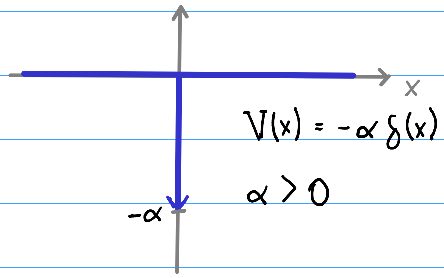
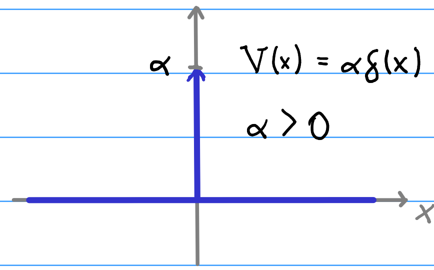
Potenciais com Delta de Dirac

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty, & p/\ x = 0 \\ 0, & p/\ x \neq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x)\, dx = f(0)$$

1. Potencial Delta Único



Espalhamento + Confinamento



Espalhamento

1.1. Caso $V(x) = -\alpha\delta(x)$ e $E < 0$ (Estado Ligado)

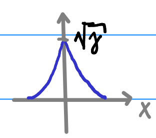
$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{\gamma x} + A'e^{-\gamma x}, & p/\ x \leqslant 0 \\ \psi_2(x) = B'e^{\gamma x} + Be^{-\gamma x}, & p/\ x > 0 \end{cases}$$

$A' = B' = 0 \rightarrow$ Estados Normalizáveis

$A = B \rightarrow$ Continuidade

$A = \sqrt{\gamma} \rightarrow$ Normalização

$$\therefore \boxed{\psi(x) = \sqrt{\gamma}\, e^{-\gamma|x|}}$$



Confinamento $\Rightarrow$ Quantização de Energia, $\therefore$ quais são as energias permitidas?

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi''\, dx - \alpha\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\delta(x)\psi(x)\, dx = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)\, dx \Rightarrow$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right] - \alpha\psi(0) = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)\, dx, \quad \text{fazendo } \epsilon \rightarrow 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left[\lim_{x\to 0^+}\psi'(x) - \lim_{x\to 0^-}\psi'(x)\right]}_{\equiv\, \Delta\psi'(0)} - \alpha\psi(0) = 0 \Rightarrow \boxed{\Delta\psi'(0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)} \quad (*)$$

$$\Delta\psi'(0) = \cancel{\sqrt{\gamma}}(-\gamma - \gamma) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\cancel{\sqrt{\gamma}} \Rightarrow \gamma = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}}$$

Única energia permitida!

02

Vamos verificar o princípio da incerteza de Heisenberg $\left(\Delta x \Delta p \geq \hbar/2\right)$:

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2|\psi|^2 dx = 2\int_{0}^{+\infty} x^2|\psi|^2 dx = 2\gamma\int_{0}^{\infty} x^2 e^{-2\gamma x} dx = 2\gamma\left[\cancelto{0}{x^2\left(-\frac{e^{-2\gamma x}}{2\gamma}\right)\Bigg|_0^{\infty}} + \right.$$

$$\left. - \int_0^{\infty}\left(-\frac{e^{-2\gamma x}}{2\gamma}\right)2x\,dx\right] = 2\int_0^{\infty} x\,e^{-2\gamma x}dx = \cancelto{0}{2x\left(-\frac{e^{-2\gamma x}}{2\gamma}\right)\Bigg|_0^{\infty}} + \frac{1}{\gamma}\cancelto{1/2\gamma}{\int_0^{\infty} e^{-2\gamma x}dx} = \frac{1}{2\gamma^2}$$

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi|^2 dx \overset{\text{paridade de } x|\psi|^2}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \frac{1}{\sqrt{2}\,\gamma}}$$

Para calcular $\langle p^2\rangle$, necessário em Δp, vamos considerar o valor esperado da energia E dada por:

$$E = \underbrace{\frac{\langle p^2\rangle}{2m}}_{\text{Energia Cinética}} \underbrace{- \alpha\langle\delta(x)\rangle}_{\text{Energia Potencial}} = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} - \alpha\int_{-\infty}^{+\infty}\overset{\psi^*\psi}{|\psi|^2}\delta(x)\,dx = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} - \alpha\,\cancelto{\gamma}{|\psi(0)|^2} = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} - \alpha\gamma \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \langle p^2\rangle = 2m\left(\cancelto{-m\alpha^2/2\hbar^2}{E} + \alpha\cancelto{m\alpha^2/\hbar^2}{\gamma}\right) = 2m\left(-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} + \frac{m\alpha^2}{\hbar^2}\right) \Rightarrow \langle p^2\rangle = \left(\frac{m\alpha}{\hbar}\right)^2 = \hbar^2\gamma^2$$

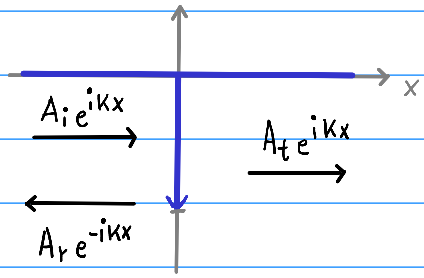
$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\,dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\overset{\text{Função par}}{\psi^*}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx \;;\quad \underbrace{\frac{\partial\psi}{\partial x}}_{\text{Função ímpar}} = \begin{cases}\gamma\sqrt{\gamma}\,e^{\gamma x}, & p/\ x < 0\\ -\gamma\sqrt{\gamma}\,e^{-\gamma x}, & p/\ x > 0\end{cases}$$

$\therefore \langle p\rangle = 0$ pois $\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}$ é uma função ímpar integrada em um intervalo simétrico

$$\boxed{\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \hbar\gamma}\;,\ \text{Logo } \Delta x\Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}\,\gamma}\hbar\gamma = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2} \rightarrow$$

Confirmando o Princípio da Incerteza

1.2. Caso $V(x) = -\alpha\delta(x)$ e $E > 0$ (Estados Espalhados)



$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_i e^{iKx} + A_r e^{-iKx}, & p/\ x \leq 0 \\ \psi_2(x) = A_t e^{iKx}, & p/\ x > 0 \end{cases}$$

$$K \equiv \sqrt{2mE}/\hbar \Rightarrow E = \frac{(\hbar K)^2}{2m}$$ → Pode ser qualquer energia

Podemos cálcular o coeficiente de transmissão:

$$T = \left|\frac{j_T}{j_i}\right| = \left|\frac{(\hbar K/m)\,|A_t|^2}{(\hbar K/m)\,|A_i|^2}\right| = \frac{|A_t|^2}{|A_i|^2}$$

Continuidade em $x=0$: $\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A_i + A_r = A_t$ (1)

Considerando a eq. (*): $\Delta\psi'(0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \Rightarrow \psi_2'(0) - \psi_1'(0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}A_t \Rightarrow$

$$\Rightarrow iK(A_t - A_i + A_r) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}A_t \quad (2)$$

De (1): $A_r = A_t - A_i$, aplicando em (2): $A_t = \left(1 - i\frac{m\alpha}{\hbar^2 K}\right)A_i$, $\beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 K} \Rightarrow$

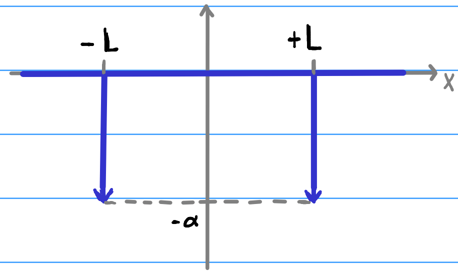
$\Rightarrow \boxed{T = \frac{1}{1+\beta^2}}$, $p/\ \alpha \to \infty \Rightarrow \beta \to \infty \Rightarrow T \to 0$

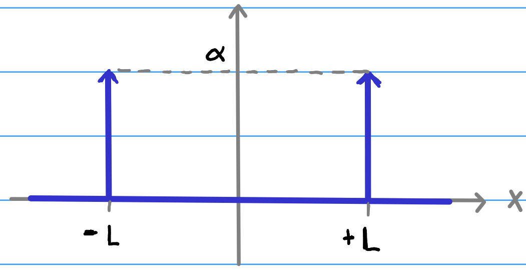
$p/\ E \to \infty \Rightarrow K \to \infty \Rightarrow \beta \to 0 \Rightarrow T \to 1$

1.3. Caso $V(x) = \alpha\delta(x)$ e $E > 0$

Análogo ao caso 1.2 só que fazendo $\alpha \to -\alpha$. Uma partícula incidindo sobre uma barreia infinita (delta positivo) ou uma partículo sendo espalhada por um poço infinito (delta negativo) têm o mesmo coeficiente de transmissão. Porem, as ondas transmitidas possuem fases diferentes.

2. Potencial Delta Duplo Simétrico





$V(x) = -\alpha[\delta(x+L) + \delta(x-L)]$ — Espalhamento + Confinamento

$V(x) = \alpha[\delta(x+L) + \delta(x-L)]$ — Espalhamento

2.1. Caso $V(x) = -\alpha[\delta(x+L) + \delta(x-L)]$ e $E < 0$ (Estados Ligados)

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A' e^{-\gamma x} + A e^{+\gamma x}, & p/\ x < -L \\ \psi_2(x) = B e^{-\gamma x} + B' e^{+\gamma x}, & p/\ |x| \leq L \\ \psi_3(x) = C e^{-\gamma x} + C' e^{+\gamma x}, & p/\ x > L \end{cases}$$

$$\gamma \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar$$

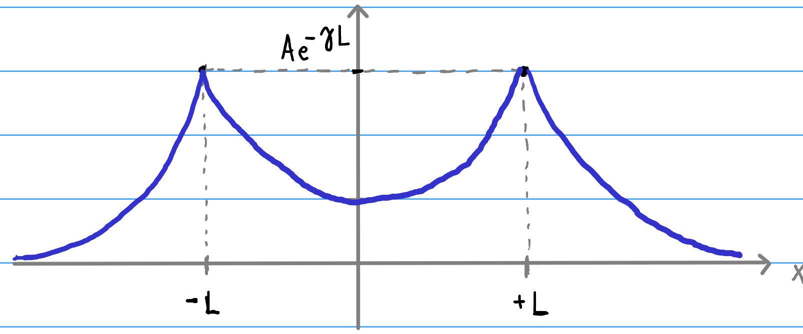
$$E = -\frac{(\hbar\gamma)^2}{2m}$$

Para que ψ seja normalizável: $A' = C' = 0$. Portanto,

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A e^{+\gamma x} & , p/\ x < -L \\ \psi_2(x) = B e^{-\gamma x} + B' e^{+\gamma x} & , p/\ |x| \leq L \\ \psi_3(x) = C e^{-\gamma x} & , p/\ x > L \end{cases}$$

Sendo V uma função par, ψ deve ser par ou ímpar. No caso de ψ par, ou seja, $\psi(-x) = \psi(x)$ temos

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A e^{+\gamma x} & , p/\ x < -L \\ \psi_2(x) = 2B \cosh(\gamma x), & p/\ |x| \leq L \\ \psi_3(x) = A e^{-\gamma x} & , p/\ x > L \end{cases}$$



Continuidade em $x = -L$:

$$\psi_1(-L) = \psi_2(-L) \Rightarrow Ae^{-\gamma L} = 2B\cosh(\gamma L) \Rightarrow B = \frac{e^{-\gamma L}}{2\cosh(\gamma L)} A = \frac{1}{1+e^{2\gamma L}} A \quad (3)$$

$$\therefore \psi_2(x) = \frac{e^{-\gamma L}}{\cosh(\gamma L)} A \cosh(\gamma x)$$ → Descobrindo A, definimos completamente a função de onda

Normalizando: $|\psi_p|^2$ é par

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow 2\int_0^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^L |\psi_2|^2 dx + \int_L^{\infty} |\psi_3|^3 dx = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \int_0^L \frac{e^{-2\gamma L}}{\cosh^2(\gamma L)} |A|^2 \cosh^2(\gamma x)\, dx + \int_L^{\infty} |A|^2 e^{-2\gamma x} dx = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |A|^2 \left\{ \frac{e^{-2\gamma L}}{\cosh^2(\gamma L)} \int_0^L \frac{1}{2}[1+\cosh(2\gamma x)]\, dx - \frac{e^{-2\gamma x}}{2\gamma}\Bigg|_L^{\infty} \right\} = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |A|^2 \left\{ \frac{e^{-2\gamma L}}{\cosh^2(\gamma L)} \frac{1}{2} \left[L + \frac{\sinh(2\gamma x)}{2\gamma}\Bigg|_0^L \right] + \frac{e^{-2\gamma L}}{2\gamma} \right\} = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |A|^2 \left\{ \frac{e^{-2\gamma L}}{\cosh^2(\gamma L)} \frac{1}{2} \left[L + \frac{\sinh(2\gamma L)}{2\gamma} \right] + \frac{e^{-2\gamma L}}{2\gamma} \right\} = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |A|^2 \left\{ \frac{e^{-2\gamma L}}{\cosh^2(\gamma L)} \, \frac{1}{2}\left[L + \frac{\overbrace{\cancel{2}\sinh(\gamma L)\cosh(\gamma L)}^{\sinh(2\gamma L)}}{\cancel{2}\gamma} \right] + \frac{e^{-2\gamma L}}{2\gamma} \right\} = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |A|^2 \frac{e^{-2\gamma L}}{2\gamma} \left\{ \gamma L \,\mathrm{sech}^2(\gamma L) + \tanh(\gamma L) + 1 \right\} = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |A|^2 = \frac{\gamma e^{2\gamma L}}{\gamma L \,\mathrm{sech}^2(\gamma L) + \tanh(\gamma L) + 1} \Rightarrow A = \left[\frac{\gamma e^{2\gamma L}}{\gamma L \,\mathrm{sech}^2(\gamma L) + \tanh(\gamma L) + 1} \right]^{1/2}$$

Com $L \to 0$ (delta único) $\Rightarrow A \to \sqrt{\gamma} \to$ Item 1.1

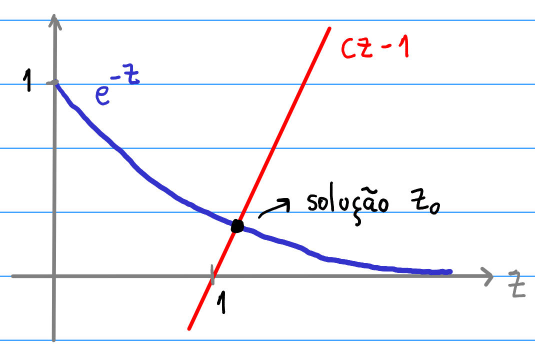
Considerando a eq. $(*)$: $\Delta \psi'(-L) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(-L) \Rightarrow \psi_2'(-L) - \psi_1'(-L) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} A e^{-\gamma L} \Rightarrow$

$$\gamma\left[-2B\sinh(\gamma L) - A e^{-\gamma L}\right] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} A e^{-\gamma L} \Rightarrow \frac{2B}{A} e^{\gamma L}\sinh(\gamma L) + 1 = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 \gamma} \overset{(3)}{\Rightarrow}$$

$$\tanh(\gamma L) + 1 = \frac{2m\alpha}{\hbar^2\gamma} \Rightarrow \frac{e^{\gamma L} - e^{-\gamma L}}{e^{\gamma L} + e^{-\gamma L}} + 1 = \frac{2m\alpha}{\hbar^2\gamma} \Rightarrow \frac{\cancel{2} e^{\gamma L}}{e^{\gamma L} + e^{-\gamma L}} = \frac{\cancel{2} m\alpha}{\hbar^2\gamma} \Rightarrow$$

$$\frac{\hbar^2\gamma}{m\alpha} = 1 + e^{-2\gamma L} \Rightarrow \boxed{e^{-2\gamma L} = \frac{\hbar^2\gamma}{m\alpha} - 1}$$ $\to$ Eq. Transcendental

Defindo $z \equiv 2\gamma L$ e $c = \hbar^2/(2Lm\alpha) \Rightarrow \boxed{e^{-z} = cz - 1}$



Portanto temos, com certeza, uma solução z_0, o qual define um valor único para γ que por sua vez define um valor único para energia.

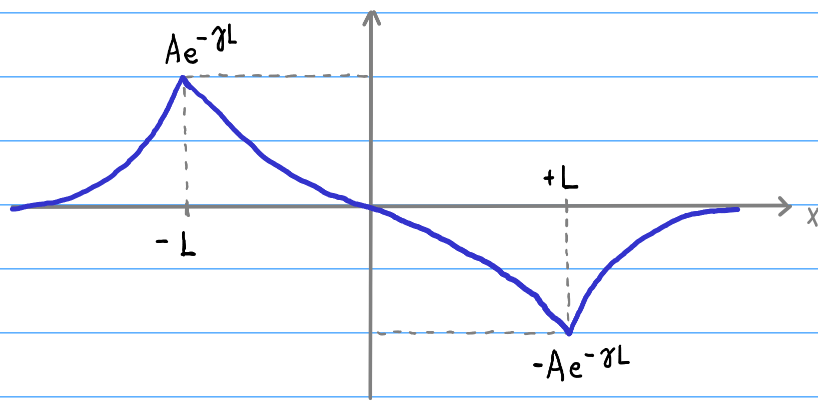
Quantização da Energia!

Caso $L \to 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2\gamma}{m\alpha} - 1 \to 1 \Rightarrow \gamma = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \to$ Caso p/ $V(x) = 2\alpha\delta(x)$

Único Delta

Caso ψ ímpar, ou seja, $\psi(-x) = -\psi(x)$ temos:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A e^{+\gamma x} & , \text{ p/ } x < -L \\ \psi_2(x) = 2B \sinh(\gamma x) & , \text{ p/ } |x| \leq L \\ \psi_3(x) = -A e^{-\gamma x} & , \text{ p/ } x > L \end{cases}$$



Continuidade em $x = -L$: $\psi_1(-L) = \psi_2(-L) \Rightarrow B = \dfrac{e^{-\gamma L}}{2\cosh(\gamma L)} A = \dfrac{1}{1 + e^{2\gamma L}} A$ (4)

$$\therefore \psi_2(x) = \frac{e^{-\gamma L}}{\cosh(\gamma L)} A \sinh(\gamma x)$$ → Definimos A impondo normalização. (Faça como exercício)

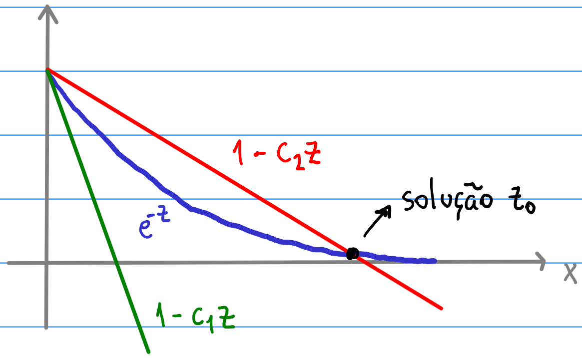
Considerando a eq. (*): $\Delta\psi'(-L) = -\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(-L) \Rightarrow \psi_2'(-L) - \psi_1'(-L) = -\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2} A e^{-\gamma L} \Rightarrow$

$$\gamma \cancel{A}\left[\frac{-\cancel{e^{-\gamma L}}}{\cosh(\gamma L)}\sinh(\gamma L) - A\cancel{e^{-\gamma L}}\right] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\cancel{A}\cancel{e^{-\gamma L}} \Rightarrow \tanh(\gamma L) - 1 = \frac{2m\alpha}{\hbar^2\gamma} \Rightarrow$$

$$\frac{e^{\gamma L} - e^{-\gamma L}}{e^{\gamma L} + e^{-\gamma L}} - 1 = \frac{2m\alpha}{\hbar^2\gamma} \Rightarrow \frac{-\cancel{2}e^{-\gamma L}}{e^{\gamma L} + e^{-\gamma L}} = \frac{\cancel{2}m\alpha}{\hbar^2\gamma} \Rightarrow \frac{\hbar^2\gamma}{m\alpha} = -e^{2\gamma L} - 1 \Rightarrow$$

$\boxed{e^{-2\gamma L} = 1 - \dfrac{\hbar^2\gamma}{m\alpha}}$ Defindo $z \equiv 2\gamma L$ e $c = \hbar^2/(2Lm\alpha) \Rightarrow \boxed{e^{-z} = 1 - cz}$

07



Nesse caso só haverá solução se $c > 0$ que pode ser feito diminuindo L ou α. A solução z_0 define um único valor para γ que por sua vez define um único valor para a energia.

Quantização da Energia!

$$\text{Caso } L \to 0 \Rightarrow 1 - \frac{\hbar^2 \gamma}{m\alpha} \to 1 \Rightarrow \gamma \to 0$$

3. Aplicações

- Termo de Darwin na estrutura fina (não-localidade do elétron);
- Espalhamentos de ondas-s (esfera dura);
- Ion H_2^+ (móleculas diatômicas com um único elétron);