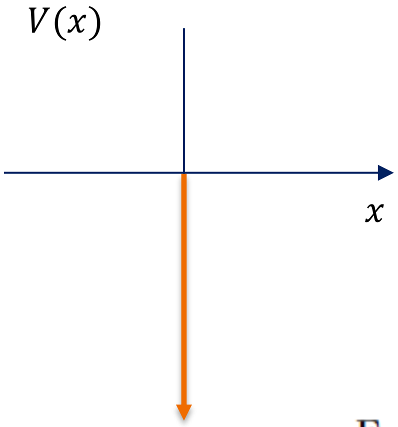
Potencial Delta

Mônica A Caracanhas
21/09/20

Poço função delta



$$V(x) = -\alpha\, \delta(x), \text{ com } \alpha > 0$$

1- Estado ligado, isto é $E < 0$

Eq. de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi(x) - \alpha\delta(x)\phi(x) = E\phi(x)\ , \quad \text{com} \quad \alpha > 0\ .$$

Para $x > 0$ ou $x < 0$,

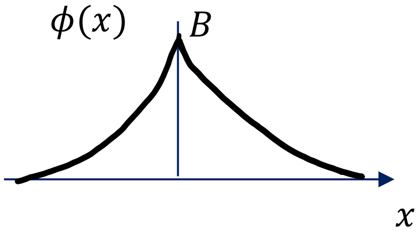
$$\rightarrow \quad \partial_x^2\phi = \rho^2\phi\ , \quad \text{com} \quad \rho^2 \equiv -2mE/\hbar^2 > 0\ .$$

Solução geral:

$$\phi(x) = Ae^{-\rho x} + Be^{\rho x}$$

Solução geral:

$$\phi(x) = Ae^{-\rho x} + Be^{\rho x}$$



$$\phi(x) = B\, e^{-\rho|x|}$$

* **para $x < 0$, devemos ter $A = 0$.**

* **para $x > 0$, devemos ter $B = 0$.**

* **continuidade de $\phi(x)$ em $x = 0$ implica $A = B$.**

Se tentássemos impor a continuidade de $\partial_x \phi(x)|_{x=0}$ (o que não pode, já que temos um potencial infinito em $x = 0$), obteríamos

$$-\rho B = \rho B \quad \rightarrow \quad B = 0\,,$$

o que seria inaceitável já que toda função de onda zeraria.

Para conseguir mais uma equação, integramos a Eq. de Schrödinger no intervalo $\{-\epsilon, \epsilon\}$ e tomamos $\epsilon \to 0$:

(isso sempre pode ser feito e resulta na continuidade de $\partial_x \phi(x)$ sempre que o potencial for finito, ou mesmo se tiver um salto finito).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \partial_x^2 \phi(x) - \alpha \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \delta(x)\phi(x) = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \phi(x) \; .$$

No limite $\epsilon \to 0$,

$x > 0$:
$\phi(x) = B\, e^{-\rho x}$

$x < 0$:
$\phi(x) = B\, e^{\rho x}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\phi}{dx}\Big|_{\epsilon} - \frac{d\phi}{dx}\Big|_{-\epsilon} \right) - \alpha\phi(0) = 0 \; .$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\rho B e^{-\rho\epsilon} - \rho B e^{\rho(-\epsilon)} \right)_{\epsilon \to 0} = \alpha\phi(0) \quad \to \quad -\frac{\hbar^2}{2m}(-2\rho B) = \alpha\phi(0) = \alpha B \; .$$

Portanto, temos um único valor para ρ:

$$\rho = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \; .$$

Assim, o único estado permitido tem energia

$$\rho^2 \equiv -2mE/\hbar^2$$

$$E = \frac{-\hbar^2\rho^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}\,.$$

e ele existe para qualquer valor de α (neste caso de poço, $\alpha > 0$).

Normalizando:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx \quad \rightarrow \quad B = \sqrt{\rho} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}\,.$$

2- Estado de espalhamento, isto é $E > 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi(x) - \alpha\delta(x)\phi(x) = E\phi(x)\ , \quad \textbf{com} \quad \alpha > 0\ .$$

Para $x > 0$ ou $x < 0$,

$$\rightarrow \quad \partial_x^2\phi = -k^2\phi\ , \quad \textbf{com} \quad k^2 \equiv 2mE/\hbar^2 > 0\ .$$

Solução geral:

$x < 0$**:** $\quad \phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$x > 0$**:** $\quad \phi(x) = Fe^{ikx}$ **, para partícula vindo da esquerda.**

Continuidade em $x = 0$: $A + B = F$.

Pulo **da derivada (a mesma expressão que antes):**

$x < 0$: $\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$x > 0$: $\phi(x) = Fe^{ikx}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d\phi}{dx}|_{\epsilon} - \frac{d\phi}{dx}|_{-\epsilon}\right) - \alpha\phi(0) = 0 \ ,$$

portanto,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(ikF - ik(A-B)\right) = \alpha(A+B) \ ,$$

ou,

$$F = A(1+2i\beta) - B(1-2i\beta) \ , \quad \text{com} \quad \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \ .$$

Resolvendo para B e F,

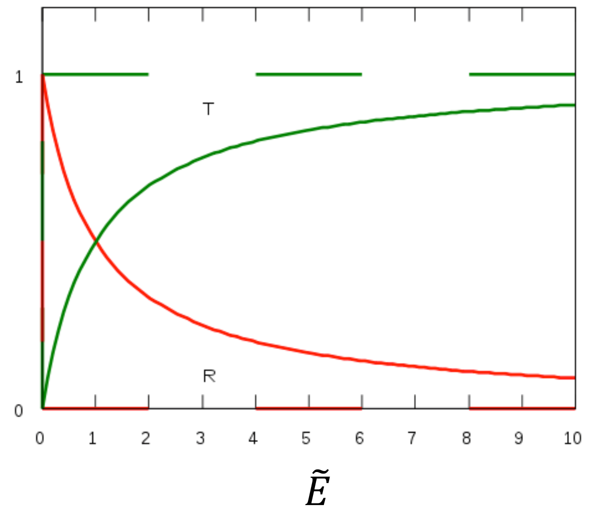
$$B = \frac{i\beta}{1-i\beta}A \quad \text{e} \quad F = \frac{1}{1-i\beta}A \ .$$

Coeficiente de reflexão:

$$R = |\frac{j_{ref}}{j_{inc}}| = |\frac{B}{A}|^2 = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} = \frac{1}{1 + 2\hbar^2 E/m\alpha^2} \; .$$

Coeficiente de transmissão:

$$T = |\frac{j_{tra}}{j_{inc}}| = |\frac{F}{A}|^2 = \frac{1}{1+\beta^2} = \frac{1}{1 + m\alpha^2/2\hbar^2 E} \; .$$



Barreira função delta

$$V(x) = \alpha\,\delta(x), \textbf{ com } \alpha > 0$$

Agora só podemos ter $E > 0$, isto é, espalhamento.

Os coeficientes R e T dependem de α^2, logo, não mudam!

Tunelamento

Classicamente, uma partícula vinda da esquerda não seria jamais encontrada na direita desse potencial. No entanto, o caráter ondulatório atribui probabilidade não nula de a partícula ser encontrada à direita: isso é denominado *tunelamento quântico*.

Estabilidade do Átomo e Princípio da incerteza de Heisenberg

Estabilidade do Átomo

Elétron no campo de Coulomb do próton (r=0)

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

Energia potencial do elétron

$$\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} = e^2 \qquad \bar{V} \simeq -\frac{e^2}{r_0}$$

Função de onda do elétron (extensão espacial r_0)

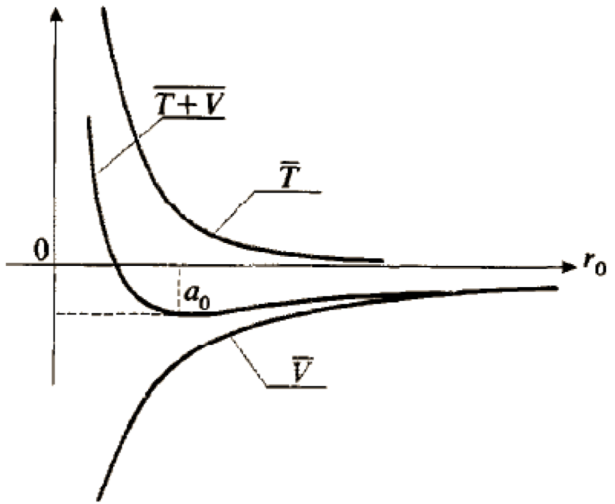
Princípio da Incerteza e energia total

Incerteza no momento $\Delta x \,.\, \Delta p \geqslant \hbar/2$

$$\overline{T} \gtrsim \overline{T}_{\min} = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}$$

Energia total

$$E_{\min} = \overline{T}_{\min} + \overline{V} = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{r_0}$$

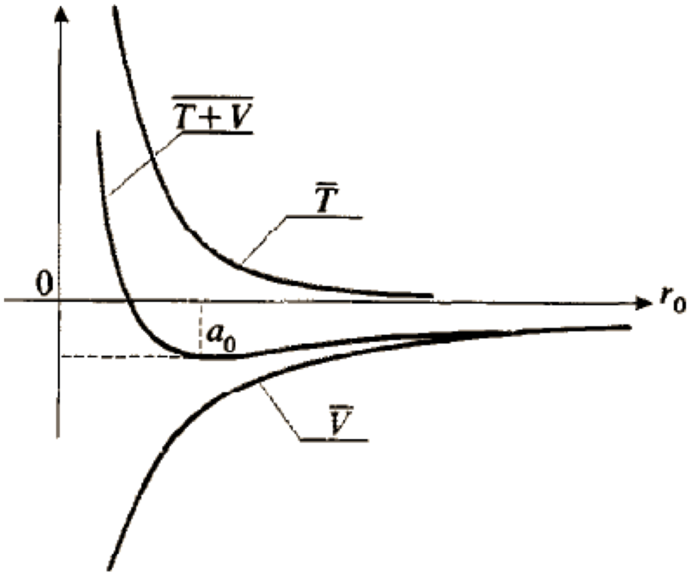


Energia do Estado fundamental

Minimização da Energia total

$$r_0 = a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$



O estado fundamental do átomo resulta do compromisso entre a energia cinética e potencial

Mecânica Clássica

Elétron em órbita circular raio r_0

Energia potencial

$$V_{cl} = -\frac{e^2}{r_0}$$

Energia cinética - força eletrostática e centrífuga

$$\frac{e^2}{r_0^2} = m\frac{v^2}{r_0}$$

$$T_{cl} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{e^2}{r_0}$$

Instabilidade do sistema ∞

Energia Total

$$E_{cl} = T_{cl} + V_{cl} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{r_0}$$

Situação energeticamente favorável $r_0 = 0$

Energia de ligação $\longrightarrow -\infty$

Referências

- https://www.nanoscience.com/techniques/scanning-tunneling-microscopy/

Quantum Mechanics - by Claude Cohen-Tannoud, Bernard Diu, Frank Laloe.

- Complemento CI