4300375 - Física moderna I

Aula 8 – Soluções da equação de Schrödinger

Parte 1

Soluções da equação de Schrödinger

- De agora em diante no curso, resolveremos a equação de Schrödinger para alguns potenciais simples, porém com características importantes para o entendimento da mecânica quântica
- Potenciais a serem resolvidos no curso:
  - Potencial degrau
  - Potencial barreira

  } Esta aula

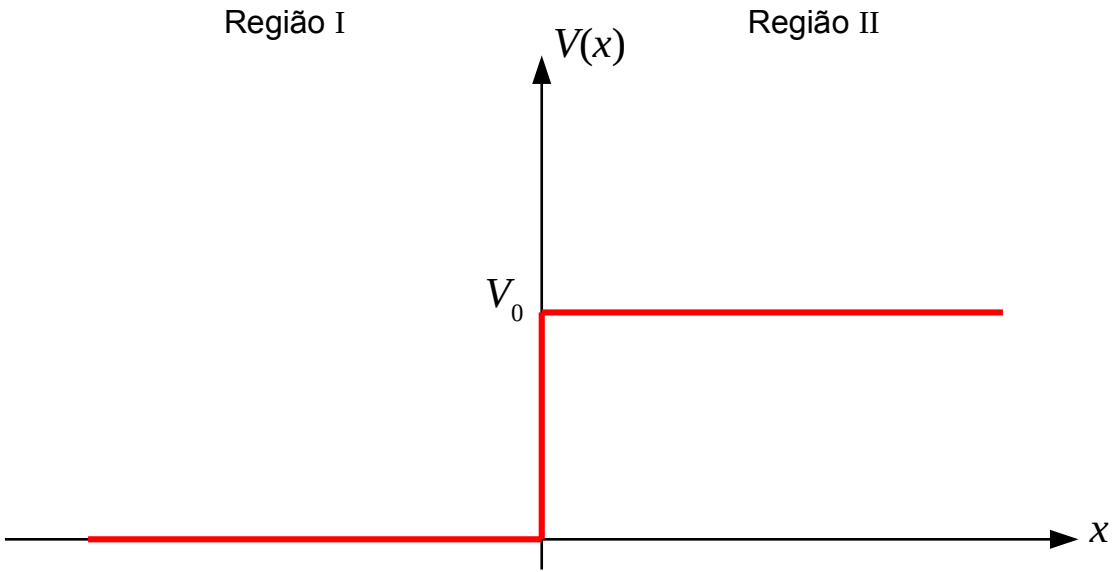
  - Potencial quadrado infinito
  - Potencial quadrado finito

  } Próxima aula

  - Oscilador harmônico
  - Átomo de hidrogênio

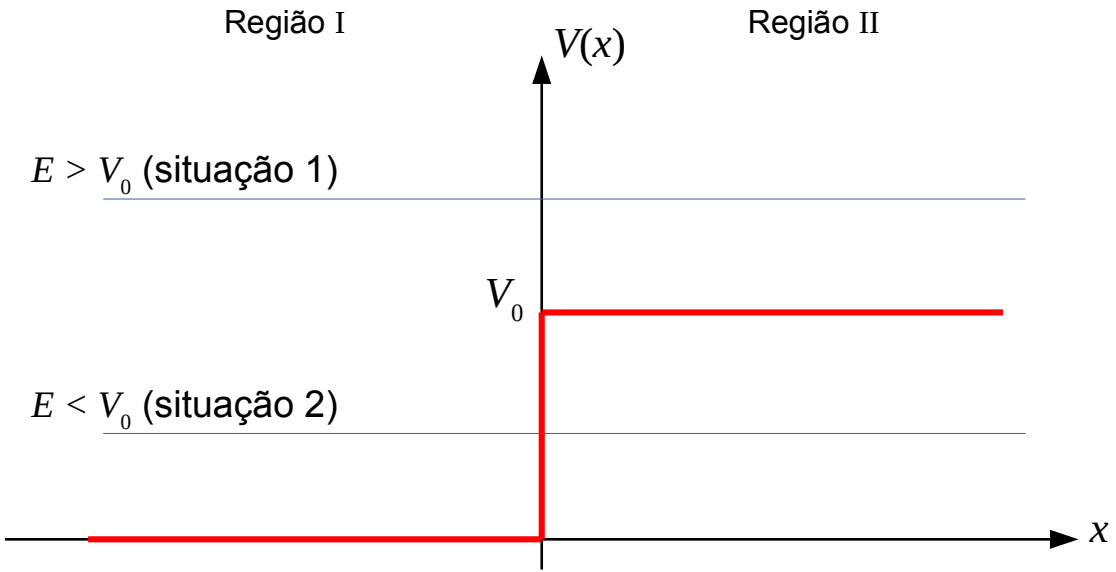
  } Até o fim do curso

O potencial degrau



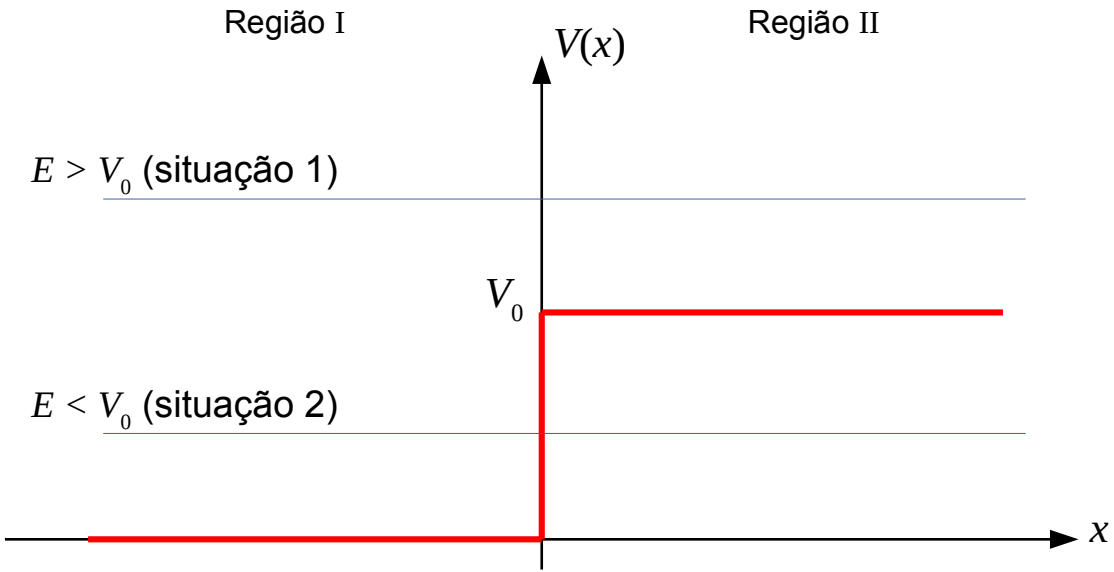
O potencial degrau

2 casos possíveis...



O potencial degrau

2 casos possíveis...

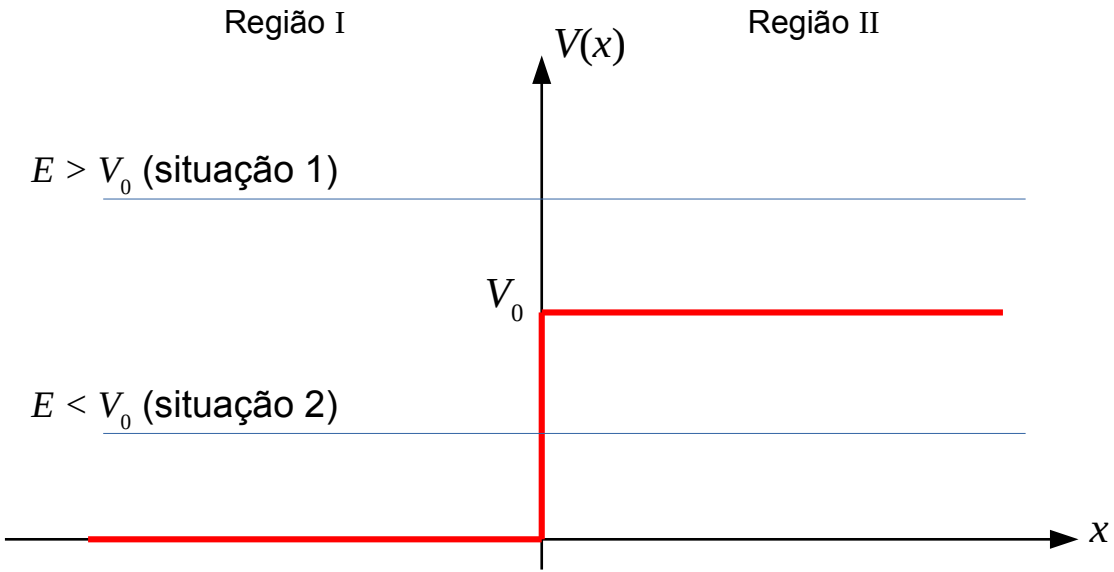


$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O potencial degrau

2 casos possíveis...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V-E]\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V]\psi(x)=0$$

$$\boxed{\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+k^2.\psi(x)=0}$$

Com:

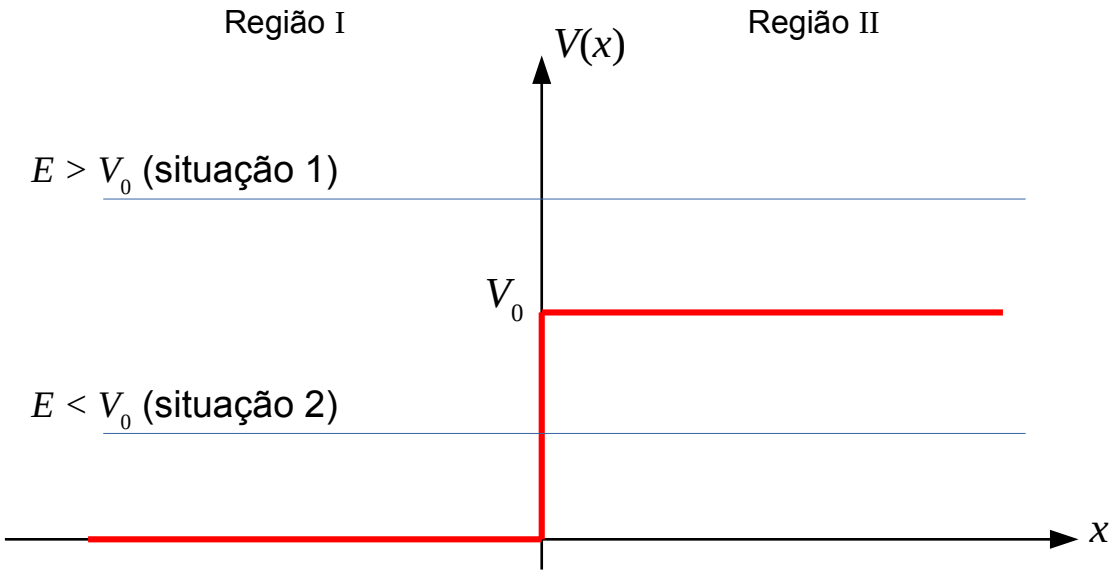
$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}[E-V]$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O potencial degrau

2 casos possíveis...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V-E]\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V]\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+k^2.\psi(x)=0$$

Com:

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}[E-V]$$

$$\psi_I(x)=A.e^{ik_I x}+B.e^{-ik_I x} \quad (x<0)$$

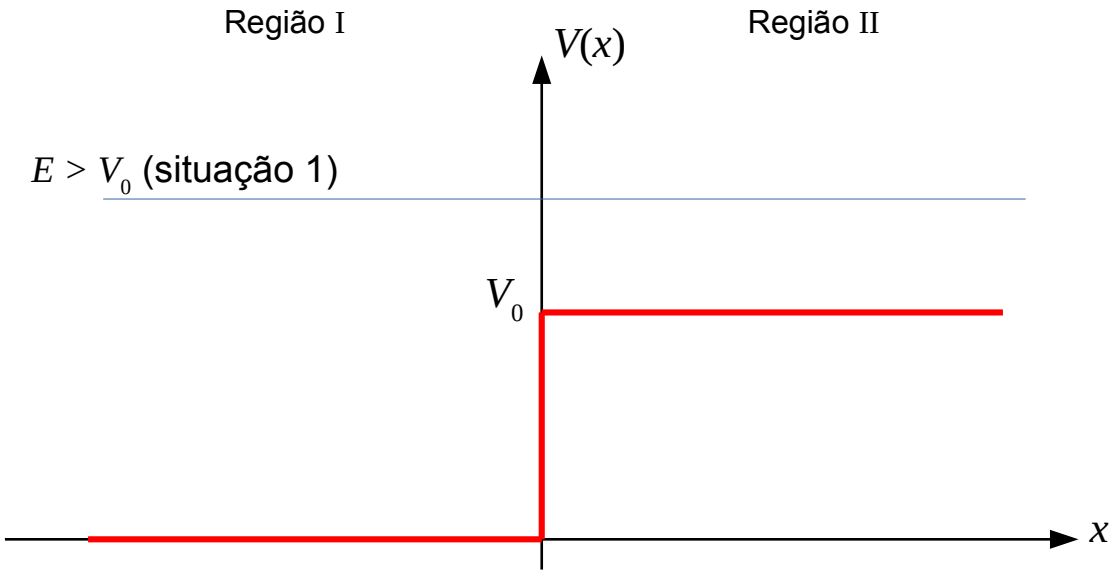
$$k_I=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi_{II}(x)=C.e^{ik_{II} x}+D.e^{-ik_{II} x} \quad (x>0)$$

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

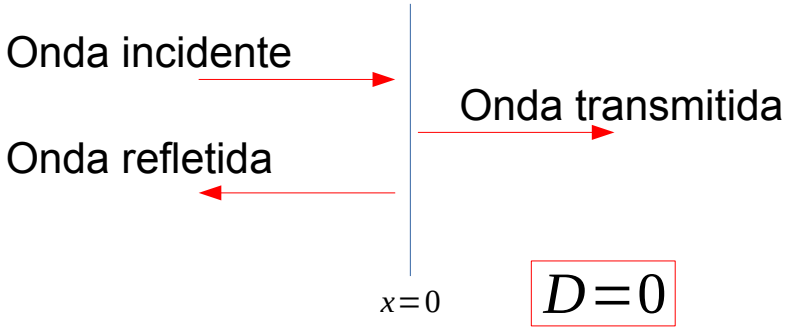
O potencial degrau

Solução do primeiro caso...



$$\psi_I(x) = A.e^{ik_I x} + B.e^{-ik_I x} \qquad (x<0)$$

$$\psi_{II}(x) = C.e^{ik_{II} x} + D.e^{-ik_{II} x} \qquad (x>0)$$



$$\boxed{D=0}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x)-E]\,\psi(x) = 0}$$

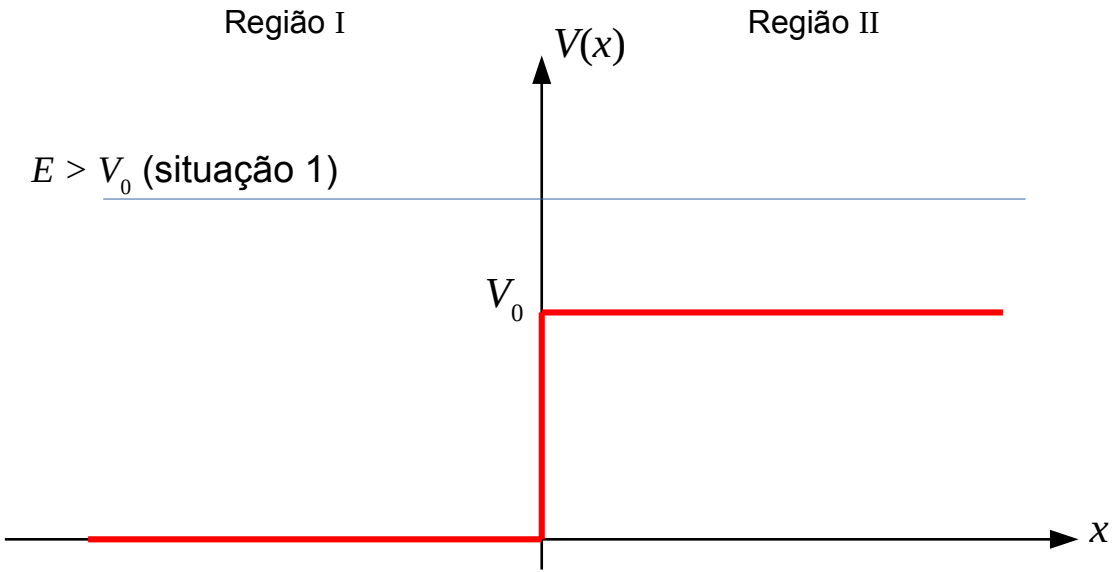
Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\psi_I(x) = A.e^{ik_I x} + B.e^{-ik_I x} \qquad (x<0)$$

$$\psi_{II}(x) = C.e^{ik_{II} x} \qquad (x>0)$$

O potencial degrau

Solução do primeiro caso...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Para encontrar A, B e C, devemos impor as condições da função de onda:

$$\psi_I(0) = A+B=\psi_{II}(0)=C$$

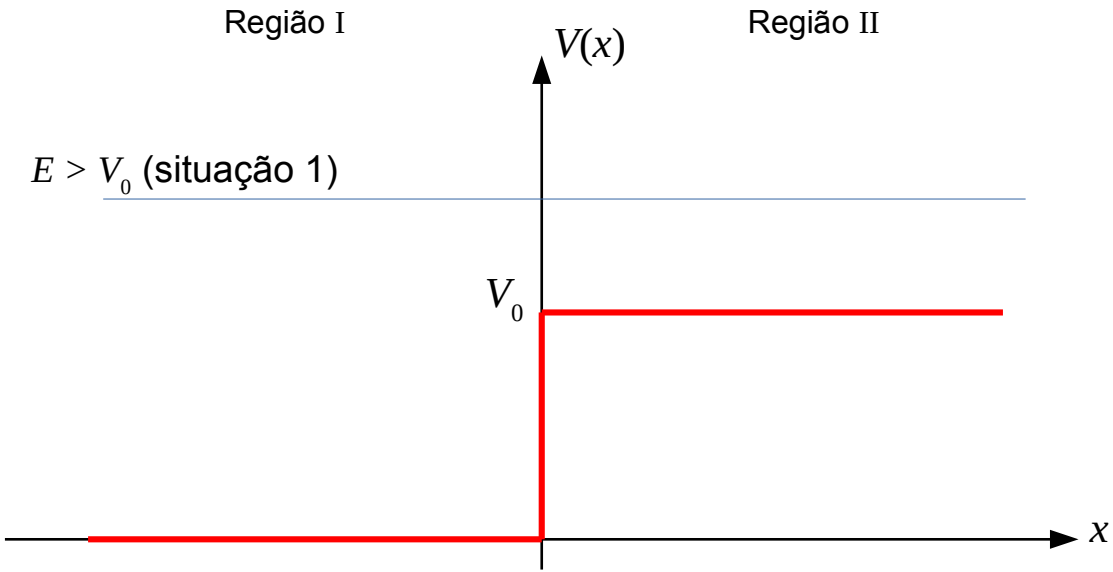
<u>A função deve ser contínua!</u>

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial x}(0) = ik_I A - ik_I B = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}(0)=ik_{II}C$$

<u>A derivada deve ser contínua!</u>

O potencial degrau

Solução do primeiro caso...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\begin{cases} A+B=C \\ k_I A - k_I B = k_{II} C \end{cases}$$

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

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

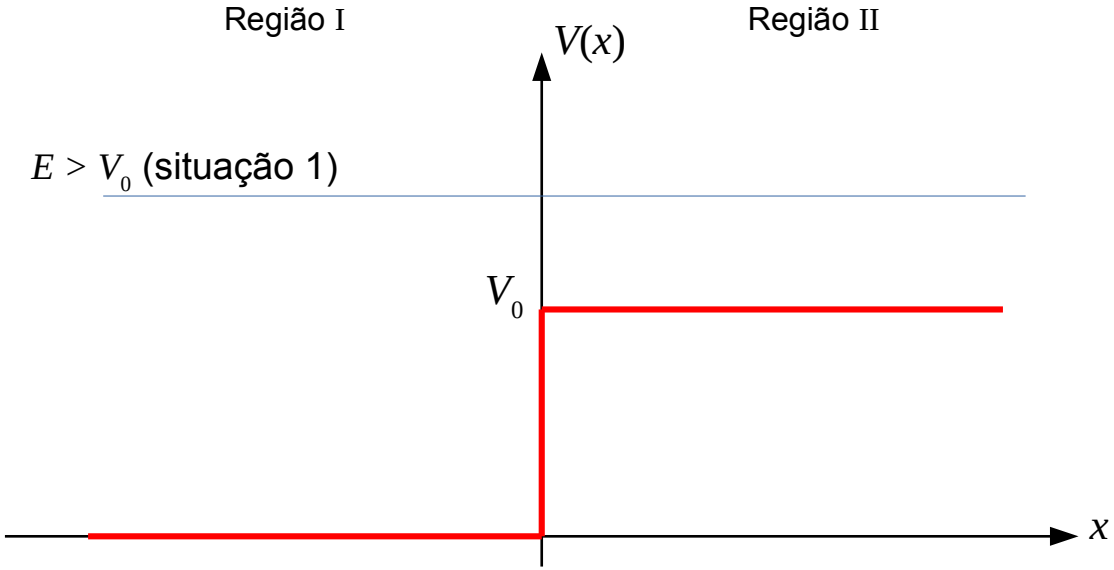
$$k_I A - k_I\left(\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}A\right)=k_{II}C$$

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

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

O potencial degrau

Solução do primeiro caso...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$B=\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}A \qquad k_I=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

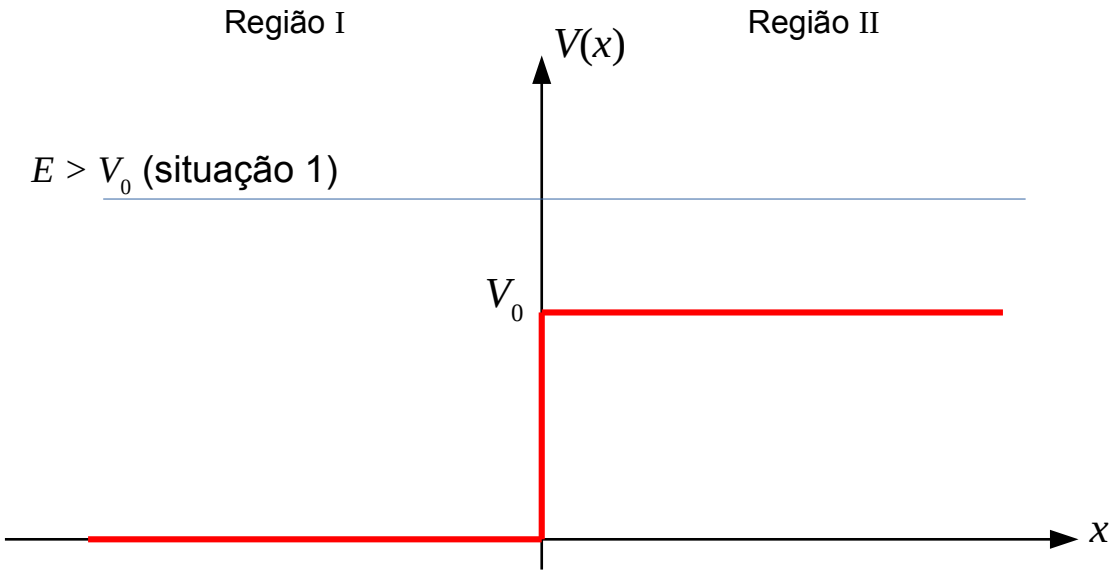
$$C=\frac{2k_I}{k_I+k_{II}}A \qquad k_{II}=\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$$B=\frac{E^{1/2}-(E-V_0)^{1/2}}{E^{1/2}+(E-V_0)^{1/2}}A$$

$$C=\frac{2E^{1/2}}{E^{1/2}+(E-V_0)^{1/2}}A$$

O potencial degrau

Solução do primeiro caso...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\,\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Soluções completas:

$$\psi_I(x)=A.\left(e^{ik_I x}+\frac{E^{1/2}-(E-V_0)^{1/2}}{E^{1/2}+(E-V_0)^{1/2}}.e^{-ik_I x}\right)$$

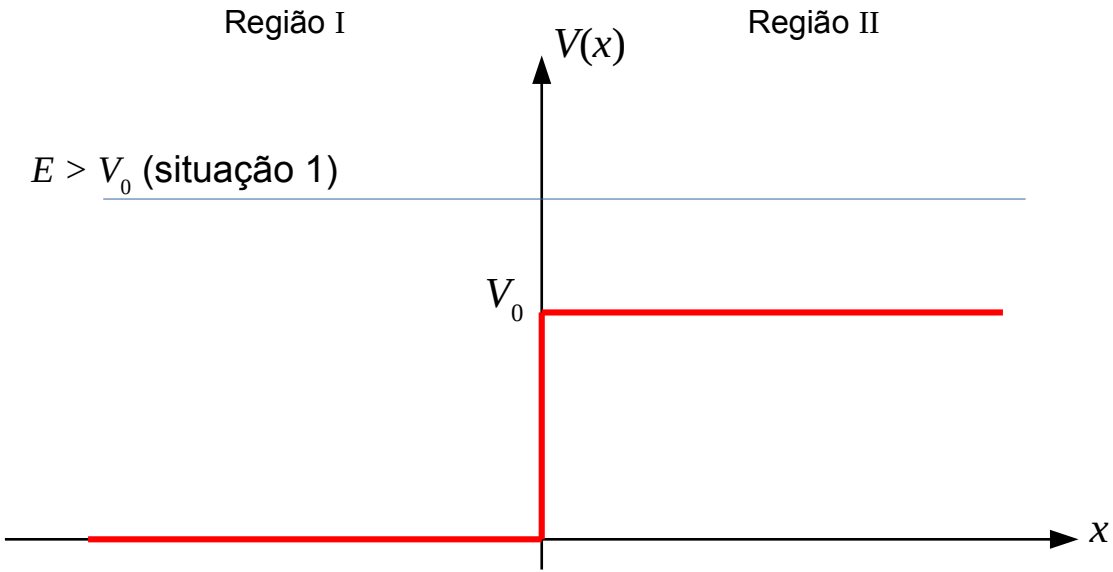
$$(x<0)$$

$$\psi_{II}(x)=A.\left(\frac{2E^{1/2}}{E^{1/2}+(E-V_0)^{1/2}}\right).e^{ik_{II}x}$$

$$(x>0)$$

O potencial degrau

Solução do primeiro caso...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

Coeficiente de reflexão:

$$R=\frac{v_I B^2}{v_I A^2}=\left(\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}\right)^2$$

Coeficiente de transmissão:

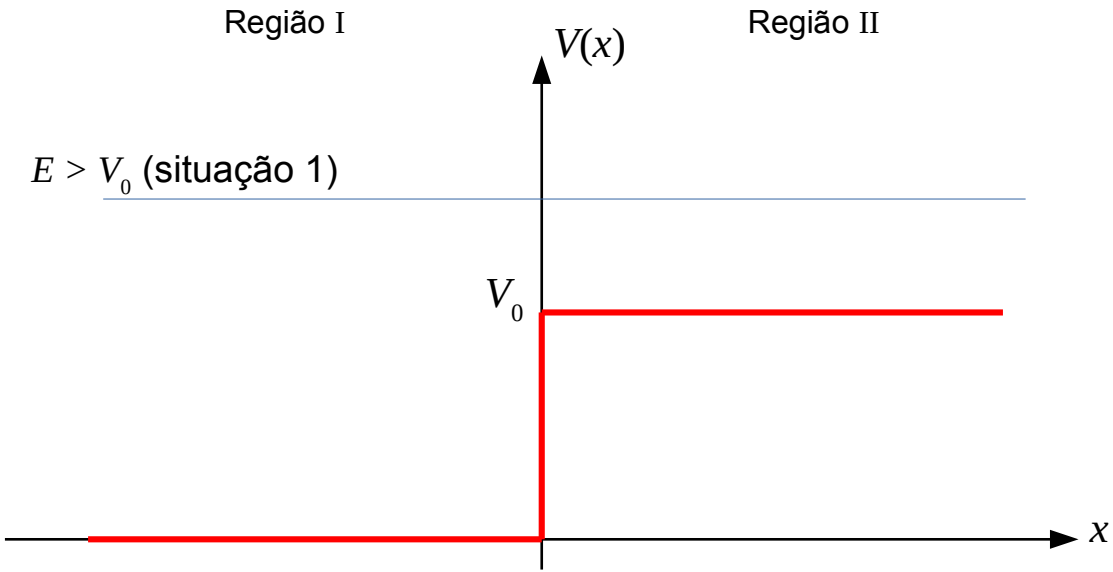
$$T=\frac{v_{II} C^2}{v_I A^2}=\frac{k_{II} C^2}{k_I A^2}=\frac{4 k_I k_{II}}{(k_I+k_{II})^2}$$

Note que:

$$R+T=1$$

O potencial degrau

Solução do primeiro caso...



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

Equação de Schrö

Note que, classicamente, a reflexão **deveria** ser nula!

Coeficiente de reflexão:

$$R=\frac{v_I B^2}{v_I A^2}=\left(\frac{k_I-k_{II}}{k_I+k_{II}}\right)^2$$

Coeficiente de transmissão:

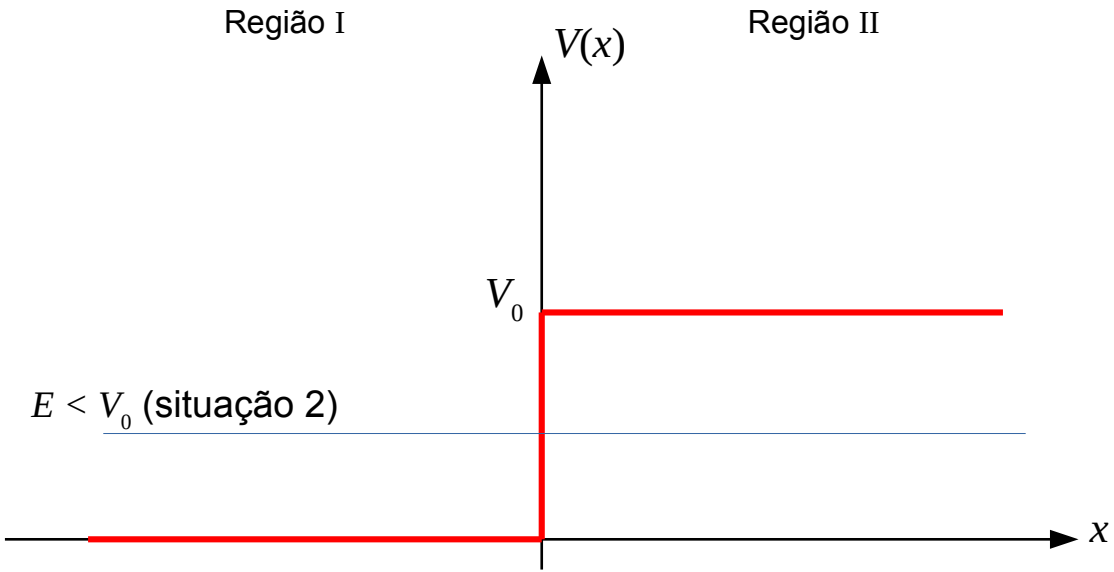
$$T=\frac{v_{II} C^2}{v_I A^2}=\frac{k_{II} C^2}{k_I A^2}=\frac{4 k_I k_{II}}{(k_I+k_{II})^2}$$

Note que:

$$R+T=1$$

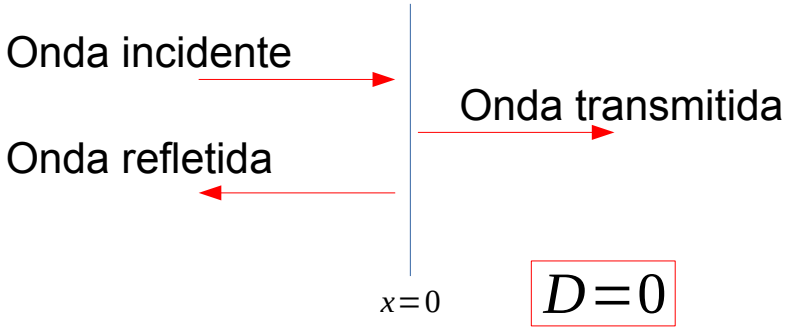
O potencial degrau

Solução do segundo caso...



$$\psi_I(x) = A.e^{ik_I x} + B.e^{-ik_I x} \qquad (x<0)$$

$$\psi_{II}(x) = C.e^{ik_{II} x} + D.e^{-ik_{II} x} \qquad (x>0)$$



$$\boxed{D=0}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x)-E]\,\psi(x) = 0}$$

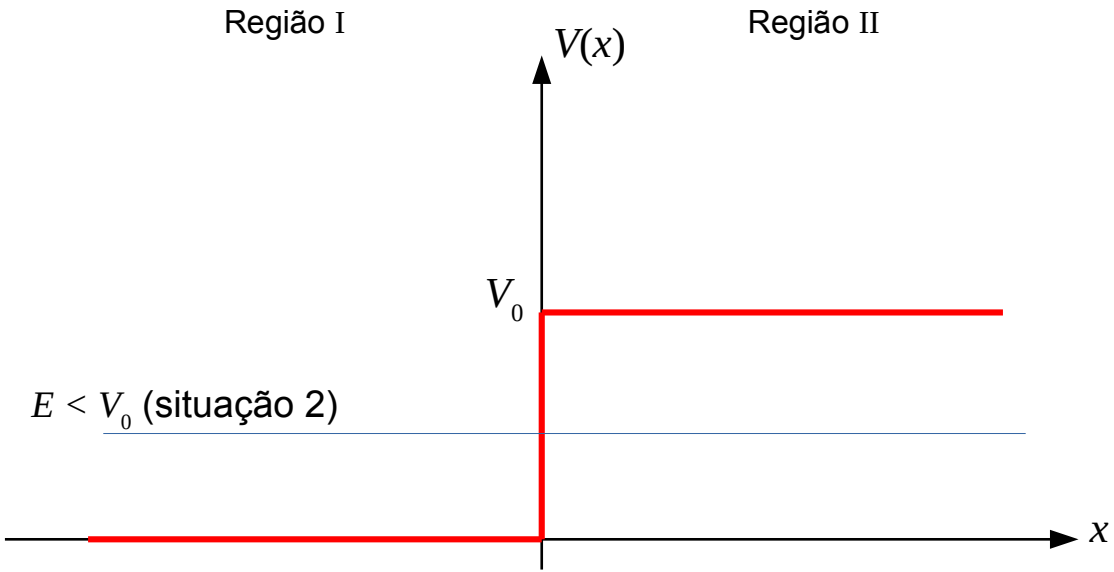
Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\psi_I(x) = A.e^{ik_I x} + B.e^{-ik_I x} \qquad (x<0)$$

$$\psi_{II}(x) = C.e^{ik_{II} x} \qquad (x>0)$$

O potencial degrau

Solução do segundo caso...



$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\,\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\psi_I(x) = A.e^{ik_I x}+B.e^{-ik_I x} \qquad (x<0)$$

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

$$\psi_{II}(x) = C.e^{ik_{II} x} \qquad (x>0)$$

Mas, agora:

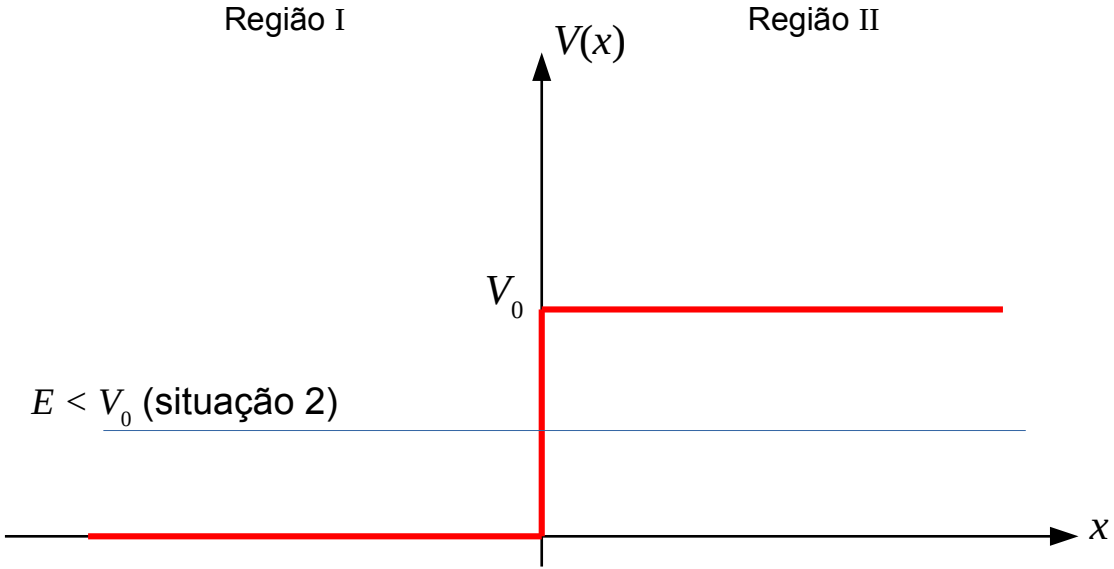
$$k_{II}=\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}=i\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

Note que agora $\psi_{II}(x)$ é uma função real:

$$\psi_{II}(x) = C.e^{-|k_{II}|x} \qquad (x>0)$$

O potencial degrau

Solução do segundo caso...



$$\psi_I(0) = A + B = \psi_{II}(0) = C$$

<u>A função deve ser contínua!</u>

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial x}(0) = i k_I A - i k_I B = \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x}(0) = -|k_{II}| C$$

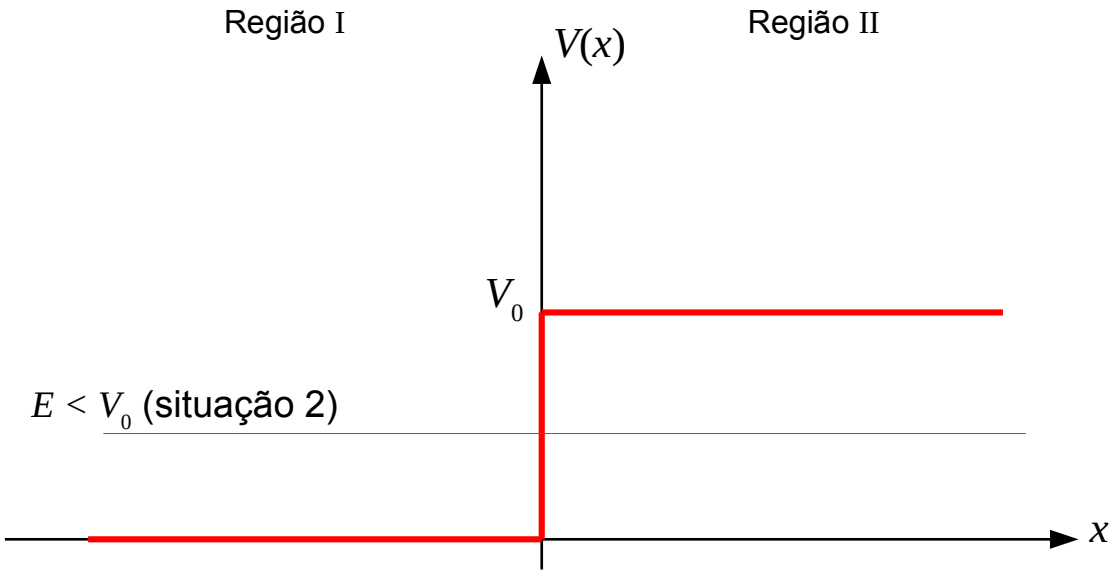
<u>A derivada deve ser contínua!</u>

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2} + [V(x) - E]\psi(x) = 0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O potencial degrau

Solução do segundo caso...



$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\begin{cases} A+B=C \\ k_I A - k_I B = i k_{II} C \end{cases}$$

k_{II} real para simplificar a notação!!!

$$k_I A - k_I B = i k_{II}[A+B]$$

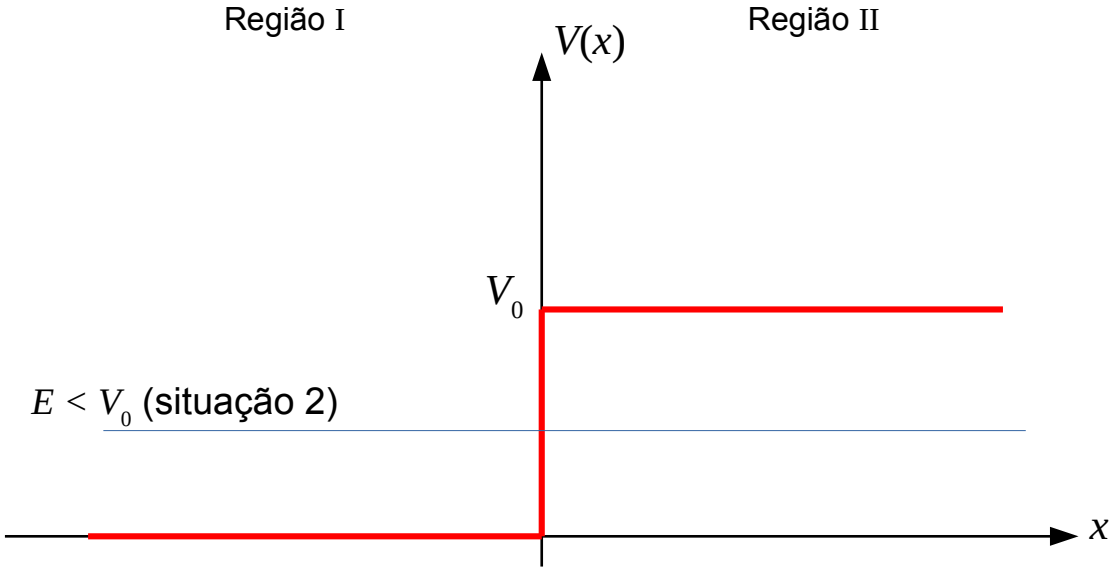
$$\boxed{B=\frac{k_I - i k_{II}}{k_I + i k_{II}} A}$$

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

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

O potencial degrau

Solução do segundo caso...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$B=\frac{k_I-ik_{II}}{k_I+ik_{II}}A \qquad k_I=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

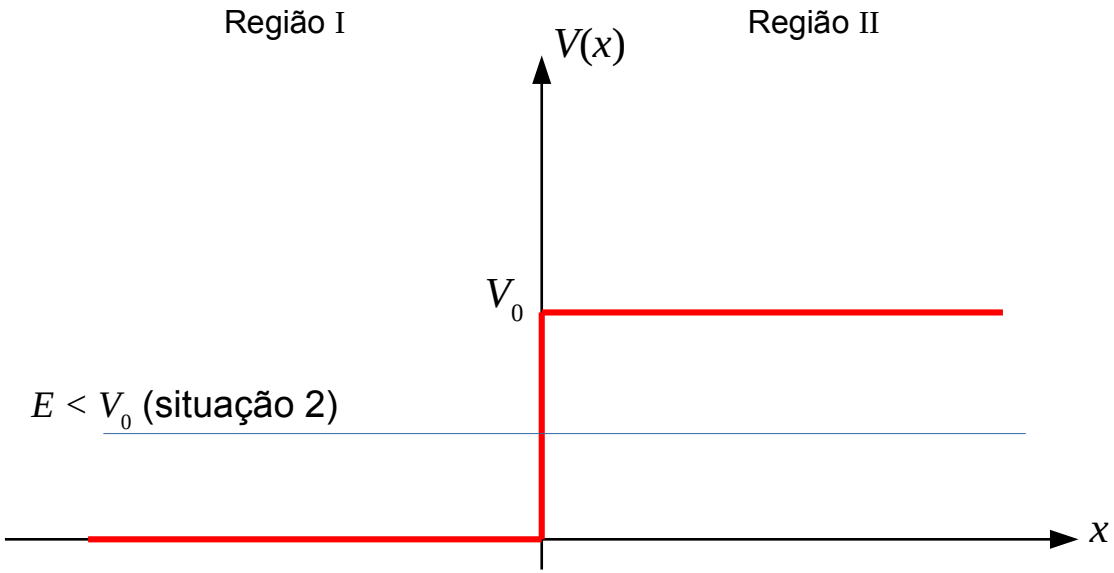
$$C=\left(\frac{2k_I}{k_I+ik_{II}}\right)A \qquad k_{II}=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

$$R=\frac{v_I B^* B}{v_I A^* A}=\left[\frac{(k_I-ik_{II}).(k_I+ik_{II})}{(k_I+ik_{II}).(k_I-ik_{II})}\right]=1$$

Reflexão igual a 1!

O potencial degrau

Solução do segundo caso...



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\,\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\psi_I(x)=A.e^{ik_I x}+B.e^{-ik_I x} \qquad (x<0)$$

$$\psi_{II}(x)=C.e^{-|k_{II}|x} \qquad (x>0)$$

$$P(x)=\psi_{II}^2(x)=C^2.e^{-2|k_{II}|x} \qquad (x>0)$$

$$P(x_{1/2})=(1/2).P(0)\Rightarrow$$

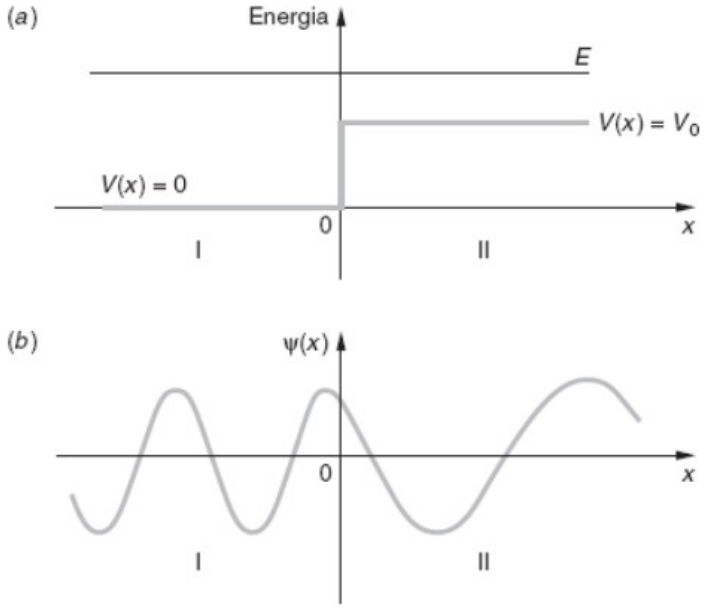
$$\frac{P(x_{1/2})}{P(0)}=\frac{\psi_{II}^2(x_{1/2})}{\psi_{II}^2(0)}=e^{-2|k_{II}|x}$$

$$x_{1/2}=\frac{\ln 4}{|k_{II}|}$$

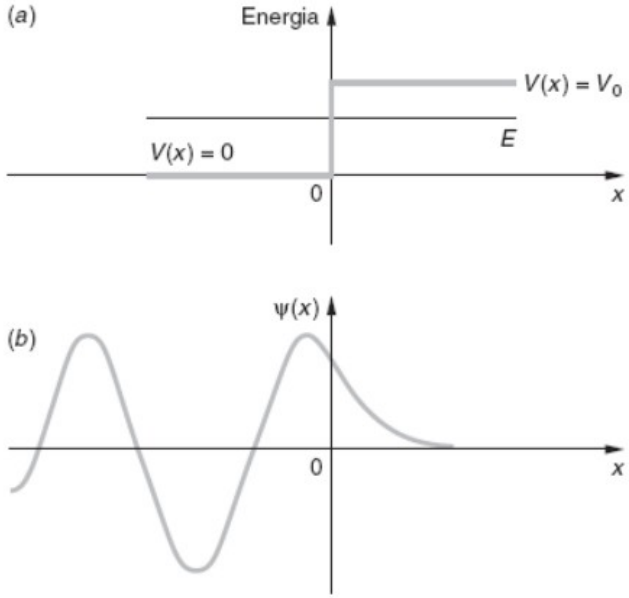
Probabilidade não nula de se encontrar partículas em x>0!

O potencial degrau

Situação 1



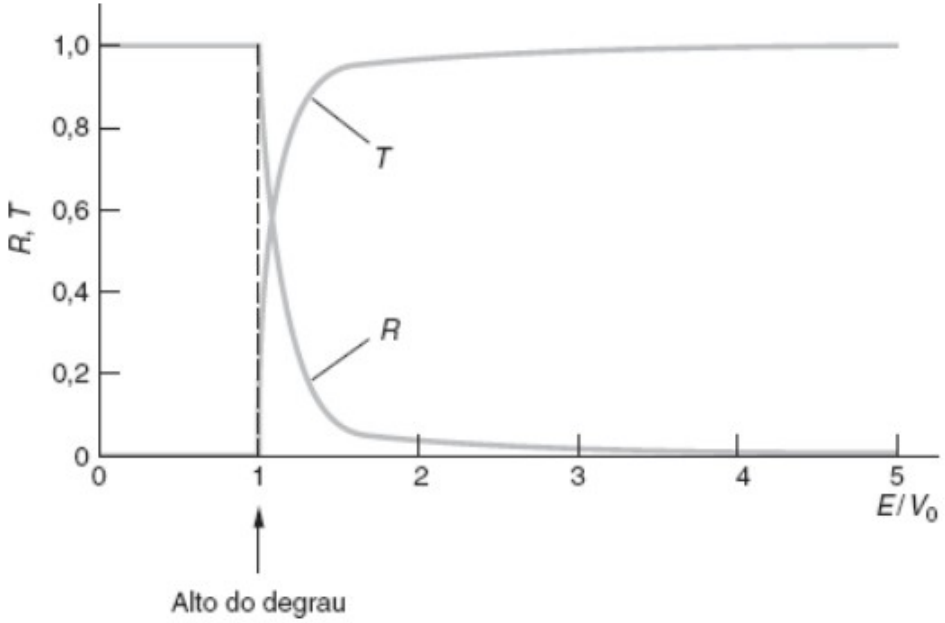
Situação 2



1) Classicamente não se espera reflexão no caso $E<V_0$

2) Classicamente não existe probabilidade de se encontra a partícula em $x>0$ para $E<V_0$

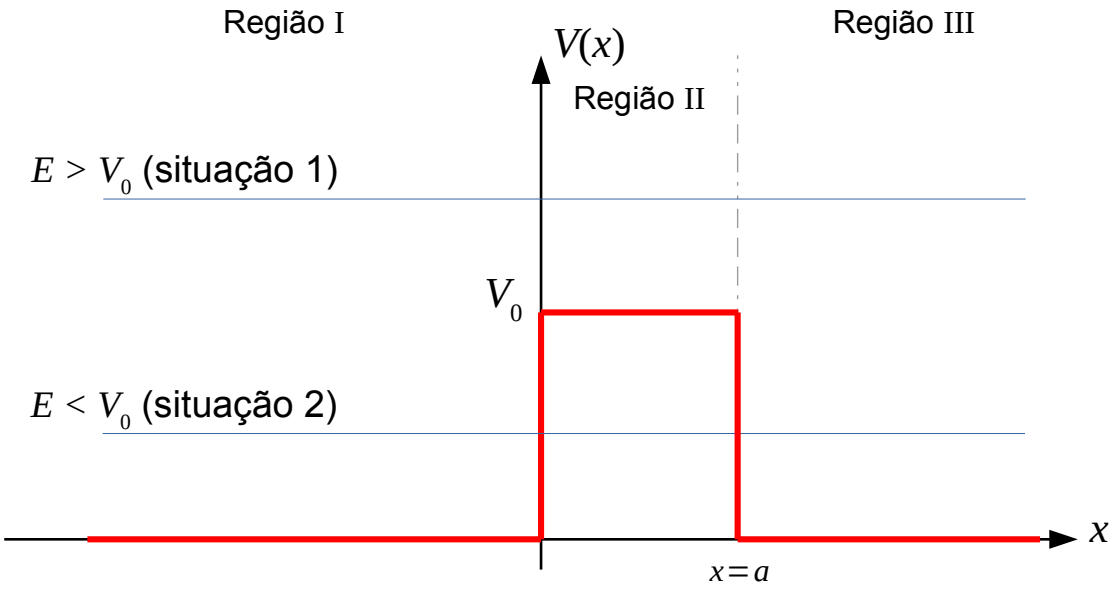
O potencial degrau



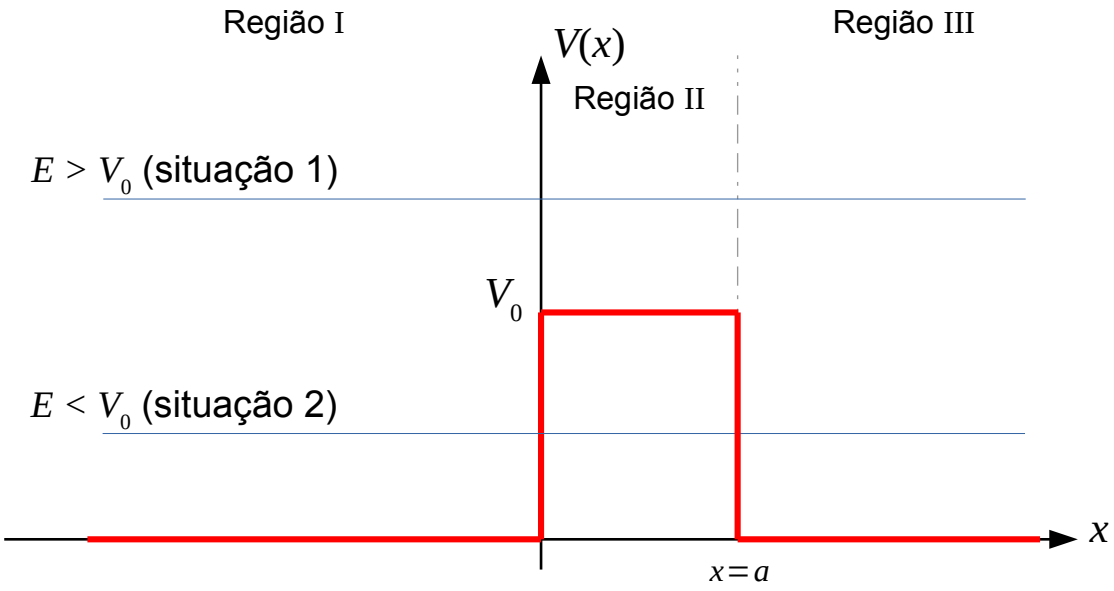
1) Classicamente não se espera reflexão no caso $E<V_0$

2) Classicamente não existe probabilidade de se encontra a partícula em $x>0$ para $E<V_0$

O potencial barreira



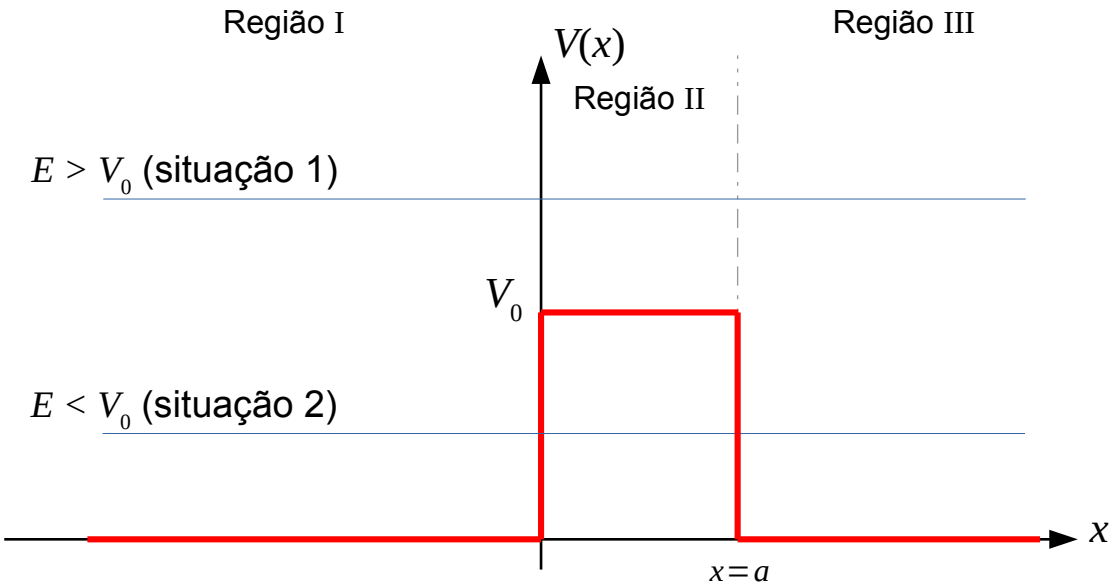
O potencial barreira

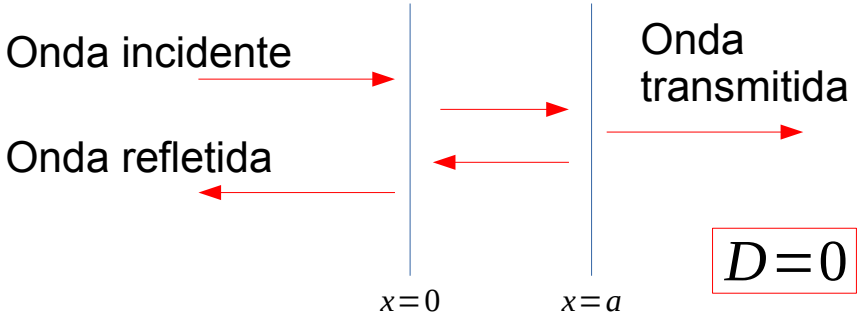


$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

O potencial barreira





$$D=0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

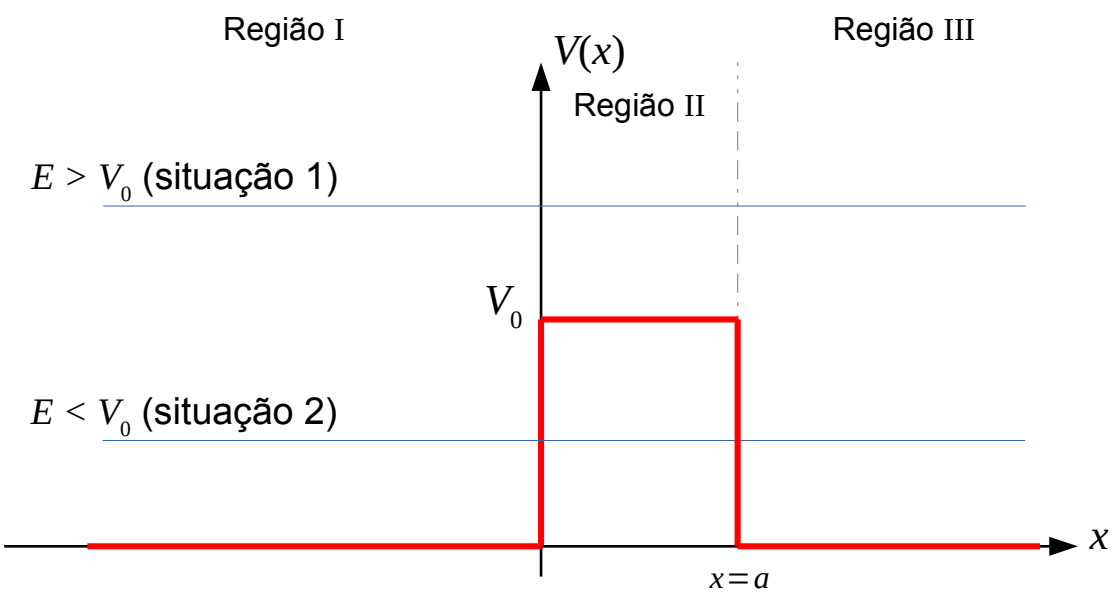
$$\psi_I(x)=A.e^{ik_I x}+B.e^{-ik_I x} \qquad (x<0)$$

$$\psi_{II}(x)=F.e^{ik_{II} x}+G.e^{-ik_{II} x} \qquad (0<x<a)$$

$$\psi_{III}(x)=C.e^{ik_{II} x} \qquad (x>a)$$

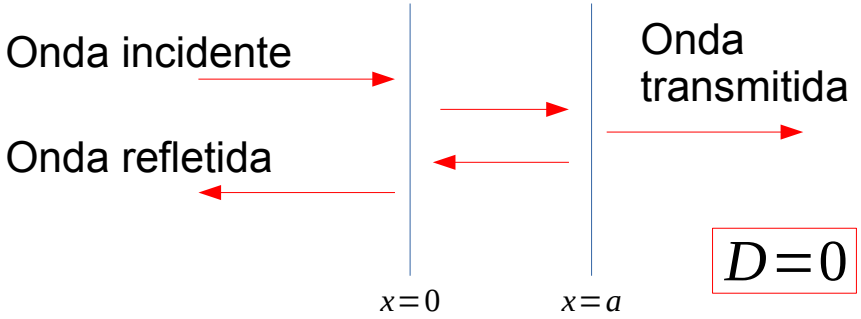
$$k_I=k_{III}=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad k_{II}=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

O potencial barreira



$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\,\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo



$$\boxed{D=0}$$

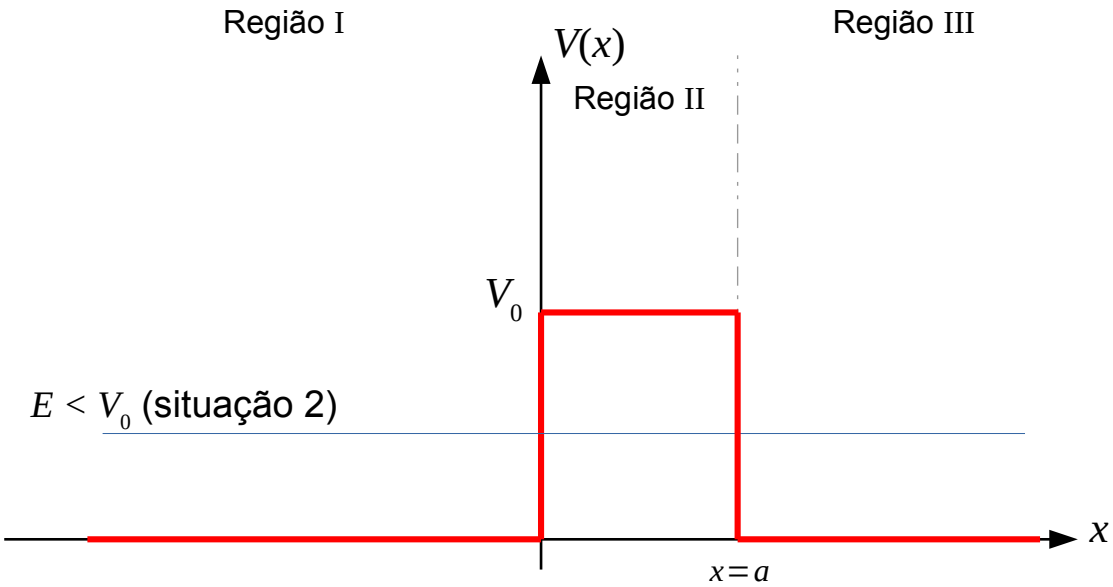
Caso $E<V_0$:

$$\psi_{II}(x)=F.e^{k_{II}x}+G.e^{-k_{II}x} \qquad (0<x<a)$$

Caso $E>V_0$:

$$\psi_{II}(x)=F.e^{ik_{II}x}+G.e^{-ik_{II}x} \qquad (0<x<a)$$

O potencial barreira



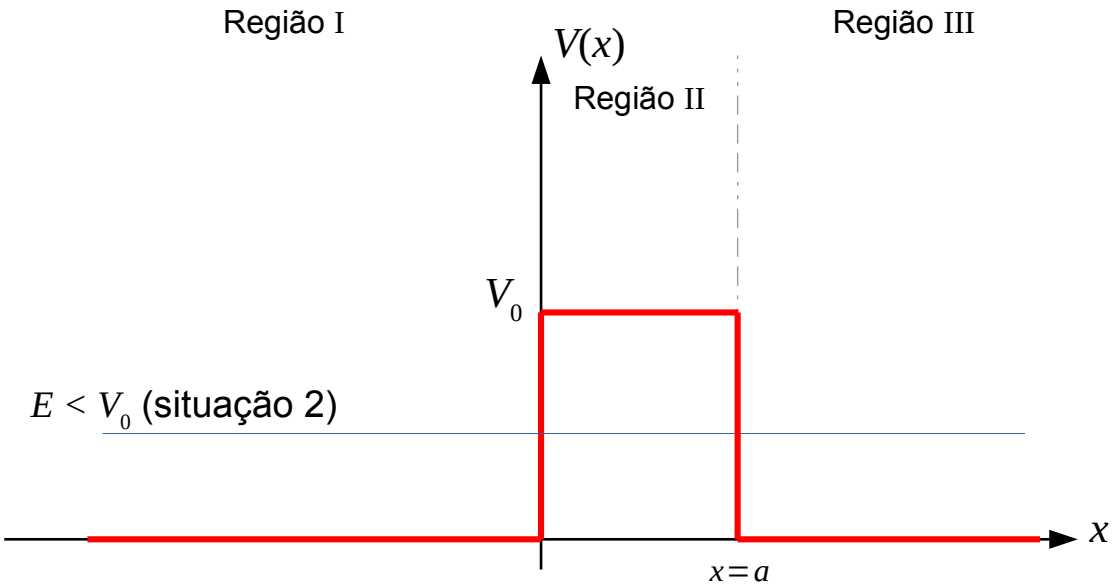
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\,\psi(x)=0}$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

$$\begin{cases} \psi_I(0)=\psi_{II}(0) \\ \dfrac{d\,\psi_I(0)}{dx}=\dfrac{d\,\psi_{II}(0)}{dx} \\ \psi_{II}(a)=\psi_{III}(a) \\ \dfrac{d\,\psi_{II}(a)}{dx}=\dfrac{d\,\psi_{III}(a)}{dx} \end{cases}$$

$$\begin{cases} A+B=F+G \\ i\,k_I(A-B)=k_{II}(F-G) \\ F.e^{k_{II}a}+G.e^{-k_{II}a}=C.e^{i\,k_{III}a} \\ k_{II}(F.e^{k_{II}a}+G.e^{-k_{II}a})=i\,k_{III}.C.e^{i\,k_{III}a} \end{cases}$$

O potencial barreira



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0$$

Equação de Schrödinger independente do tempo

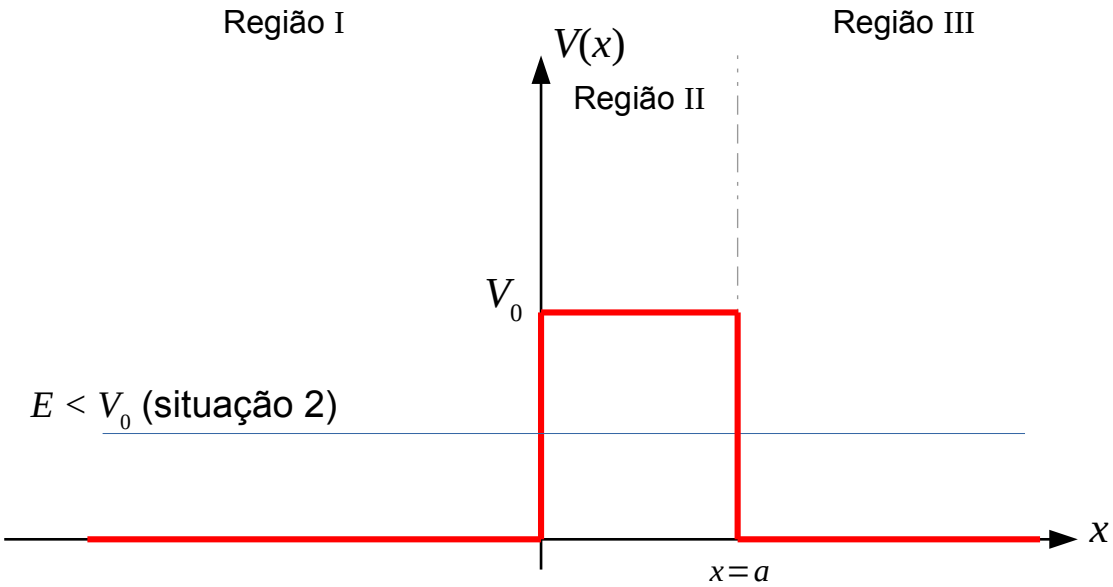
$$T=\frac{v_{III}C^*.C}{v_I A^*.A} \quad \text{note que } v_{III}=v_I$$

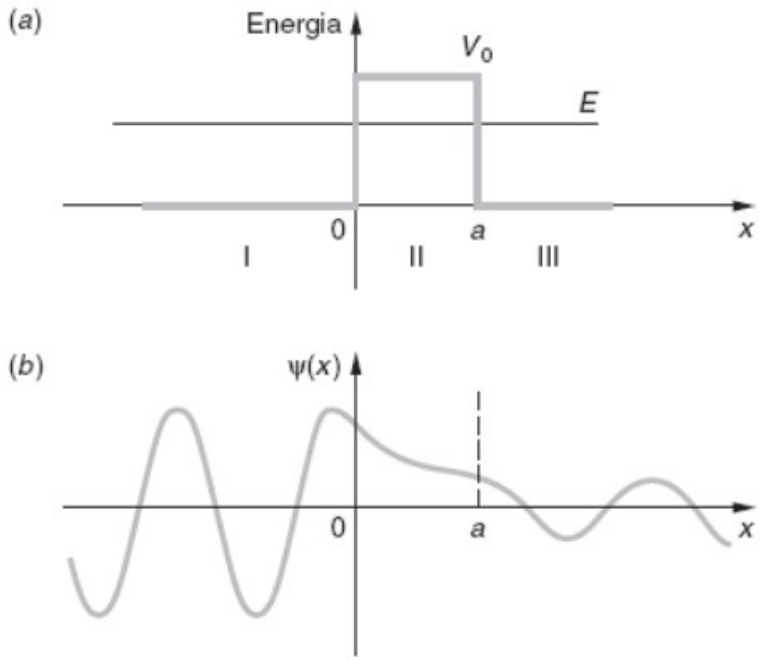
$$T=\frac{C^*.C}{A^*.A}=\left[1+\frac{\operatorname{senh}^2(\alpha)}{4\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1}$$

$$\operatorname{senh}(\alpha)=\frac{e^{\alpha}-e^{-\alpha}}{2} \qquad \alpha=k_{II}a=\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}$$

$$\text{se} \quad \alpha \gg 1 \qquad T\approx 16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)e^{-2\alpha}$$

O potencial barreira



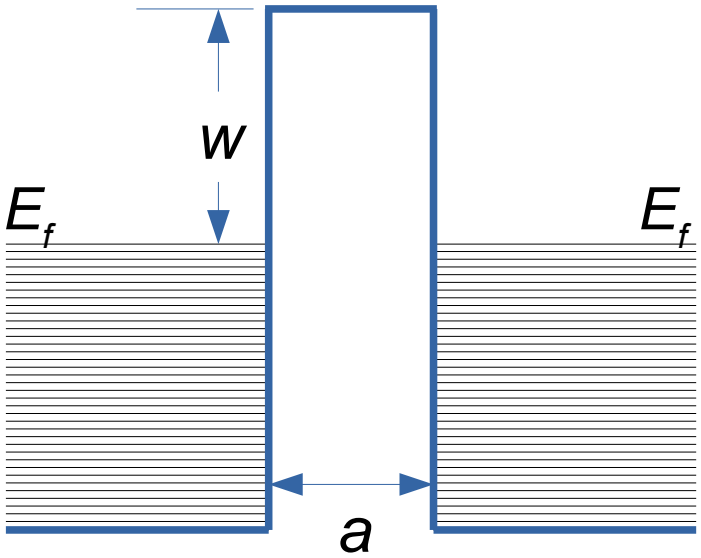


$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2[\psi(x)]}{dx^2}+[V(x)-E]\psi(x)=0}$$

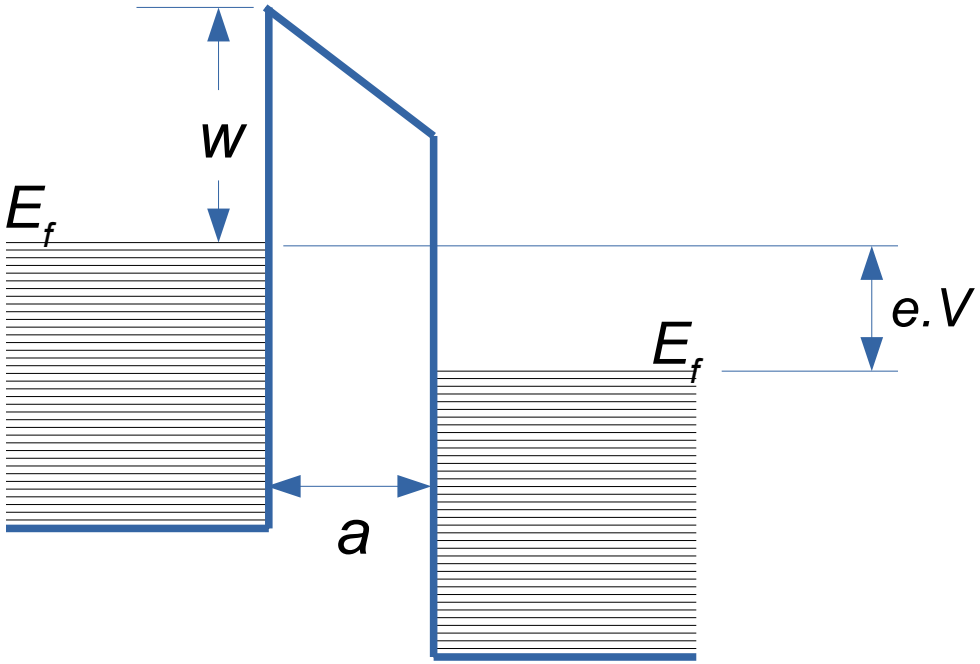
Equação de Schrödinger independente do tempo

O potencial barreira

Exemplo de dois metais iguais distantes de uma distância *d:*



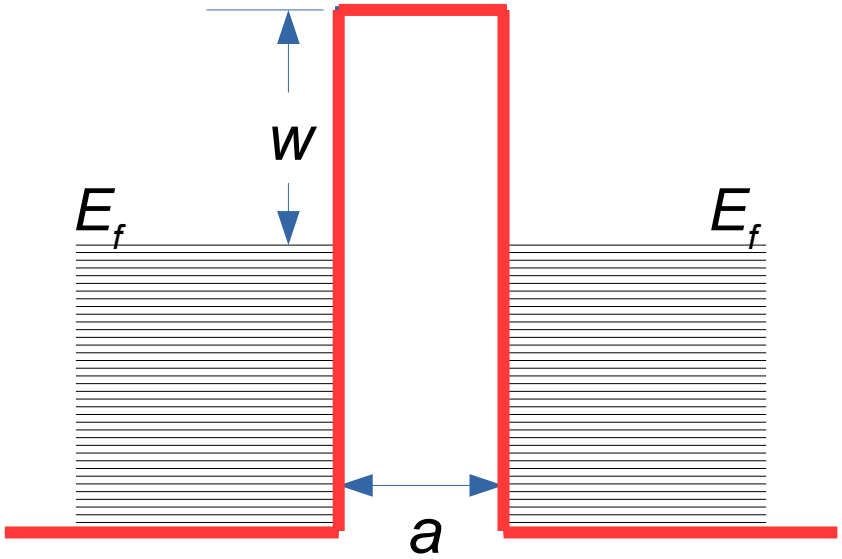
Potencial elétrico igual



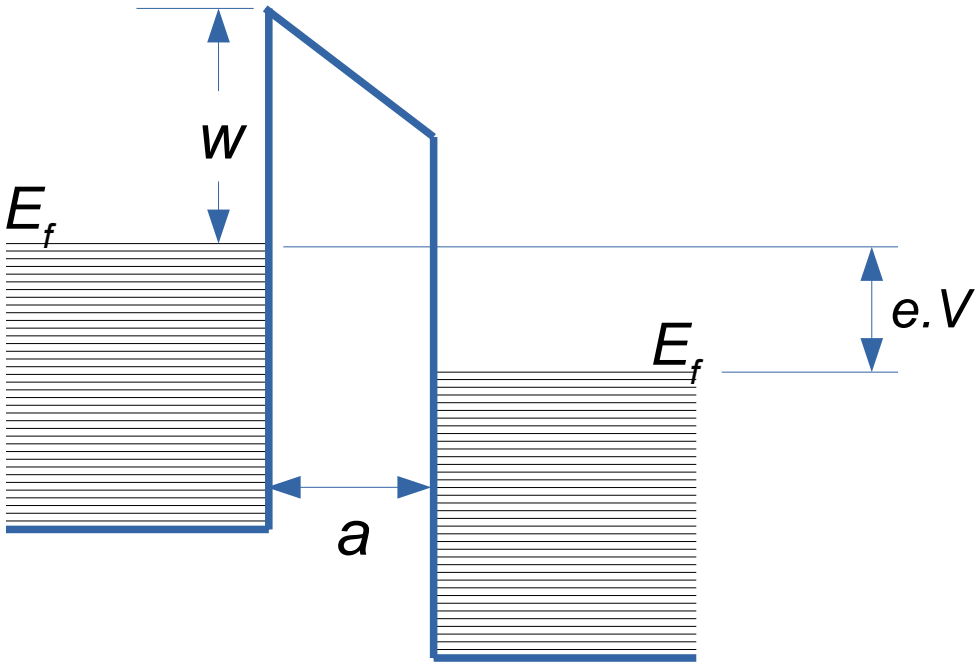
Potencial elétrico diferente

O potencial barreira

Exemplo de dois metais iguais distantes de uma distância *d:*



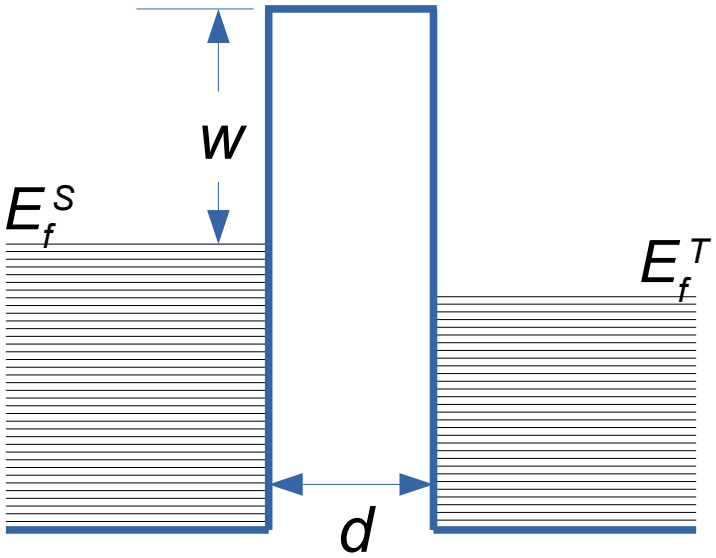
Potencial elétrico igual



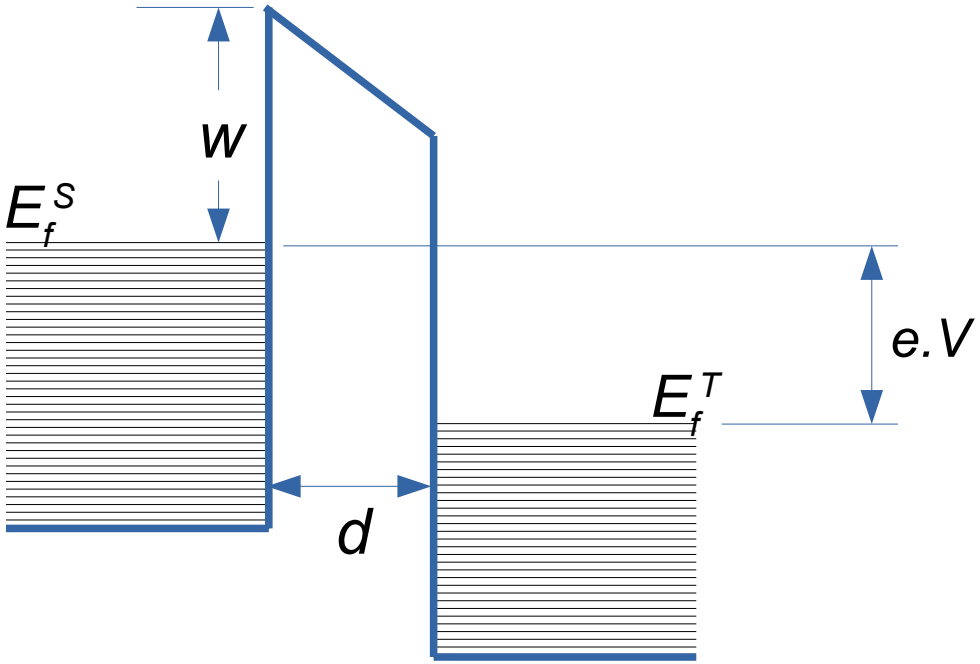
Potencial elétrico diferente

O potencial barreira

Exemplo de dois metais diferentes distantes de uma distância *d:*



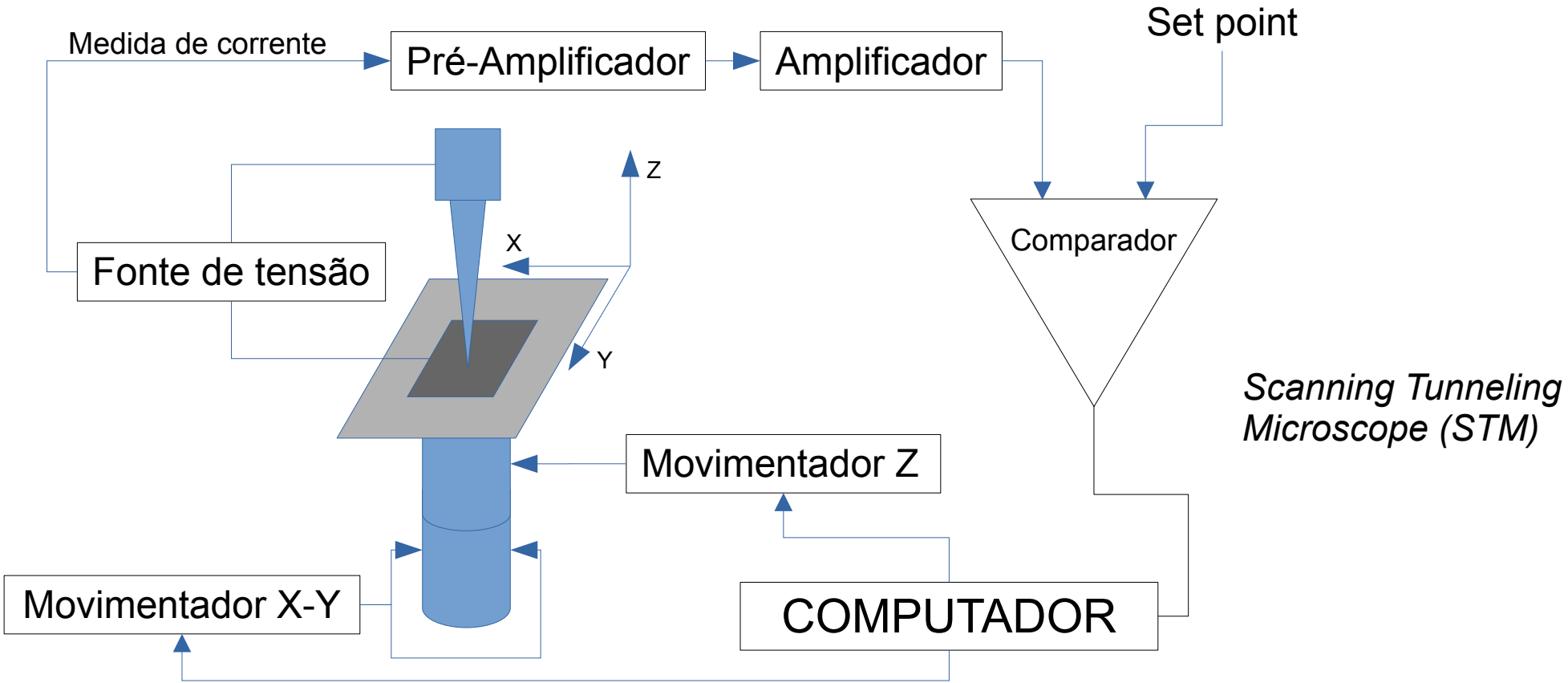
Potencial elétrico igual



Potencial elétrico diferente

O potencial barreira

Princípio de funcionamento de um STM



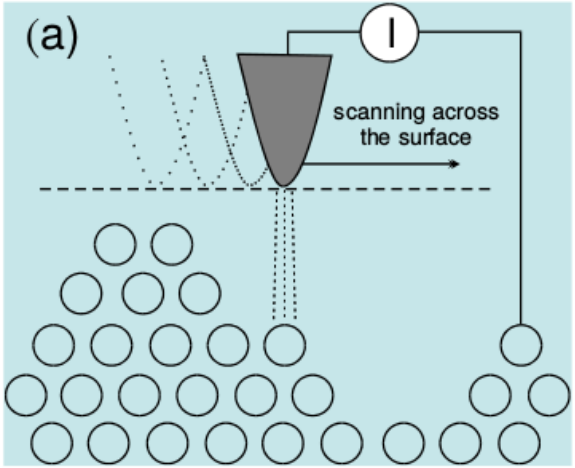
O potencial barreira

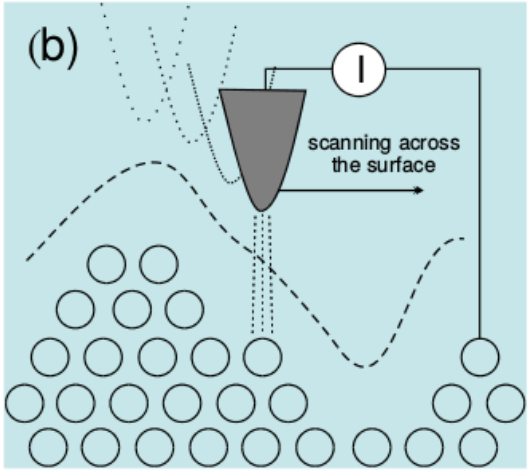
Princípio de funcionamento de um STM

O STM pode operar em dois modos distintos:

<u>Modo de altura constante</u>
Neste caso a corrente de tunelamento é usada para o contraste da imagem e a distância ponta/amostra é mantida fixa

<u>Modo de corrente constante</u>
Neste caso distância ponta/amostra é ajustada para manter a corrente de tunelamento fixa. A variação da distância é usada para o contraste da imagem





O modo de corrente constante é mais rápido, pois não envolve o movimento mecânico no eixo Z. No entanto, só é eficiente para amostras bastante lisas

O potencial barreira

Princípio de funcionamento de um STM

Grafite – amostra padrão para calibração

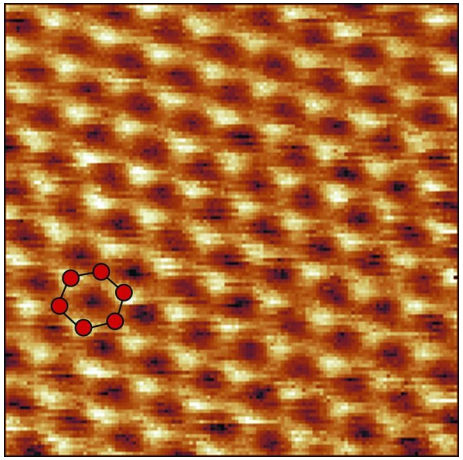
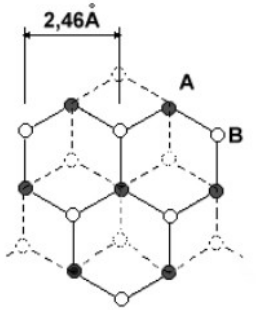
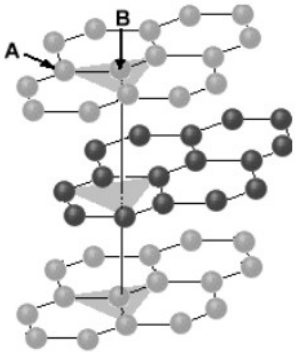
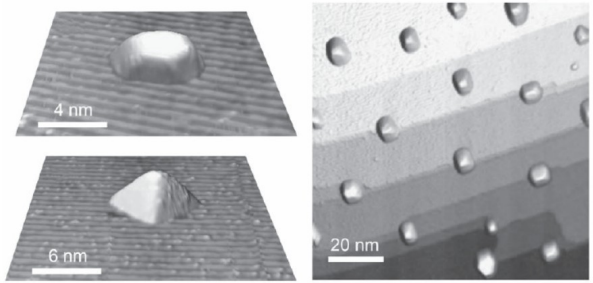


Imagem manipulada







nanopartículas de platina

Heinrich Rohrer
Gerd Binnig
Prêmio nobel de 1986

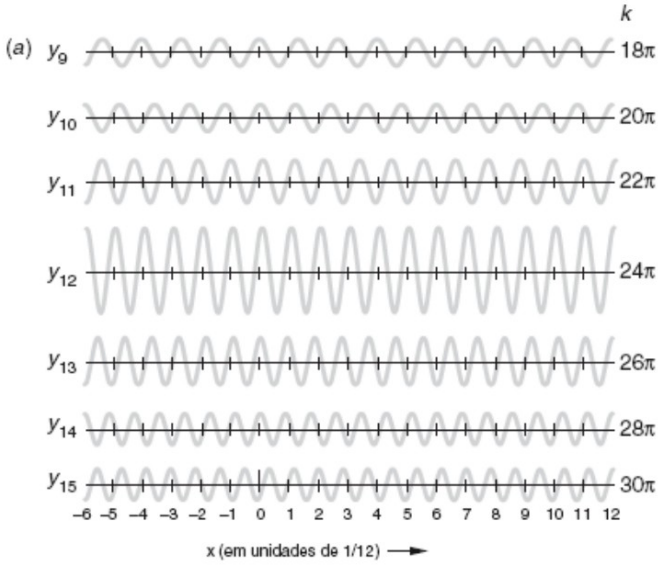
O caso especial da partícula livre

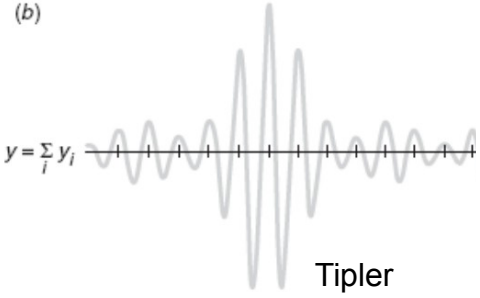
Como representar a partícula livre?

Lembra da última aula, quando vimos que uma partícula livre deve ser representada por uma soma de funções oscilatórias?

$$\boxed{\psi(x) = \sum_n A_n . e^{i(k_n . x)}}$$

Temos que ver como funcionam esses potenciais para esses casos:

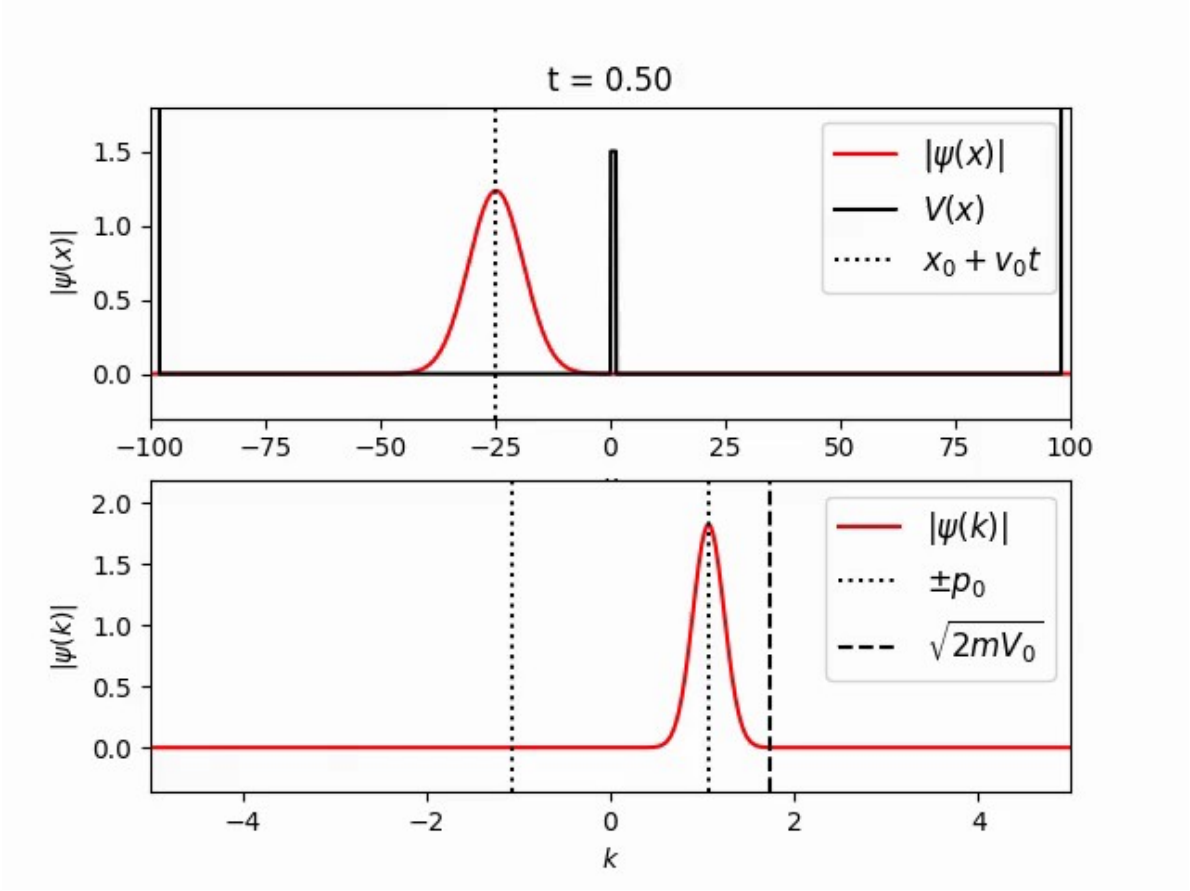




Tipler

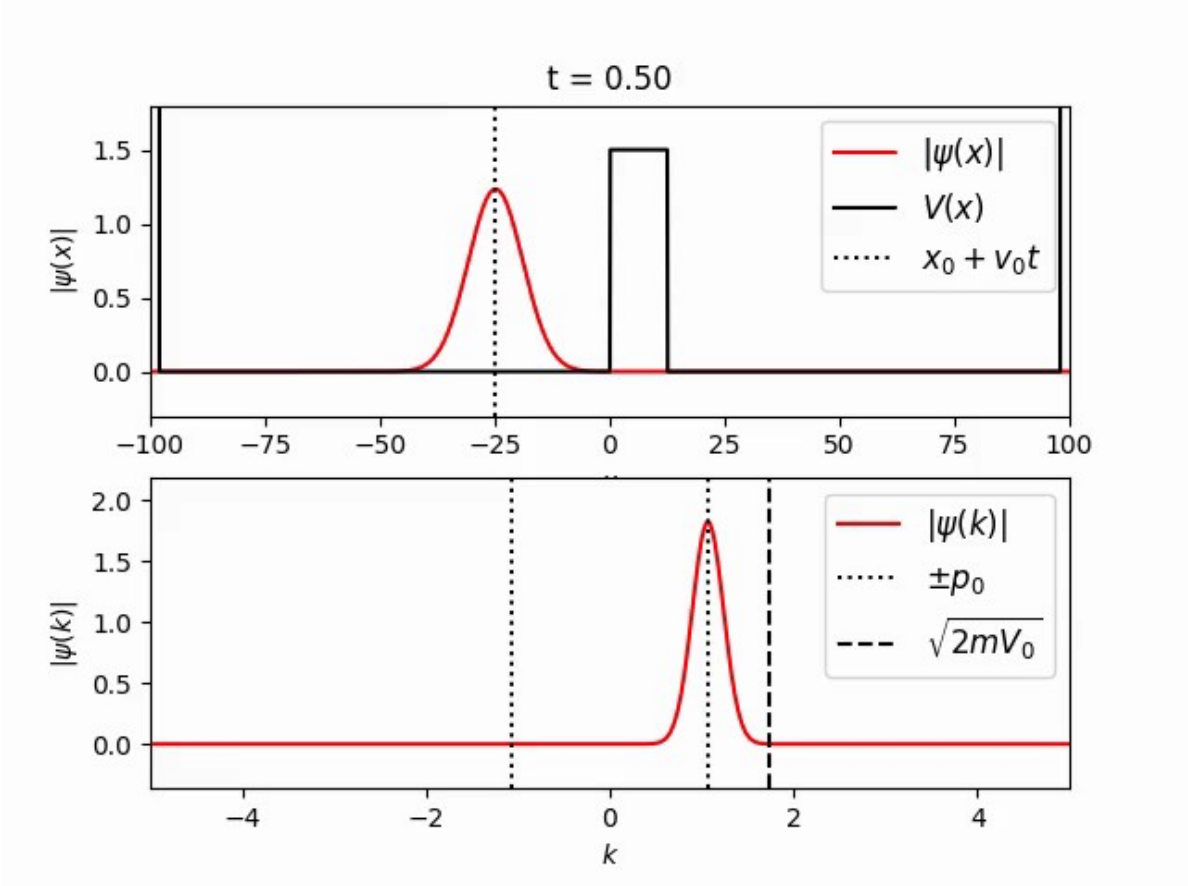
O caso especial da partícula livre

Como representar a partícula livre?



O caso especial da partícula livre

Como representar a partícula livre?



Resumo...

- Nesta aula vimos começamos a ver soluções da equação de Schrödinger
  - Para o potencial degrau, se a energia é maior que o degrau, ocorre reflexão
    (o que não é esperado classicamente)
  - Para o potencial degrau, se a energia é menor que o degrau, existe probabilidade não nula de a partícula penetrar na região proibida classicamente

Resumo...

- Nesta aula vimos começamos a ver soluções da equação de Schrödinger
  - Para o potencial barreira, vimos que existe a probabilidade de que partículas com energia menor que a altura do potencial sejam transmitidas (efeito túnel)
  - O efeito túnel tem aplicações tecnológicas importantes, como o microscópio de tunelamento

Na próxima aula...

- Soluções da equação de Schrödinger, parte 2
  - Soluções da equação de Schrödinger
    - O poço quadrado infinito
    - O poço quadrado finito