

4.7 - Equação de Schrödinger

Forma geral das ondas progressivas sobre eixo x:
 ↳ cap. 16

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}} \quad (4.18)$$

v = veloc. de onda

$\psi \rightarrow \psi(x,t)$ no lugar de y por ser onda de de Broglie

agii!
 \Rightarrow Sistema c/ $E = cte = \underline{\text{dígido}}$

$$\boxed{\psi(x,t) = \psi(x) \cos(\omega t)}$$

podemos fazer!
 ↳ (4.19)

expressão análoga à onda mecânica onde onde $\boxed{y(x,t) = y(x) \cos \omega t}$

(4.19) ~ (4.18) $\Rightarrow \cos(\omega t) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = - \left(\frac{\omega^2}{v^2} \right) \psi \cos \omega t$

ou $\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = - \left(\frac{\omega^2}{v^2} \right) \psi}$ (4.20)

com: $\omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{v}{\lambda}$ e $p = \frac{h}{\lambda}$ de de Broglie

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \left(\frac{2\pi\nu}{\lambda} \right)^2 = \frac{4\pi^2}{h^2} p^2 = \frac{p^2}{\hbar^2}$$

temos também que: $E = E_c + U = \frac{p^2}{2m} + U$

$\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} | p^2 = 2m (E - U)$

e $\left| \frac{\omega^2}{v^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \right.$

Subst. a 41.20 tem:

$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = - \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi$ (41.21)

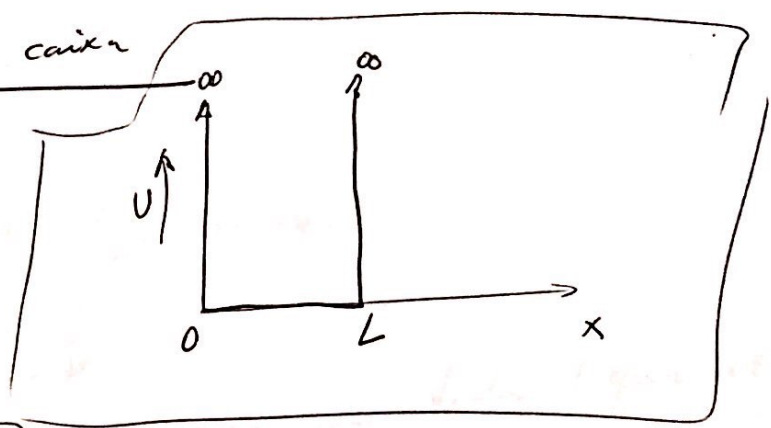
↳ equação de Schrödinger independente do tempo
 P/S particular obrigada a não variar dependente
 se mover sobre o eixo x

Obs: ψ é função e argumento de sua variabilidade!

- ψ(x) f → deve ser: contínua em todas as regiões do espaço
- normalizada ⇒ ψ(x) → 0 p/ x → ±∞
 - - unívoca
 - - dψ/dx também deve ser contínua p/ valores finitos de V(x).

ex: A partícula numa caixa

fig. 41.16



$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x=0 \\ \infty & \text{for } x=L \\ 0 & \text{for } 0 < x < L \end{cases}$$

eq. Sch:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi \quad \text{for } 0 < x < L$$

for $0 < x < L$

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

(41.22)

A partícula \Rightarrow pode estar fora da caixa $\therefore \psi(x) = 0$ for $x > L$ or $x < 0$

A solução da eq. 41.22 que satisfaz as condições de contorno

$$\psi(x) = 0 \quad \text{for } \begin{cases} x=0 \\ x=L \end{cases}$$

$$\psi(x) = A \sin kx \quad \text{for } (41.23)$$

$$\psi(0) = A \sin 0 = 0 \rightarrow ok!$$

$$\psi(L) = A \sin kL = 0 \Rightarrow kL = n\pi \quad n = \text{inteiro}$$

com $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

$$kL = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi$$

$$kL = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} L = n\pi$$

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) n^2 \quad \rightarrow (41.24)$$

→ sãs as energias permitidas (quantizadas!!)

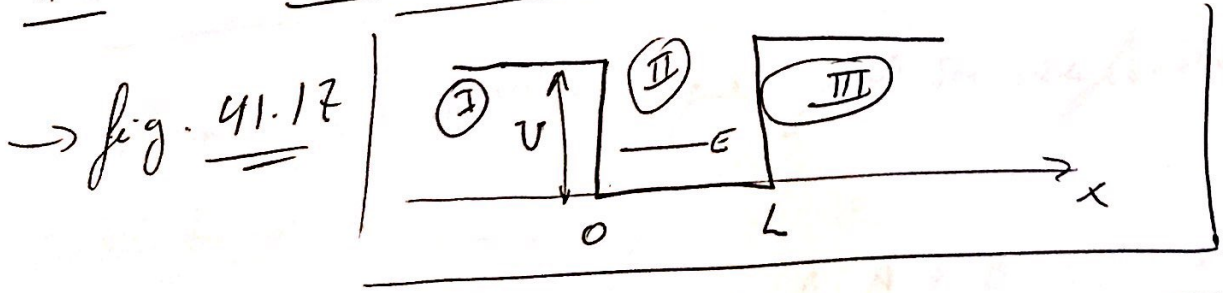
Da mesma forma, as funçõs de onda permitidas sãs dadas

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad \rightarrow (41.25)$$

Mostre que $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

→ talvez colocar transparesãncia da seq 41.6 e comendar anãlise cl/ ondas estacionãrias num cordã.

41.8 ^{21ª aula de Física IV - Pãis 2000} - Particula num poço de altura finita



regiã classicamente permitida p/ $E < U$ e $|0 < x < L|$.

Porã mecãnica quãntica hã \downarrow probabilidade finita da particula ser encontrada fora desta regiã $\Rightarrow \psi(x) \neq 0$ p/ regiões I e III e tambã $\psi \neq 0$.

Na região (I) , $V=0$ as funções de onda permitidas (121)
 são também senoidais pois são soluções de (41.22). Porém as
 c.c. não mais exigem que ψ seja nula nas paredes, como
 era o caso de as paredes infinitas.

Nas regiões (II) e (III) a eq. de Sch. pode ser escrita:

$$\left| \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(V-E)}{\hbar^2} \psi \right. \quad (41.26)$$

Note que $\boxed{V-E > 0}$ pois sabemos $\underline{V > E}$.

fazendo: $\boxed{C^2 = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$ temos:
 \rightarrow = cte positiva em (I) e (III)

$$\left| \frac{d^2\psi}{dx^2} = C^2 \psi \right. \quad (41.27)$$

A solução geral de 41.27 que pode ser verificada por simples
 substituições é:

$$\left| \psi = Ae^{Cx} + Be^{-Cx} \right. \quad \text{onde } \underline{A \text{ e } B \text{ s\~{a}o ctes}}$$

pt que a função permeável seja finita temos que temos:

$$\left| B=0 \text{ na região } (I) \right. \quad \text{e } \left| A=0 \right. \text{ na região } (III)$$

$x < 0$ $x > L$

Soluções:

$$\begin{cases} \psi_I = A e^{cx} & p/x < 0 \\ \psi_{III} = B e^{-cx} & p/x > L \end{cases}$$

Na região (II) a função de onda é senoidal c/a forma geral:

$$\psi_{II}(x) = F \sin(kx) + G \cos(kx)$$

F, G = const

→ fig. (41.18)

p/ ter a função de onda completa exigimos que:

$$\begin{cases} \psi_I = \psi_{II} \\ \frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \end{cases} \text{ em } x=0$$

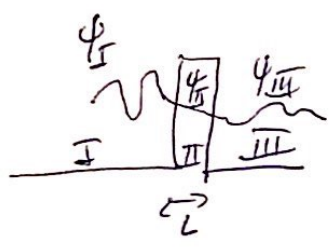
e também que:

$$\begin{cases} \psi_{II} = \psi_{III} \\ \frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx} \end{cases} \text{ em } x=L$$

→ note pela fig. (41.18) que $|\psi|^2$ e ψ não se anulam nas paredes do poço.

Tunelamento através de 1 barreira

→ fig. 41.59 → concorda figura



- regiões II e III = classicamente proibidas
 = quanticamente permitidas
 $|\psi_{III}|^2 \neq 0 \Rightarrow$ tunelamento ou penetração de barreira

Obs: a partícula nunca pode ser observada no interior da barreira pois isto viola a conservação de energia mas pode tunelar através e ser observada na região III.

Probabilidade de tunelamento pode ser descrita por coeficiente de

transmissão T e coef. de reflexão R .
 \downarrow
 probab. da partícula alcançar o outro lado da barreira
 \downarrow
 probab. da partícula ser refletida pela barreira.

$$T + R = 1$$

P/ $T \ll 1$ (barreira muito alta ou muito larga) : $T \approx e^{-KL}$ (41.28)

onde $K = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$ (41.29)

Aplicações dos túneis

1 - Diódo túnel → semicondutor c/ 2 regiões c/ cargas opostas separadas p/ região muito delgada de neutro. corrente se deve ao túnelamento de e^- através da região neutra e pode ser controlada pela voltagem de polarização que altera a altura da barreira

2 - Junção Josephson - 2 supercondutores separados p/ camada delgada de isolante.

3 - Decaimento alfa - P/ escapar do núcleo, a partícula (núcleo de He) deve penetrar a barreira provocada p/ combinação entre a força nuclear atrativa e a repulsão coulombiana entre a partícula e a parte remanescente do núcleo.

4 - Microscopia de varredura por túneis - STM - aproveita o túnelamento p/ criar imagens de superfícies c/ resolução comparável ao tamanho de átomos.