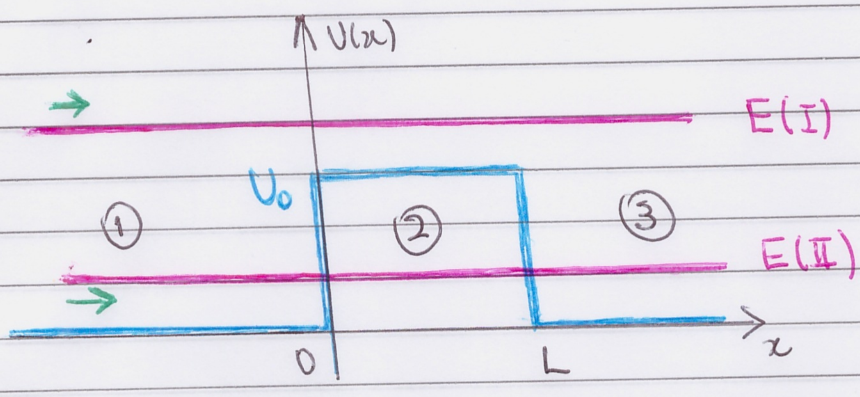
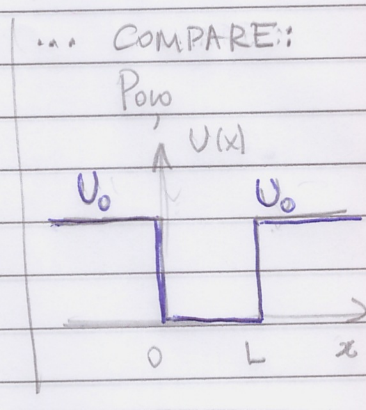
Exemplo 3 : Barreira de Potencial Retangular





$$U(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ U_0 > 0 & (0 \leq x \leq L) \\ 0 & (x > L) \end{cases}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x)\,\Psi(x,t)$$

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

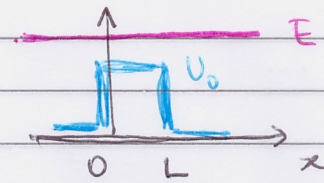
$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

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

(I) $E > V_0$ (II) $0 < E < U_0$

(I) $E > U_0$

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



$$k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$k' = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

Estados estacionários : soluções para $E > U_0$

$$\psi_{①}(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{\to \text{ onda incidente}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\to \text{ onda refletida}} \qquad (x < 0)$$

$$\psi_{②}(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} \qquad (0 \leq x \leq L)$$

$$\psi_{③}(x) = F e^{ikx} + \underbrace{\cancel{G e^{-ikx}}}_{G=0} \qquad (x > L)$$

"Coeficiente de Transmissão" :

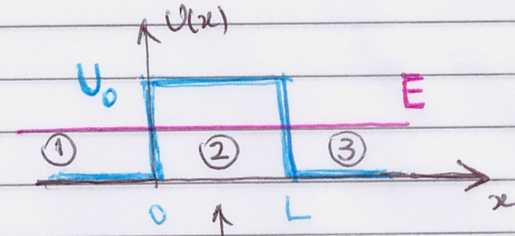
$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

(II) $0 < E < U_0$

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

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

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



$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(E - U_0)}_{<0}\psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = +\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}_{\equiv \alpha^2}\psi$$

Estados estacionários: soluções para $0 < E < U_0$!

$$\psi_1(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{\to \text{ onda incidente}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\to \text{ onda refletida}} \qquad (x < 0)$$

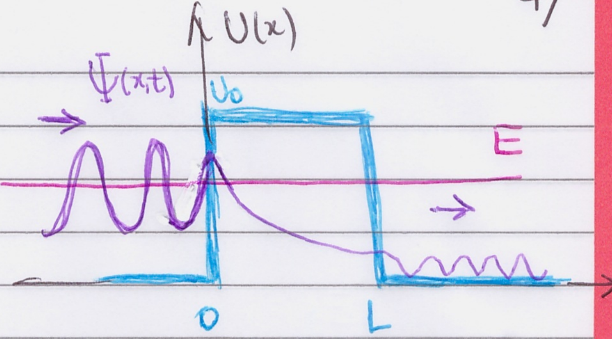
$$\psi_2(x) = \underbrace{C}_{\neq 0\ !!} e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x} \qquad (0 \leq x \leq L)$$

mas $C \ll D$

$$\psi_3 = \underbrace{F e^{ikx}}_{\text{onda transmitida}} + \underbrace{\cancel{G e^{-ikx}}}_{G=0} \qquad (x > L)$$

S T Q Q S S D

Tunelamento !



Coeficiente de Transmissão:

$$T \sim \left| \frac{\text{amplitude da onda transmitida}}{\text{amplitude da onda incidente}} \right|^2 \sim \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Para $|A| \equiv 1$

$$T \sim |F|^2 \sim P . e^{-2\alpha L} \qquad \begin{cases} P = 16 \dfrac{E}{U_0} \cdot \left(1 - E/U_0\right) \\ \alpha = \sqrt{\dfrac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \end{cases}$$

Para $\boxed{U_0 >> E \quad \Rightarrow \quad T \sim 0}$

e/ou $\quad L >> 1/2\alpha \quad \Longrightarrow \quad T \sim 0$

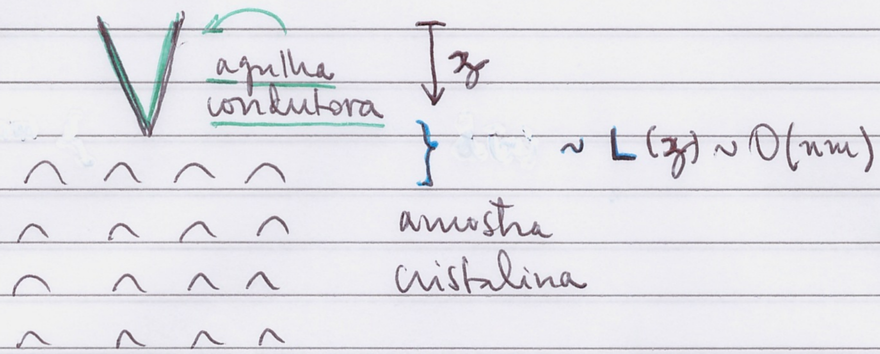
Aplicações : 1) "quantum dot"

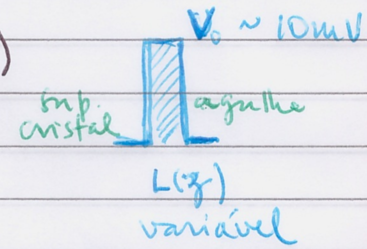
2) "microscópio de força atômica"

outras !

Microscópio de Força Atômica

(também: "microscópio eletrônico" / "microscópio de tunelamento")





$L(z)$ controla a distância entre a agulha e a amostra em cada ponto. Os elétons da amostra podem tunelar, dependendo da distância $L(z)$ ($\sim nm$). Na agulha, mede-se a corrente de elétons. A intensidade da corrente é proporcional a

$$e^{-2\alpha L(z)}$$

: tunelamento ocorre somente qdo a agulha está bem próxima à superfície.

Para manter a corrente constante, a agulha deve executar pequenos deslocamentos para cima e para baixo à medida em que varre a superfície.

Estes deslocamentos mapeiam a densidade eletrônica da superfície e portanto, sua estrutura atômica.

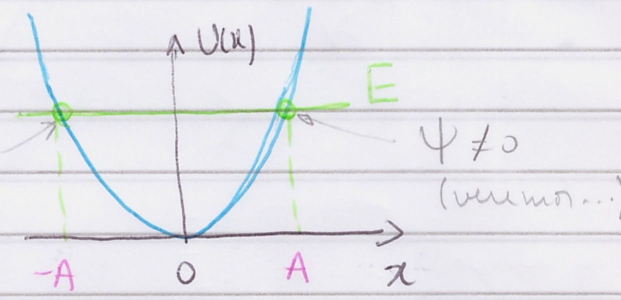
O oscilador harmônico simples na MQ

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

$\psi(x)$ ... estado estacionário

$$\begin{cases} U(x) = \frac{1}{2}Kx^2 \\ \mathbb{F} = -kx\hat{i} \end{cases}$$

$x : [-\infty, \infty]$ $\psi \neq 0$



◉ A: amplitude clássica

◉ É um "poço de potencial" $\Rightarrow$ CONFINAMENTO

EXIBE $\Rightarrow E_n$

◉ Soluções para as funções de onda correspondentes aos "níveis discretos" de energia

$$\psi_n(x) = C_n H_n(x)\, e^{-\gamma^2 x^2/2}$$

[não são sin(x)!]

$\omega = \sqrt{k/m}$ = frequência clássica

$\gamma = \sqrt{m\omega/\hbar}$

$\boxed{H_n : \text{polinômios de Hermite}}$

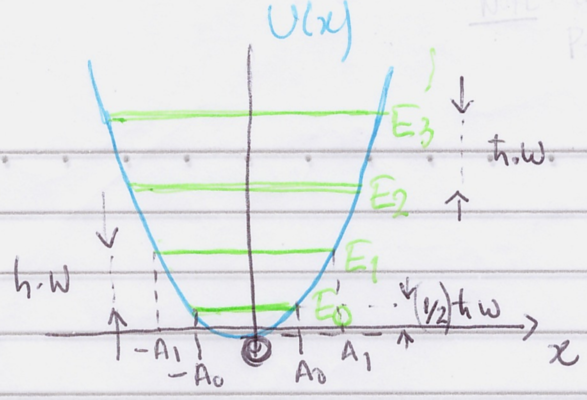
$$H_0(x) = 1$$
$$H_1(x) = 2\gamma x$$
$$H_2(x) = 4(\gamma x)^2 - 2$$
$$\vdots$$

◉ Autovalores de energia: $\| E_n = (n + 1/2)\hbar\omega \|$

$n = 0, 1, 2, 3 \ldots$

$\omega = \sqrt{K/m}$ = frequência clássica

$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ... energia de "ponto zero"



$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$$

$n = 0, 1, 2, \dots$

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

$$= 2E_0$$

Interpretação:

(1) Energia de "ponto zero": $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \neq 0$

"energia do ESTADO FUNDAMENTAL

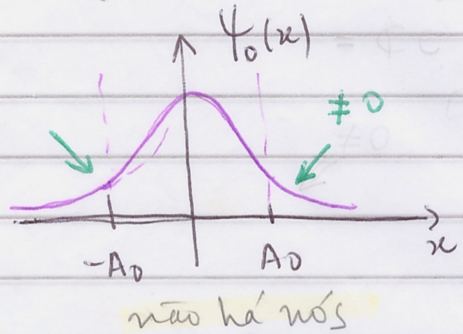
(o oscilador não existe com energia menor que E_0 → viola o princípio da incerteza)

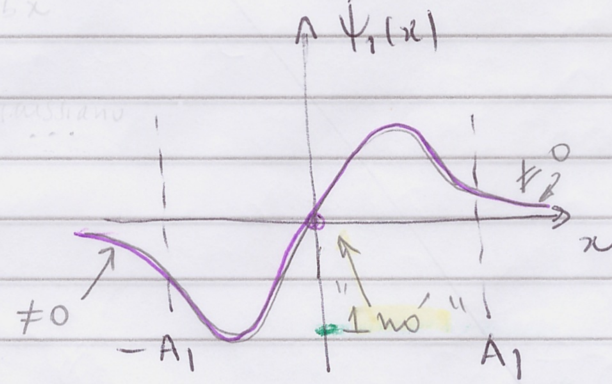
$\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar/2$ se $p_x = 0$, $\Delta p_x = 0$, como Δx finito, viola

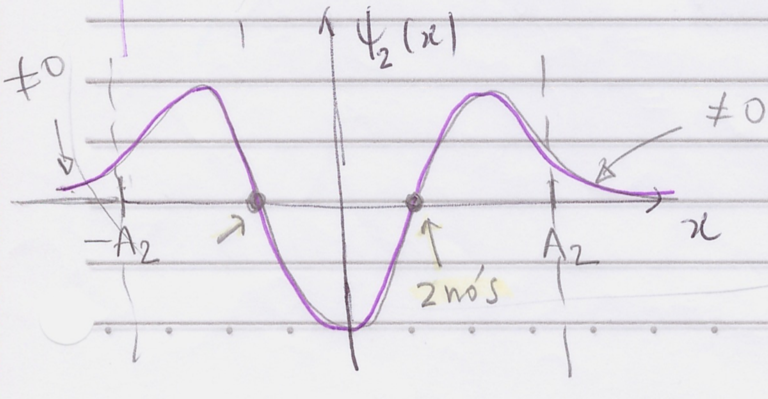
A partícula nunca se encontra em repouso!

No estado FUNDAMENTAL (ψ_0, E_0) posição e momento exibem incerteza na medida.

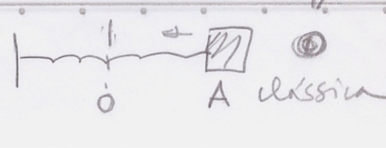
(2)



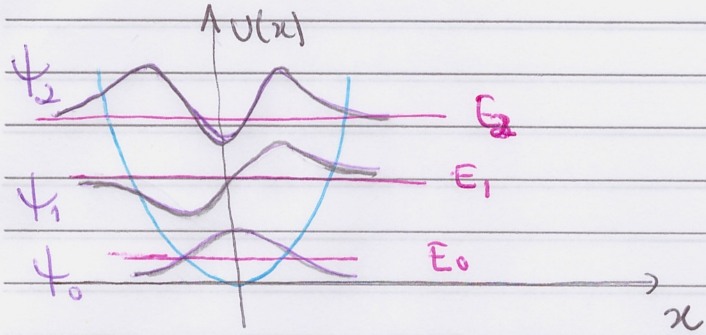




Ou seja: as funções se estendem para além da amplitude clássica!



Oscilador Harmônico Simples
[Quântico] : RESUMO



$$\psi_n = C_n H_n(x)\, e^{-\gamma^2 x^2/2}$$

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$$

Exercício: A função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico quântico é:

$$\psi_0(x) = C\, e^{-bx^2}.$$

A partícula possui massa m e a "constante" da mola $= K$.

① Determine C, b e a energia E_0 do estado fundamental (= "energia de ponto zero").

Solução: A função satisfaz a

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

$U(x) = \frac{1}{2}Kx^2$

$\mathbb{F} = -Kx\hat{i}$

Para $\psi = \psi_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2\psi_0(x) = E\psi_0(x)$$

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = \left(E_0 - \frac{1}{2}Kx^2\right) \cdot \frac{2m}{-\hbar^2} \cdot \psi_0(x)$$

Usando a função $\psi_0(x)$ dada:

$$\frac{d\psi_0}{dx} = \mathbb{C}\, e^{-bx^2} \cdot (-2bx)$$

onde usamos que: $\frac{d}{dx} e^{z(x)} = \left(\frac{d}{dz} e^{z}\right) \cdot \frac{dz}{dx} = e^{z} \frac{dz}{dx}$

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left[\mathbb{C}\,(-2b) \cdot e^{-bx^2} \cdot x\right]$$

$$= \underbrace{\mathbb{C}}\,(-2b)\left[(-2bx)\underbrace{e}^{-bx^2} \cdot x + \underbrace{e}^{-bx^2}\right]$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = (-2b)\left[(-2bx^2)\,\psi_0(x) + \psi_0(x)\right]}$$

Substituindo na Eq. de Schrödinger:

$$(-2b)\left[(-2bx^2)\,\psi_0(x) + \psi_0(x)\right] = \left(E_0 - \frac{1}{2}Kx^2\right) \cdot \frac{2m}{-\hbar^2}\,\psi_0(x)$$

$$\underbrace{+4b^2x^2} \; \underbrace{-2b} = \underbrace{E_0 \frac{2m}{-\hbar^2}} + \underbrace{\frac{Kmx^2}{\hbar^2}}$$

Igualando as potências de x:

(a) $4b^2 = \frac{km}{\hbar^2} \Rightarrow b_\pm = \pm\sqrt{\frac{km}{4\hbar^2}}$

$b = b_+ = \sqrt{\frac{km}{4\hbar^2}} = \frac{\sqrt{km}}{2\hbar}$ [A solução deve ser finita para todo x]

(b) $2b = E_0 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \Rightarrow E_0 = +\frac{\hbar^2}{m} \cdot b$

$E_0 = \frac{\hbar^2}{m} \cdot \sqrt{\frac{km}{4\hbar^2}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\hbar\omega}{2}$ ✓

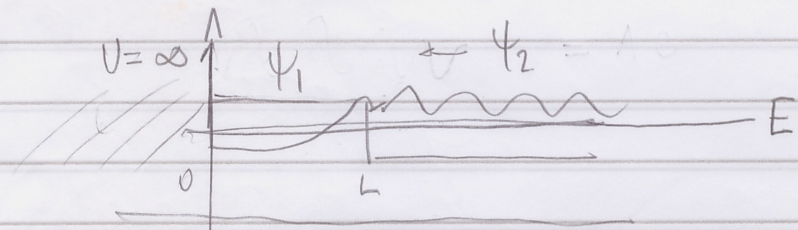
$\omega = \sqrt{k/m}$ frequência do oscilador clássico

A constante C é determinada normalizando-se a função de onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 \, dx = 1$$

$$\Rightarrow |C|^2 \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2} \, dx}_{\sqrt{\pi/2b}} = 1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{|C| = \sqrt[4]{2b/\pi}}$$

Outro exemplo: normalização:



$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^L |\psi_1|^2 dx + \int_L^{\infty} |\psi_2|^2 dx$$