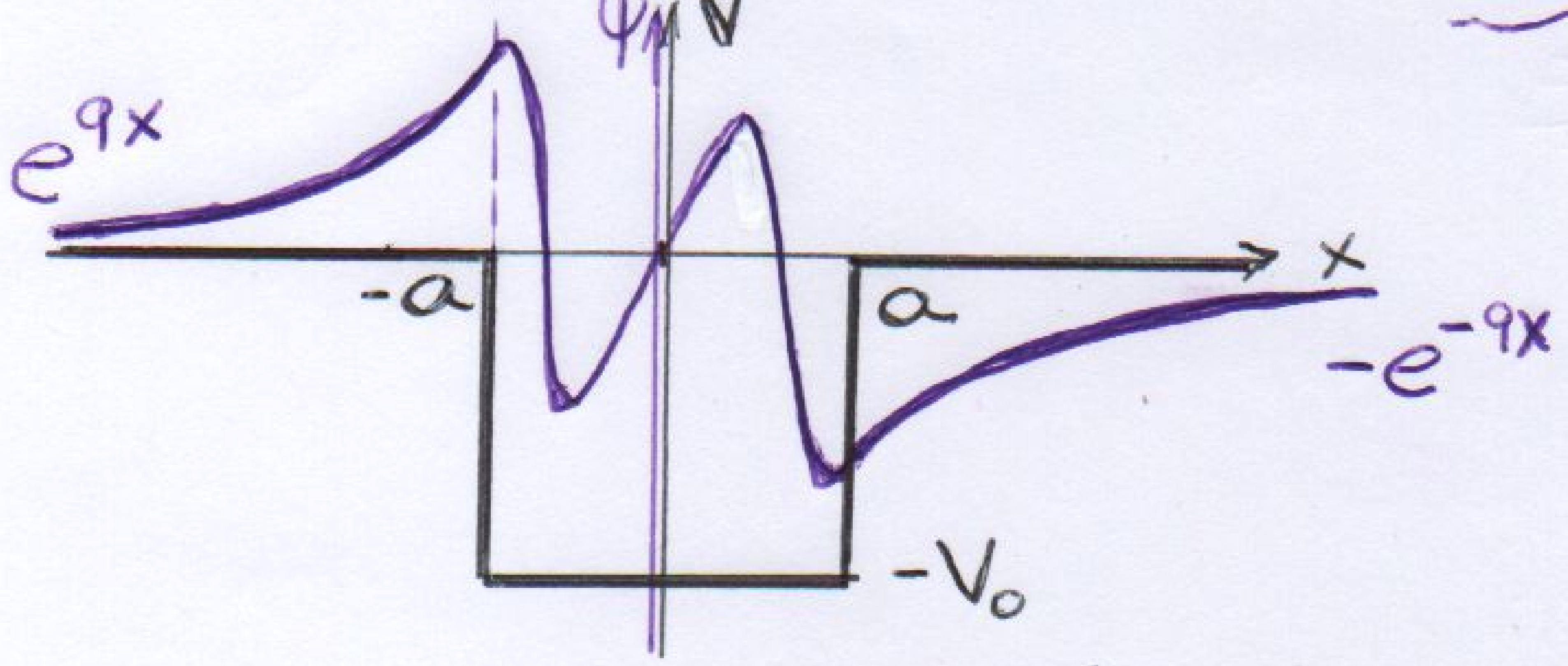
$$\psi_1 = B e^{qa} \cos ka \; e^{qx} \;, \quad \psi_2 = B \cos kx$$
$$\psi_3 = B e^{qa} \cos ka \; e^{-qx} \;, \quad c/ \; B / \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$$



b) Ímpares : $A = -C$ e $B = 0$

$$\psi_1 = A e^{qx} \;, \quad \psi_3 = -A e^{-qx} \;, \quad \psi_2 = B' \,\text{sen}\, kx$$

c. cont.: $\begin{cases} A e^{-qa} = - B' \,\text{sen}\, ka \\ A q e^{-qa} = k B' \cos ka \end{cases} \Rightarrow \text{ctg}\, ka = \dfrac{-q}{k}$



As energias

Lembrando $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e $E = V_0 - \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$

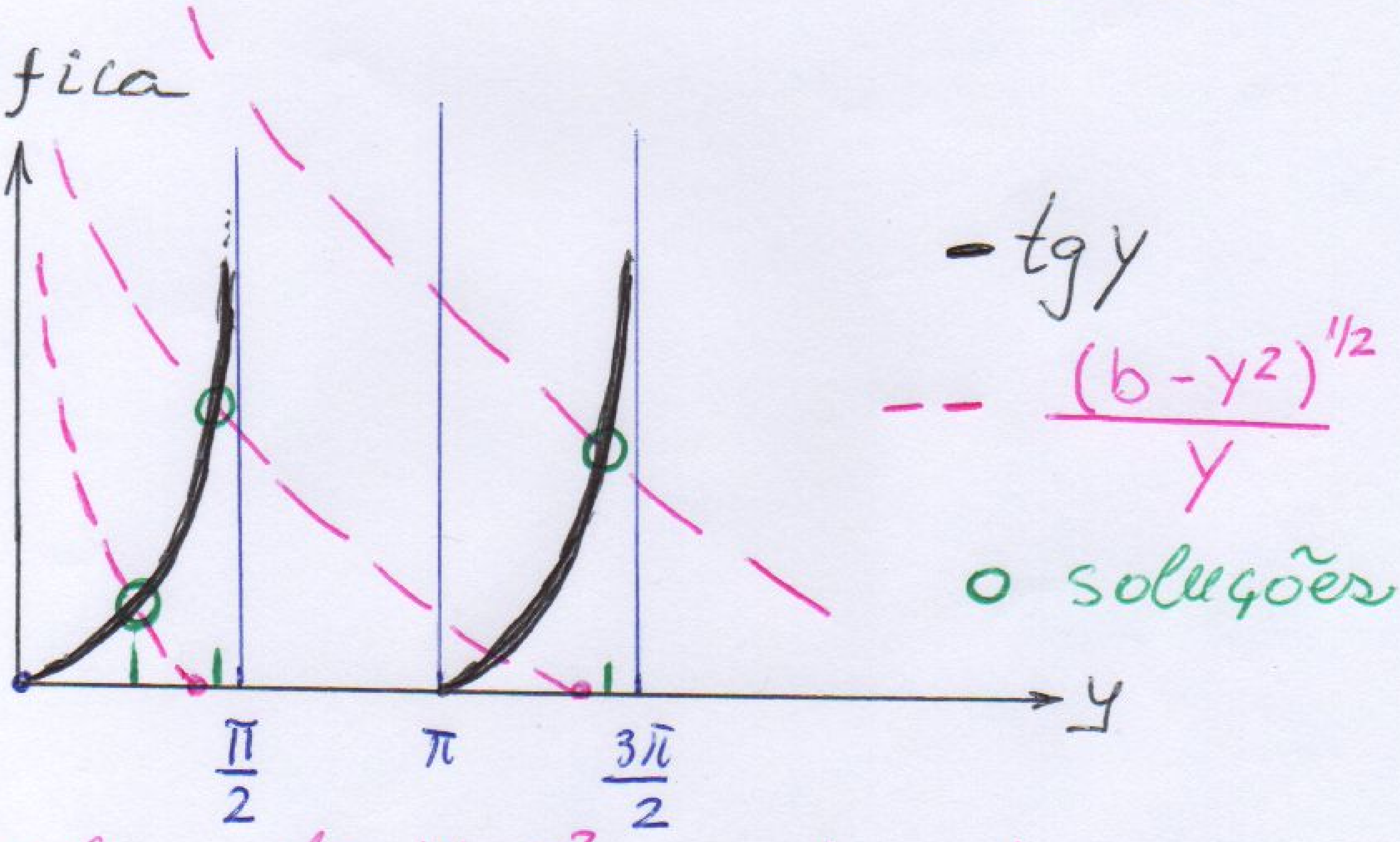
a) caso par $\quad tg\, ka = \frac{q}{k}$

$$tg\, ka = \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}}{k} = \frac{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0 - k^2}}{k} = \frac{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 - k^2a^2}}{ka}$$

$$ka \equiv y \quad e \quad \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 \equiv b$$

$$tg\, y = \frac{(b - y^2)^{1/2}}{y} \quad ; \quad \frac{b}{y^2} = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2 (ka)^2} = \frac{V_0}{E + V_0} > 1$$

solução gráfica



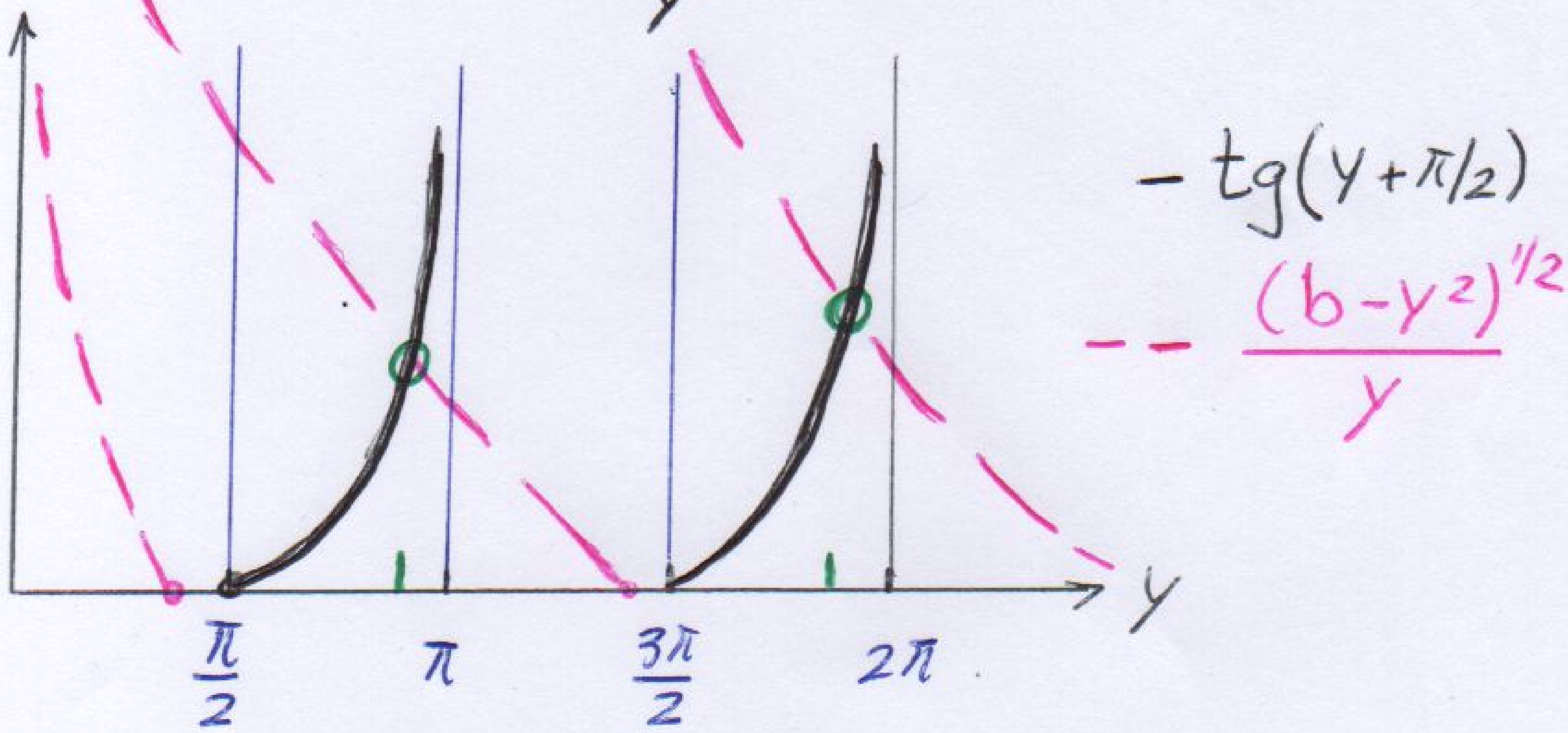
Dado um valor de $V_0 a^2$, ou b, temos uma curva --- ; as interseções o são as soluções $ka \Rightarrow$ E é quantizada.

- Mesmo p/ $V_0 a^2 \to 0$, sempre $\exists$ solução
- P/ $V_0 a^2 \to 0 \quad \underset{\uparrow ka}{y} \to n\pi/2 \Rightarrow E_n = \underbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2}_{\text{caixa 1d c/ largura 2a}} - V_0$

b) caso ímpar $\quad ctg\, Ka = \frac{-q}{K}$

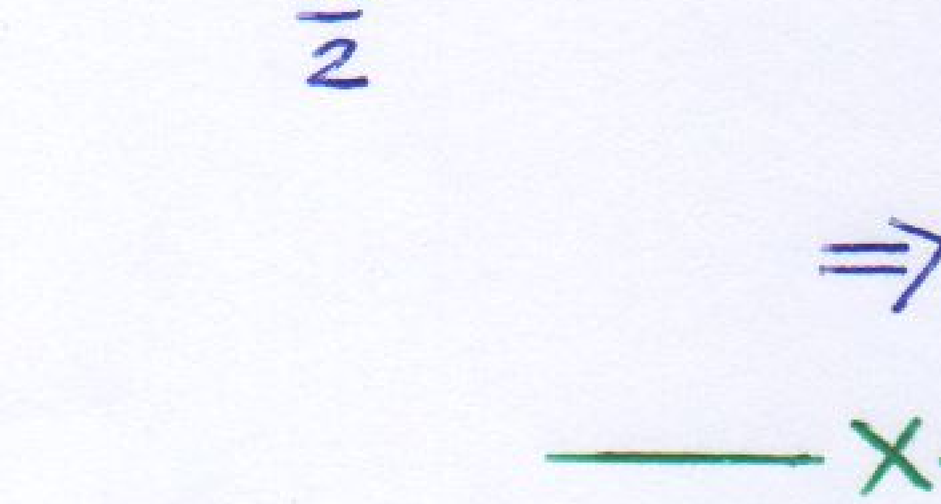
ou $\quad tg(Ka + \pi/2) = \frac{q}{K}$

$$\Rightarrow \quad tg(y + \pi/2) = \frac{(b - y^2)^{1/2}}{y}$$



• P/ $V_o a^2 \to 0$ (poço raso ou estreito) pode ñ haver solução ímpar ; sempre há pelo menos uma par.

• Se b, ou $V_o a^2$, for tal que



teremos uma única solução:

$$y_o = Ka = \pi/2$$

$$\Rightarrow tg(y_o + \pi/2) = 0 \Rightarrow b = y_o^2$$

$$\Rightarrow \frac{2mV_o a^2}{\hbar^2} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \Rightarrow V_o a^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m}$$

——X——

Como as soluções ímpares se anulam em $x = 0$ elas tb são soluções do seguinte potencial: