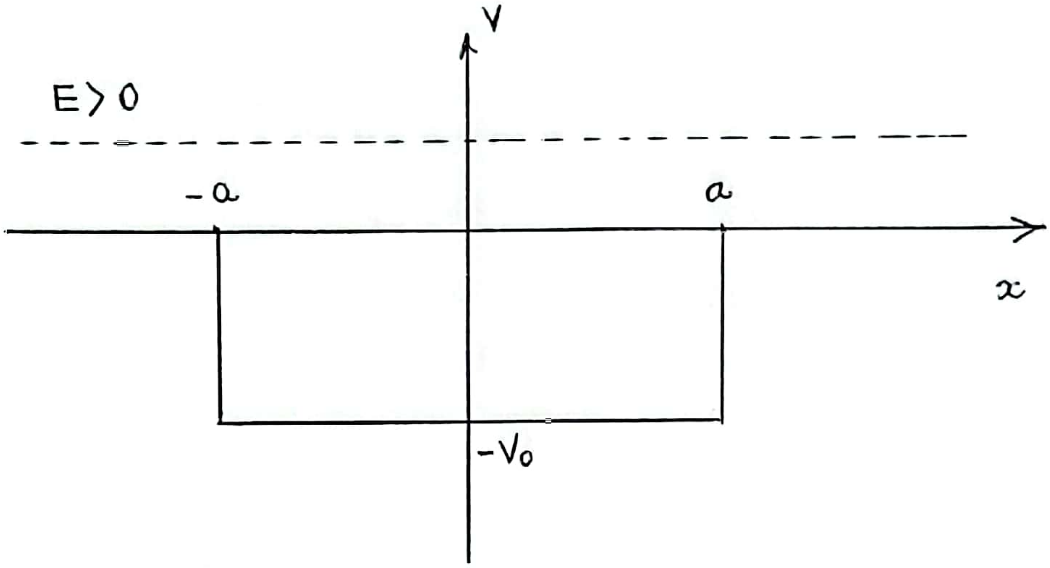
Poço de potencial retangular finito

Caso 2: estados de espalhamento $(E>0)$



O potencial $V(x)$ é o mesmo visto na aula passada, mas agora estamos interessados em estados estacionários $\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ com energia positiva $E>0$.

$\longrightarrow$ Região $x<-a$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi = -k^2\psi \quad , \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$$

solução geral:

$$\psi(x<-a) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Vale a pena lembrar que estamos supondo que a partícula quântica incide no poço de potencial a partir da esquerda, de modo que podemos fazer a seguinte identificação

$$\Psi(x<-a,t) = \underbrace{A e^{i(Kx-\omega t)}}_{\substack{\Psi_I(x,t) \\ \text{onda} \\ \text{incidente}}} + \underbrace{B e^{-i(Kx+\omega t)}}_{\substack{\Psi_R(x,t) \\ \text{onda} \\ \text{refletida}}}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

$\longrightarrow$ Região $x > a$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi = -K^2\psi$$

solução geral:

$$\psi(x>a) = E e^{iKx} + F e^{-iKx}$$

Como não há nenhuma descontinuidade no potencial $V(x)$ para $x > a$, não há também razão física para considerar a contribuição proporcional a F na função $\psi(x)$.

$$F = 0 \implies \psi(x>a) = E e^{iKx}$$

$\longrightarrow$ Região $-a < x < a$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(-V_0 - E)\psi = -\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\psi = -l^2\psi$$

com $l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} > 0$

Solução geral :

$$\psi(-a<x<a) = C\sin(lx) + D\cos(lx)$$

Portanto, podemos escrever

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{iKx} + Be^{-iKx} & , x \leqslant -a \\ C\sin(lx) + D\cos(lx) & , -a \leqslant x \leqslant a \\ Ee^{iKx} & , x \geqslant a \end{cases}$$

$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} iKAe^{iKx} - iKBe^{-iKx} & , x \leqslant -a \\ lC\cos(lx) - lD\sin(lx) & , -a \leqslant x \leqslant a \\ iKEe^{iKx} & , x \geqslant a \end{cases}$$

A continuidade de ψ e $\frac{d\psi}{dx}$ em $x=-a$ implica que

$$A e^{-iKa} + B e^{iKa} = -C \sin(la) + D\cos(la) \qquad (I)$$

$$iK\left(A e^{-iKa} - B e^{iKa}\right) = l\left[C\cos(la) + D\sin(la)\right] \qquad (II)$$

Já em $x=a$:

$$C\sin(la) + D\cos(la) = E e^{iKa} \qquad (III)$$

$$l\left[C\cos(la) - D\sin(la)\right] = iKE e^{iKa} \qquad (IV)$$

Temos então um conjunto de 4 equações e 5 coeficientes a serem determinados. Podemos, por exemplo, usar (III) e (IV) para determinar C e D em termos de E.

$$\left[\sin^2(la) + \cos^2(la)\right] C = \left[\sin(la) + i\frac{K}{l}\cos(la)\right] E e^{iKa}$$

Portanto

$$C = \left[\sin(la) + i\frac{K}{l}\cos(la)\right] E e^{iKa}$$

e

$$D = \left[\cos(la) - i\frac{K}{l}\sin(la)\right] E e^{iKa}$$

Substituindo C e D em (I) e (II), temos

$$A e^{-iKa} + B e^{iKa} = -\left[\sin^2(la) + i\frac{K}{l}\sin(la)\cos(la)\right] E e^{iKa}$$

$$+\left[\cos^2(la) - i\frac{K}{l}\sin(la)\cos(la)\right] E e^{iKa}$$

$$A e^{-iKa} + B e^{iKa} = \left[\cos(2la) - i\frac{K}{l}\sin(2la)\right] E e^{iKa} \quad (V)$$

Por outro lado

$$A e^{-iKa} - B e^{iKa} = -i\frac{l}{K}\left[\sin(la)\cos(la) + i\frac{K}{l}\cos^2(la)\right] E e^{iKa}$$

$$-i\frac{l}{K}\left[\sin(la)\cos(la) - i\frac{K}{l}\sin^2(la)\right] E e^{iKa}$$

$$A e^{-iKa} - B e^{iKa} = \left[\cos(2la) - i\frac{l}{K}\sin(2la)\right] E e^{iKa} \quad (VI)$$

(V) - (VI):

$$2B e^{iKa} = -i\left(\frac{K}{l} - \frac{l}{K}\right)\sin(2la)\, E e^{iKa}$$

$$B = i\left(\frac{l^2 - K^2}{2lK}\right)\sin(2la)\, E$$

Substituindo B em (V), temos

$$A e^{-iKa} + i\left(\frac{l^2 - K^2}{2lK}\right)\sin(2la)\, E\, e^{iKa}$$

$$= \left[\cos(2la) - i\,\frac{K}{l}\sin(2la)\right] E\, e^{iKa}$$

Ou seja

$$\left[\cos(2la) - i\left(\frac{l^2 - K^2}{2lK} + \frac{K}{l}\right)\sin(2la)\right] E\, e^{iKa} = A e^{-iKa}$$

$$\left[\cos(2la) - i\left(\frac{l^2 + K^2}{2Kl}\right)\sin(2la)\right] E = A\, e^{-2iKa}$$

De forma que temos finalmente

$$E = \frac{e^{-i2Ka}}{\cos(2la) - i\left(\frac{K^2 + l^2}{2Kl}\right)\sin(2la)}\, A$$

Portanto, quatro (4) dos coeficientes puderam ser escritos em termos de A. Estamos particularmente interessados nos coeficientes de reflexão e transmissão

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = 1 - R$$

Calculemos então o coeficiente de transmissão T

$$T^{-1} = \frac{|A|^2}{|E|^2} = \left| \cos(2la) - i\left(\frac{K^2+l^2}{2Kl}\right)\sin(2la)\right|^2$$

$$= \cos^2(2la) + \left(\frac{K^2+l^2}{2Kl}\right)^2 \sin^2(2la)$$

$$= 1 + \left[\left(\frac{K^2+l^2}{2Kl}\right)^2 - 1\right]\sin^2(2la)$$

com

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad e \quad l^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$$

$$\left(\frac{K^2+l^2}{2Kl}\right)^2 - 1 = \frac{K^4 + l^4 + 2K^2l^2 - 4K^2l^2}{4K^2l^2} = \left(\frac{K^2-l^2}{2Kl}\right)^2$$

$$K^2 - l^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$4K^2l^2 = 4\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0) = \frac{16m^2E(E+V_0)}{\hbar^4}$$

Portanto

$$\frac{(K^2-l^2)^2}{4K^2l^2} = \frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4}\,\frac{\hbar^4}{16m^2E(E+V_0)} = \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)}$$

Dessa forma, podemos escrever para o coeficiente de transmissão dos estados de espalhamento de um poço de potencial de profundidade V_0 e largura $2a$

$$\boxed{T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2\left[2\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}\right]}$$

Perceba que $T=1$ sempre que

$$\sin\left[\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}\right] = 0,$$

ou seja, quando

$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)} = n\pi \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\frac{(2a)^2}{\hbar^2} 2m(E+V_0) = n^2\pi^2$$

$$\boxed{E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{(2a)^2}} \quad \left(T=1 \text{ estado de espalhamento}\right)$$

que nada mais são do que as energias dos estados estacionários ligados de um poço de profundidade infinita cujo fundo está localizado em $-V_0$.

Outra forma de interpretar as energias discretas E_n para as quais $T = 1$ $(R = 0)$ é que elas correspondem às energias totais (potencial + cinética) de uma partícula quântica cujo comprimento de onda de de Broglie λ é tal que

$$2a = n\frac{\lambda}{2} \quad , n = 1, 2, 3, \cdots ,$$

ou seja, a largura do poço $2a$ acomoda exatamente um número inteiro de meios comprimentos de onda. A energia cinética de tais partículas é (no interior do poço):

$$K_n = E_n - (-V_0) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{(2a)^2} = \frac{p^2}{2m}$$

Por outro lado, usando a relação entre $2a$ e λ

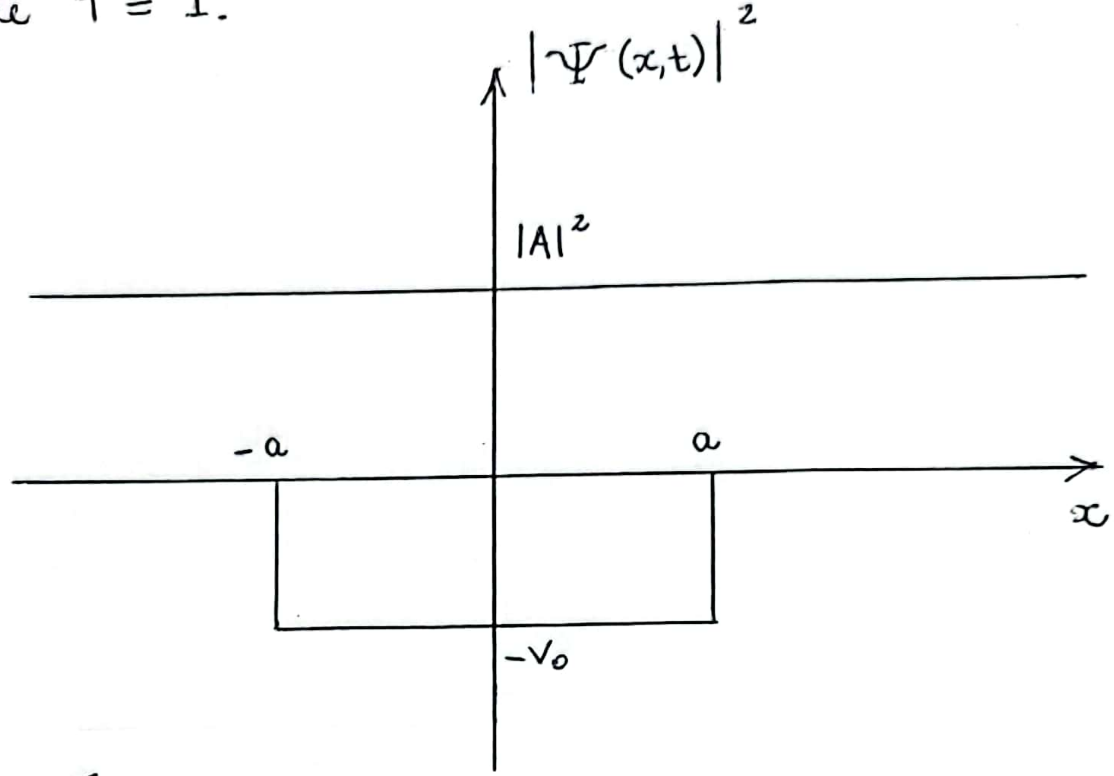
$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{4a/n} = n\frac{h}{4a}.$$

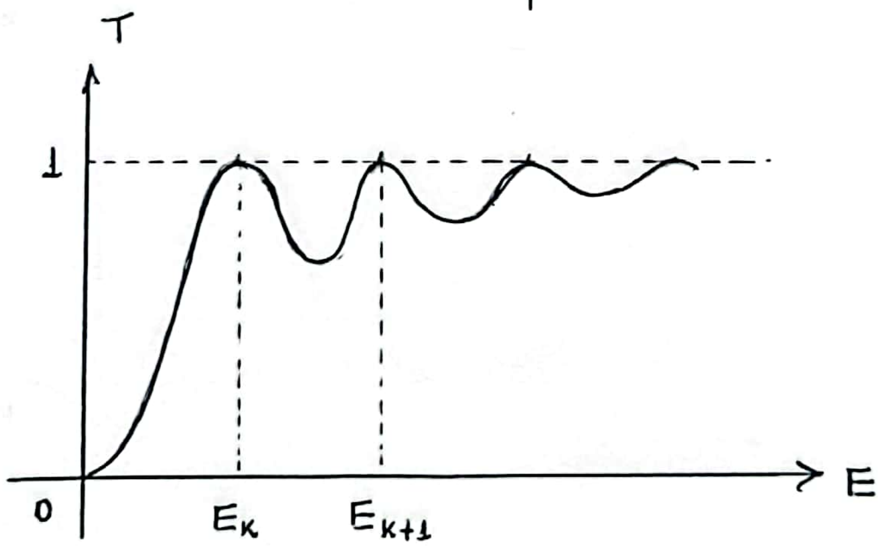
Logo

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2h^2}{16a^2}\frac{1}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{(2a)^2}$$

(10)

A figura a seguir ilustra a densidade de probabilidade $|\Psi(x,t)|^2$ na região do poço para os estados tais que $T = 1$.





Para um dado K natural, as energias E_n $(n \geqslant K)$ são todas positivas.