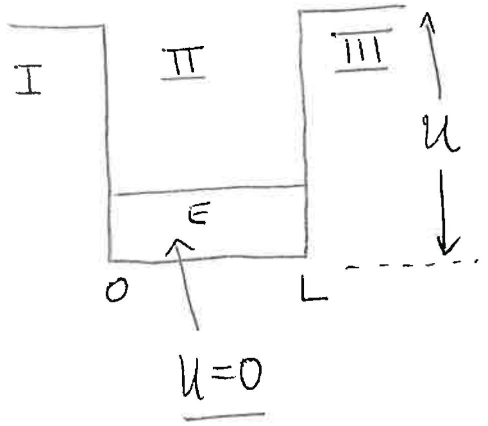
20ª AULA

(1)

* Partícula num poço de altura finita



$\boxed{U>E}$

Equação de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi \Rightarrow$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(U-E)}_{>0 \text{ (regiões I e III)}}\psi$$

ψ não é mais nula nas paredes

região II : idêntico ao caso anterior

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = c^2\psi$$

Solução geral:

$$\psi = Ae^{cx} + Be^{-cx} \quad (A \text{ e } B \text{ constantes})$$

$x<0$ (região I): Be^{-cx} deve ser excluída

$x>L$ (região III): Ae^{cx} deve ser excluída

$$\left.\begin{aligned} \psi_I &= Ae^{cx} \text{ para } x<0 \\ \psi_{III} &= Be^{-cx} \text{ para } x>L \end{aligned}\right\} \text{decaem exponencialmente c/ a distância}$$

$\psi_{II} = F\,\text{sen}(kx) + G\cos(kx)$ (F e G = ctes)

Figura 1

Condições de contorno: em $x=0 \Rightarrow \psi_I = \psi_{II}$ e $\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx}$

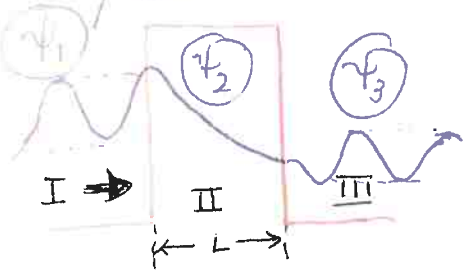
em $x=L \Rightarrow \psi_{II} = \psi_{III}$ e $\frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx}$

* As funções de onde se acoplam suavemente nas fronteiras do poço.

* As funções de onda não se anulam nas paredes do poço de potencial $\Rightarrow |\psi|_0^2 \neq 0$ e $|\psi|_L^2 \neq 0 \Rightarrow$ aumento do comprimento de onda de de Broglie na região II $\Rightarrow$ abaixa a energia e o momento da partícula (E e $P \propto 1/\lambda$) E e P menores

Tunelamento através de uma barreira

Fenômeno interessante → regiões que classicamente seriam inacessíveis à partícula, quanticamente a partícula pode ter acesso a essas regiões. Do ponto de vista clássico a partícula se reflete na barreira. Do ponto de vista quântico ela "tunela" através da barreira.



A amplitude da onda de matéria associada à partícula é diferente de zero em todos os pontos.

* A partícula nunca pode ser observada no interior da barreira (pois viola a conservação de energia) ela pode "tunelar" através dessa região e ser vista na região III.

* Como isso ocorre? ⇒ A onda de de Broglie associada à partícula pode penetrar a barreira (onda - partícula)

* Probabilidade de tunelamento

T = coeficiente de transmissão (mede a probabilidade da partícula alcançar a região III)

R = coeficiente de reflexão (mede a probabilidade da partícula permanecer na região I)

$$T + R = 1$$

$T \ll 1$ (barreira muito alta ou muito larga)

$$\boxed{T \simeq e^{-2KL}}$$

Onde $\mathbb{K} = \dfrac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$

$$\begin{cases} \psi_I = \psi_{II} \quad x=0 \quad \dfrac{d\psi_I}{dx} = \dfrac{d\psi_{II}}{dx} \\ \psi_{II} = \psi_{III} \quad x=L \quad \dfrac{d\psi_{II}}{dx} = \dfrac{d\psi_{III}}{dx} \end{cases}$$

③

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = +\frac{2m}{\hbar^2}(U-E)\psi = +K^2\psi \Rightarrow K = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$$

Exemplo: Elétron 30 eV, barreira 40 eV

Qual é a probabilidade do elétron tunelar.

a) $L = 1\,nm = \underbrace{1\times10^{-9}\,m}_{10\,\text{Å}}$ e b) $L = 0{,}1\,nm = 1\,\text{Å}$

$U - E = 10\,eV = 1{,}6\times10^{-18}\,J$

a) $\underbrace{L = 1\,nm}_{10\,\text{Å}} \Rightarrow 2(K)L = 2\left(\dfrac{\sqrt{2\times9{,}11\times10^{-31}\times1{,}6\times10^{-18}}}{1{,}054\times10^{-34}}\right)\times1\times10^{-9} = 32{,}4$

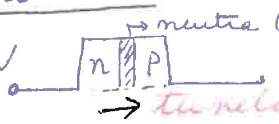
$2m(U-E)$ $\quad \hbar$

$T \approx e^{-2KL} = 8{,}49\times10^{-15} \Rightarrow (1 \text{ em } 10^{14})$

b) $L = \underbrace{0{,}1\,nm}_{1\,\text{Å}} \Rightarrow 2KL = 3{,}24 \Rightarrow T \approx e^{-2KL} = 0{,}0392 \Rightarrow \sim(4\%)$

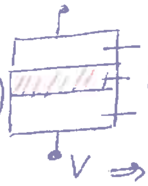
Aplicações: * diodo túnel (mude a voltagem → muda a largura da barreira)

→ neutra (fina)



→ tunela

* junção Josephson (1-2 nm)



superconductor
isolante
supercondutor

V ⇒ oscilações na corrente $f = \dfrac{2eV}{h}$

sem E e B há corrente
e-s deslocam-se aos pares

A corrente é proporcional a sen ϕ, ϕ = diferença de fase entre as funções de onda nos dois supercondutores.

* decaimento α (núcleo de átomo de He ≡ 2p2n). A partícula α escapa do núcleo ⇒ tunela através de uma barreira ⇒ atração nuclear repulsão coulombiana
desintegração radiativa.

* microscopia de varredura por tunelamento. (STM)

(distâncias à superfície na ordem de tamanho de 1 único átomo (Tunelamento fixo)

Oscilador Harmônico (Vibrações moleculares FTIR)

Força restauradora: $F = -kx$ ($x=0 \Rightarrow$ equilíbrio)

$$U = \frac{1}{2}kx^2 \Rightarrow U = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \text{ pois } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$E = K + U = \frac{1}{2}kA^2 = \frac{1}{2}m\omega^2A^2 \text{ (amplitude máxima)}$$

Clássico: Qualquer valor de E é permitido e se a partícula estiver em repouso em $x=0$, $E=0$.

Quântico:
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}_{U}\right]\psi = -\left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2x^2\right]\psi$$

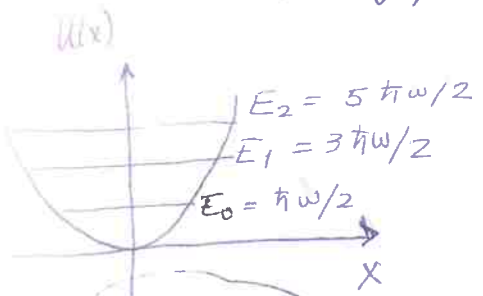
Solução: $\psi = Be^{-Cx^2}$ com $C = \dfrac{m\omega}{2\hbar}$ e $E = \dfrac{\hbar\omega}{2}$

estado fundamental do sistema (mínima energia)

$$\psi = Be^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Estados excitados: $\psi \sim e^{-Cx^2} * $ (polinômio em x)

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \text{ com } n = 0, 1, 2, \ldots$$



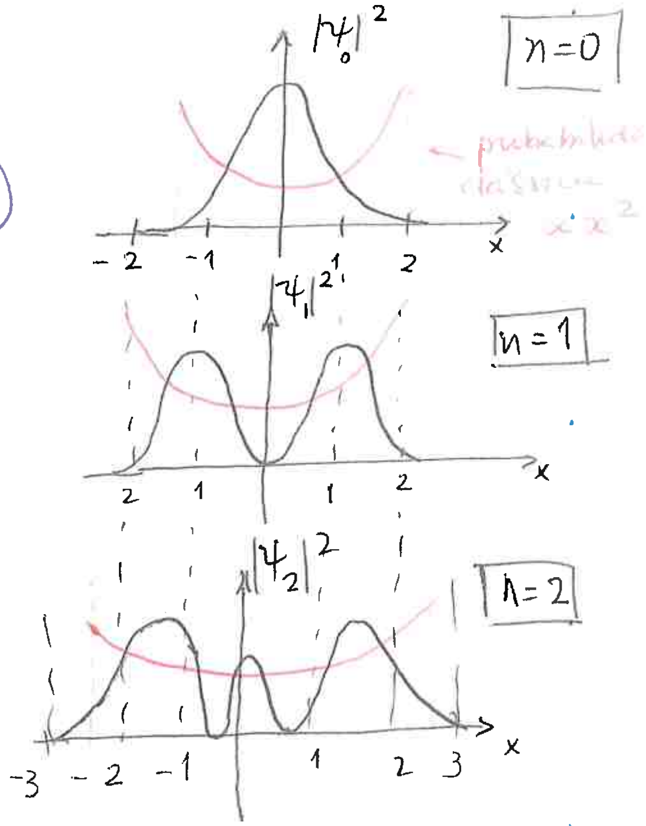
$$\Delta E = \hbar\omega$$

série de níveis igualmente espaçados

(vibrações moleculares)

$\hbar\omega = \frac{h}{2\pi}\omega = hf \Rightarrow$ Justificativa

(hipótese de Planck 25 anos antes da proposta da Eq. de Schrödinger)



Densidade de probabilidade de alguns estados

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2\right]\psi$$

$$\psi = Be^{-cx^2} \qquad \frac{d\psi}{dx} = B.(-2cx)e^{-cx^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = B(-2C)e^{-cx^2} + (B.2Cx)(2Cx)e^{-cx^2}$$

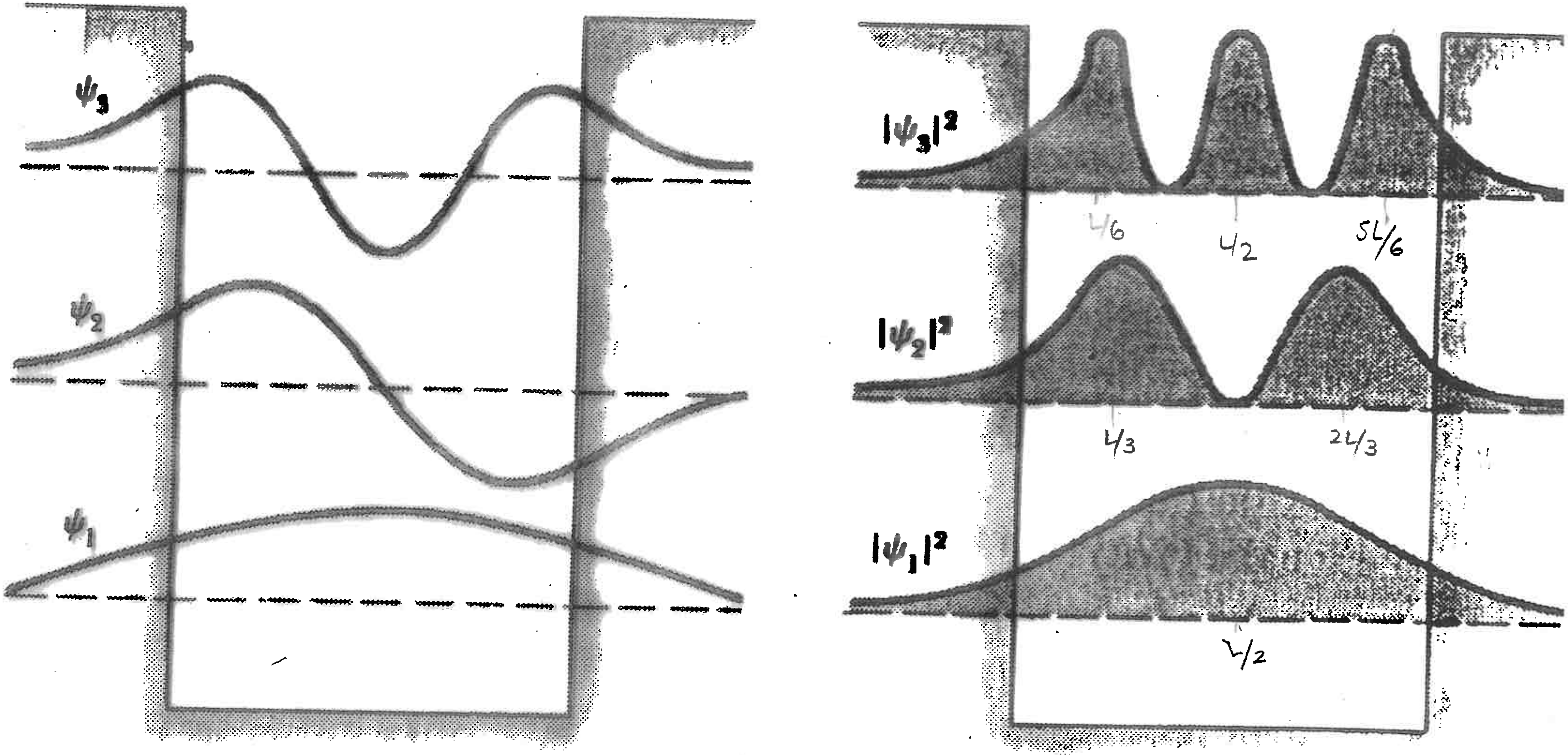
$$\left[-2BC + 4BC^2x^2\right]e^{-cx^2} = -\left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2\right]Be^{-cx^2}$$

$$\cancel{Be^{-cx^2}}\left[4C^2x^2 - 2C\right] = -\left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2\right]\cancel{Be^{-cx^2}}$$

$$4c^2x^2 - 2C = -\frac{2mE}{\hbar^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 x^2$$

$$x = 0 \Rightarrow \frac{\cancel{2}mE}{\hbar^2} = \cancel{2}C \Rightarrow E = \frac{C\hbar^2}{m}$$

$$C = \frac{m\omega}{2\hbar} \Rightarrow \boxed{E = \frac{\cancel{m}\omega}{2\cancel{\hbar}}\frac{\hbar^{\cancel{2}}}{\cancel{m}} = \frac{\hbar\omega}{2}}$$



(a)

(b)

Figura 1