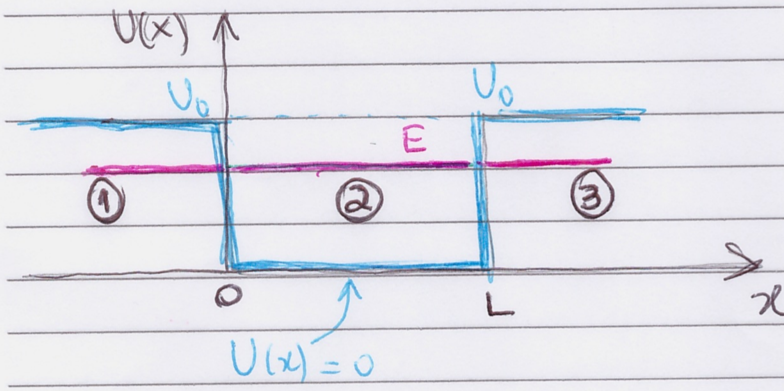
Exemplos: $\boxed{\text{soluções da Eq. de Schrödinger}}$ (1 dimensão espacial)

Vimos no Exemplo 1 o caso do "poço infinito" = "partícula na caixa"

O que ocorre se a "altura" do poço de potencial (1D) for finita?

Exemplo 2: "Poço finito"

Considere uma partícula "dentro" do poço finito U_0. A partícula possui energia total $E < U_0$.

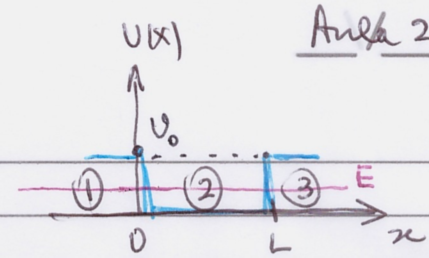


$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

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

onde:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & x \leqslant 0 \quad ① \\ 0 & 0 < x < L \quad ② \\ U_0 & x \geqslant L \quad ③ \end{cases}$$



Nas regiões ① e ③:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m\overbrace{(E-U_0)}^{<0}}{\hbar^2}\cdot\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = +\underbrace{\frac{2m\,(U_0-E)}{\hbar^2}}_{\equiv\, \mathbb{C}^2}\cdot\psi \quad\Rightarrow\quad \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = \mathbb{C}^2\psi}$$

Esta equação admite soluções do tipo:

$$\psi_{①,③}(x) = A_{①,③}\,e^{\mathbb{C}x} + B_{①,③}\,e^{-\mathbb{C}x}$$

$$\boxed{\mathbb{C} = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}}$$

- As constantes $A_①, A_③, B_①, B_③$ devem ser determinadas pelas condições de contorno e por continuidade da função $\psi(x)$ e de sua derivada $\psi'(x)$.

- Note também que $\psi(x)$ deve ser finita em todo espaço.

$$\Rightarrow \begin{cases} \psi_①(x) = A_①\,e^{\mathbb{C}x} \Rightarrow \psi'_① = A_①\mathbb{C}\,e^{\mathbb{C}x} \quad (\to 0 \text{ para } x \to -\infty) \\ \psi_③(x) = B_③\,e^{-\mathbb{C}x} \Rightarrow \psi'_③ = B_③(-\mathbb{C})\,e^{-\mathbb{C}x} \quad (\to 0 \text{ para } x \to +\infty) \end{cases}$$

Ou seja: $B_① = 0$ e $A_③ = 0$ $\Leftrightarrow$ $\psi_①$ e $\psi_③$ FINITAS

Simplificando a notação:

$$\begin{cases} \psi_{①}(x) = A e^{Cx} & \text{finita para } x \to -\infty \checkmark \\ \psi_{③}(x) = B e^{-Cx} & \text{finita para } x \to +\infty \checkmark \end{cases}$$

A e B são constantes arbitrárias

Na região ②:
$$\frac{d^2\psi_{②}}{dx^2} = \overbrace{-\frac{2mE}{\hbar^2}}^{\equiv k^2} \cdot \psi_{②}(x)$$

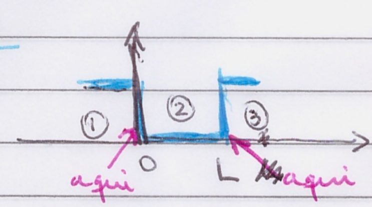
$$\boxed{\frac{d^2\psi_{②}}{dx^2} = -k^2 \psi_{②}(x)}$$

Esta equação admite soluções do tipo:

$$\psi_{②}(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx}$$

$$\Rightarrow \psi'_{②}(x) = ikF e^{ikx} - ikG e^{ikx}$$

Continuidade da função $\psi(x)$



(1) $\psi_{①}(0) = \psi_{②}(0) \Rightarrow A = F + G$ ✓

(2) $\psi_{②}(L) = \psi_{③}(L) \Rightarrow Fe^{ikL} + Ge^{-ikL} = Be^{-CL}$ ✓

Continuidade da derivada $\psi'(x)$

(3) $$\left.\frac{d\psi_{①}}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{②}}{dx}\right|_{x=0} \Rightarrow AC = ik(F-G)$$

(4) $$\left.\frac{d\psi_{②}}{dx}\right|_{x=L} = \left.\frac{d\psi_{③}}{dx}\right|_{x=L} \Rightarrow ikFe^{ikL} - ikGe^{-ikL} = -BCe^{-CL}$$

$$C = \left(\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

resolvendo ....

$\Rightarrow$ restrições nos valores de k e E

$$\boxed{k_n \cdot L + 2\theta = n\pi} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots N$$

$$k_n = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}$$

$$\theta = tg^{-1}\sqrt{\frac{E_n}{U_0-E_n}} \longrightarrow 0 \quad (\text{para } U_0 \to \infty)$$

= limite do poço infinito

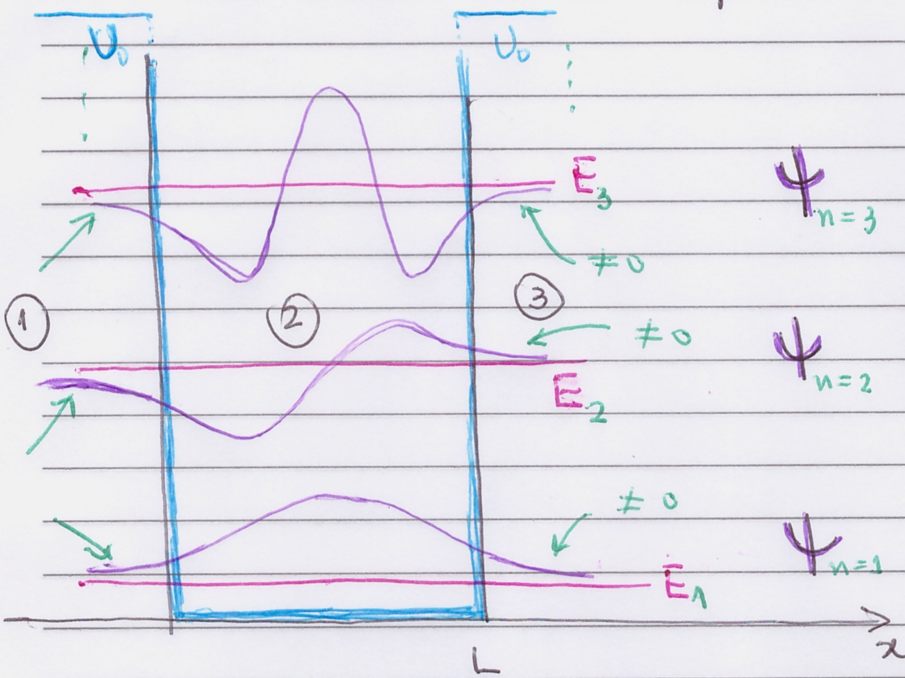
$$\boxed{E_n = \text{valores discretos de } E}$$

ENERGIA QUANTIZADA dentro do poço.

Mas neste caso, há um número FINITO (N) de "estados ligados"

$$E_1, E_2, \ldots E_N$$

Representação da função de onda $\psi(x)$ em cada "estado ligado":



Note 1 : As funções $\psi_n(x)$ não se anulam nas regiões em que

$$E_n < U_0$$

ou seja, nas regiões classicamente "PROIBIDAS" 1 e 3

Note 2 : Para $U_0 \to \infty$, $C \to \infty$

$$C = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \Rightarrow \begin{cases} \psi_1 \sim e^{Cx} \to 0 & (x<0) \\ \psi_3 \sim e^{-Cx} \to 0 & (x>0) \end{cases}$$

Exercício

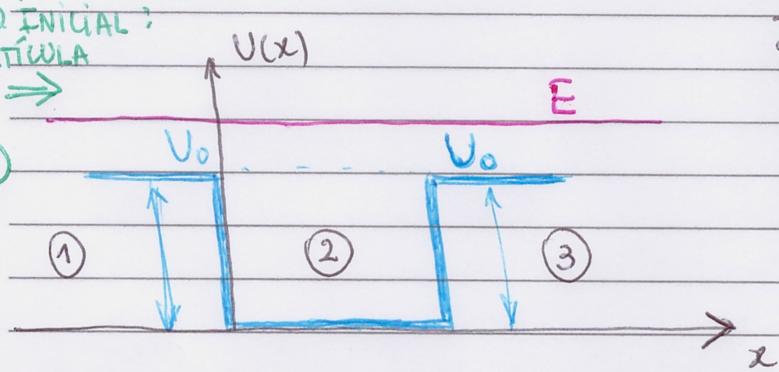
Considere o poço finito
$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \begin{cases} x \leq 0 \\ x \geq L \end{cases} \\ 0 & 0 \leq x \leq L \end{cases}$$

e a partícula com energia $E > U_0$.

Escreva as expressões para a solução GERAL $\psi(x)$ da Eq. de Schrödinger independente do tempo em cada região do espaço.

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

COND INICIAL: A PARTÍCULA AQUI em ①



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(E - U(x))}_{>0}\psi(x)$$

Em ①, ③:
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(E-U_0)}_{>0}\psi = -(k')^2\psi$$
$$k' = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

Em ②:
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi = -k^2\psi$$
$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Solução GERAL:

$$\psi_{①} = \underbrace{Ae^{ik'x}}_{\text{incidente}} + \underbrace{Be^{-ik'x}}_{\text{refletida}}$$

$$\psi_{②} = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$$

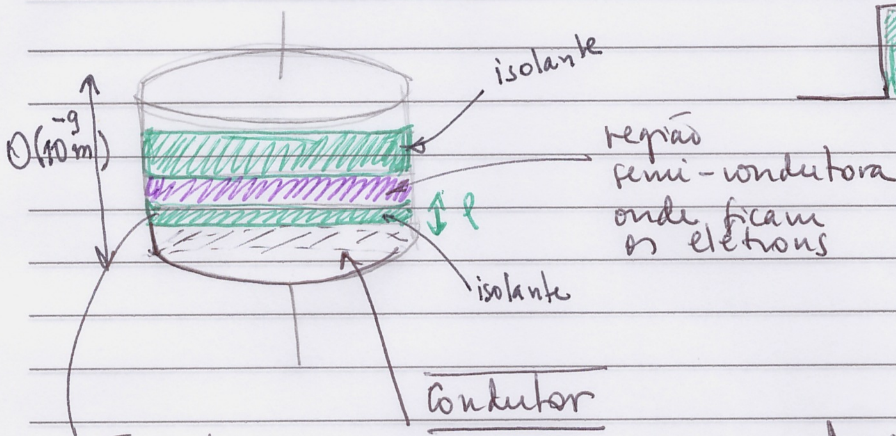
$$\psi_{③} = Fe^{ik'x} + \cancel{Ge^{-ik'x}}$$

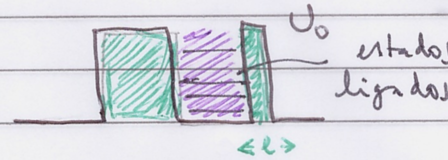
$$\Psi_{③}(x,t) = \underbrace{Fe^{i(k'x - \frac{E}{\hbar}t)}}_{\text{onda progressiva = transmitida}}$$

Aplicação da "caixa" de potencial de altura finita U_0:

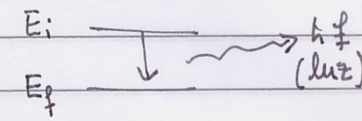
"<u>Quantum dot</u>" (IBM)

É um dispositivo eletrônico





= átomo artificial



região estreita isolante, por onde elétrons podem "tunelar" se for aplicada uma ddp adequada

A ideia principal é controlar o número de elétrons dentro da "caixa".

Usos: redes em 2D podem formar a base para sistemas de computação de alta "performance" e capacidade de armazenamento.

Quantum Dot Light emitting diodes: "QD-Led"

→ emitem luz monocromática