Aula 9 (22/Fev)

Na aula de hoje

* Revisão da última aula.
* Potenciais 1D independentes do tempo "quadrados".

—//—

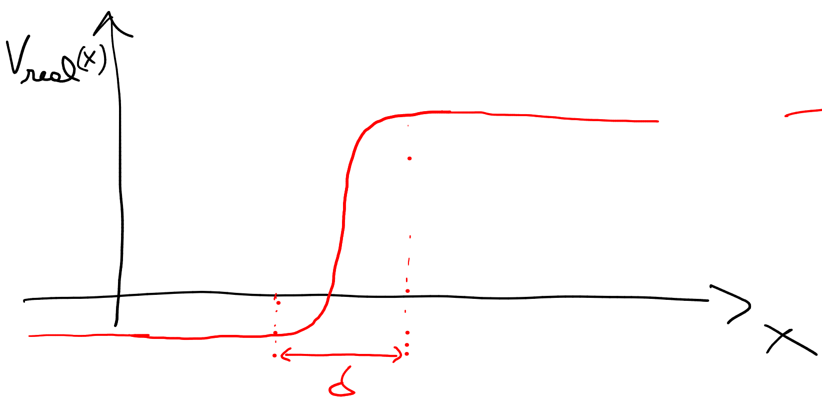
Revisão da última aula

* Sobreposição contínua de ondas planas.
* Potenciais indep. do tempo.
* Eq. Schr. indep. do tempo.
* Estados estacionários.

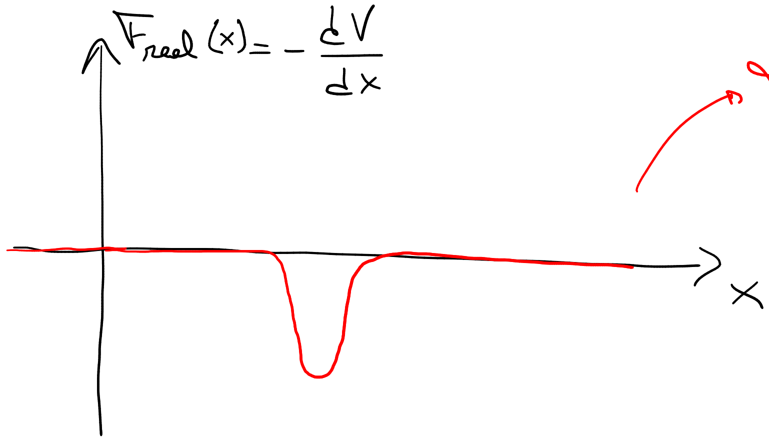
—//—

3.3 Potenciais 1D "quadrados" indep. do tempo

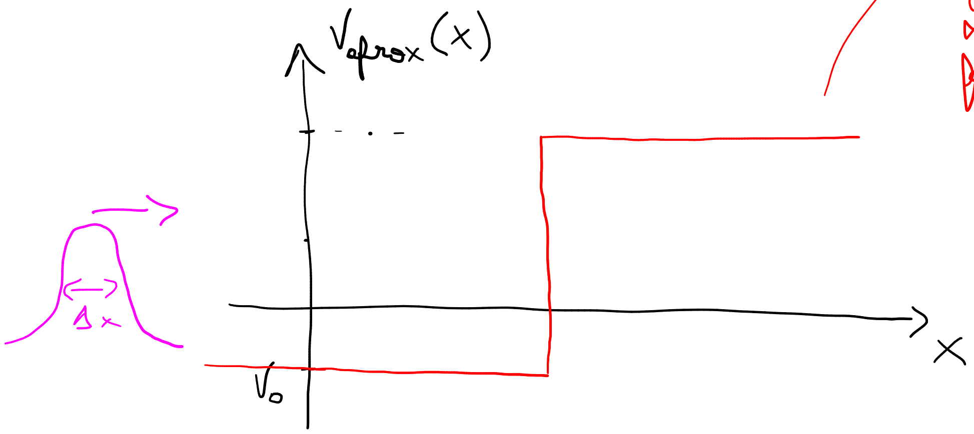
Consideremos um potencial que varia em escalas de comprimento muito menores do que todas as outras escalas de comprimento do problema (ex., o comprimento de onda da partícula, λ),



→ Potencial real é difícil de tratar matematicamente

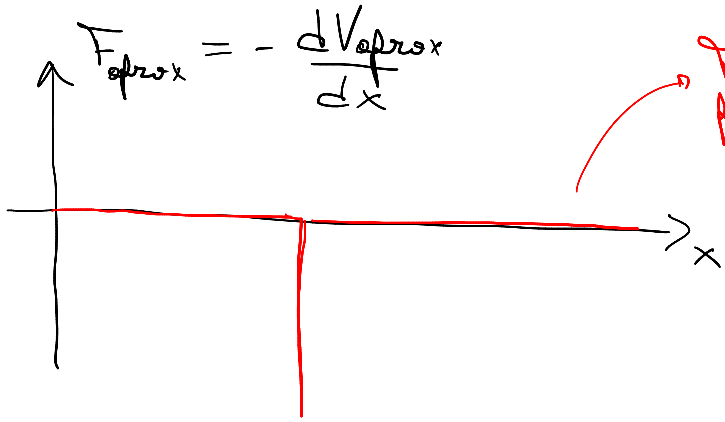


Força sentida pela partícula devido a $V_{real}(x)$



Potencial quadrado (aproximado); é mais fácil de tratar matematicamente.

É boa aproximação de $V_{real}(x)$ se $d \gg \delta$.



Força sentida pela partícula devido a $V_{aprox}(x)$

Nas regiões onde $V(x) = V_{aprox}(x)$ é constante, a eq. Schr. indep. tempo será

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + V \cdot \phi(x) = E \cdot \phi(x)$$

onde V é constante.

Comentários:

* Quando $V(x)$ = constante $\Leftrightarrow$ termos partícula livre.
* Partícula livre é descrita em termos de ondas planas.
* Podemos combinar ondas planas num pacote de ondas, que descreve partícula no espaço x e p com incertezas Δx e Δp.
* Sabemos evoluir no tempo cada onda plana, e por resultado sabemos então evoluir um pacote de ondas.

3.3.1) Soluções gerais da eq. Schr. independente do tempo numa região com $V(x)$ = constante

Se $V(x) = V$, então a eq. Schr. independente do tempo será

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\,\phi(x) = 0$$

que terá soluções do tipo $\phi(x) = e^{\alpha x}$.

Usando este ansatz,

$$\alpha^2 \cdot \cancel{e^{\alpha x}} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\,\cancel{e^{\alpha x}} = 0$$

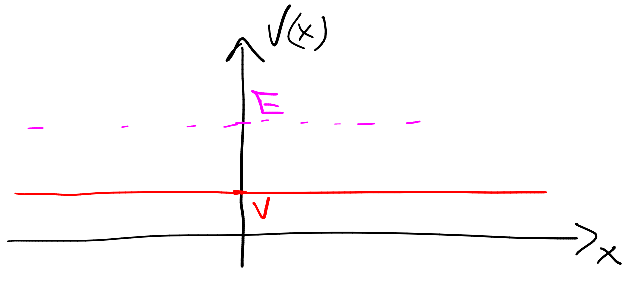
$$\Leftrightarrow \alpha = \pm\sqrt{-\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} = \pm i \overbrace{\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}}^{\equiv k}$$

e as nossas soluções particulares serão

$$\phi(x) = e^{\pm ikx}$$

Analisemos os diferentes casos possíveis: $E>V$, $E<V$ e $E=V$.

* <u>Caso $E > V$:</u>



Neste caso teremos que k é dado por

$$\alpha = \pm i\sqrt{2m(E-V)}/\hbar \equiv \pm ik \quad , \text{ onde } k \in \mathbb{R}.$$

As soluções gerais são então

$$\phi(x) = A \cdot e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$$

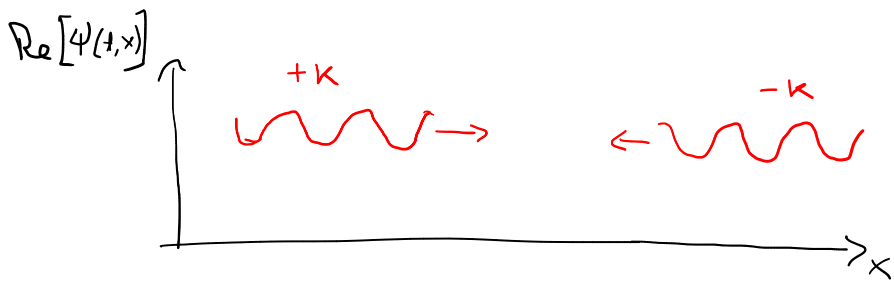
A parte da f. o. vinda da solução da parte temporal da eq. de Schrodinger é

$$\chi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

e assim teremos que $\psi(t,x) = \phi(x).\chi(t)$ é

$$\psi(t,x) = A\, e^{i(kx - \frac{E}{\hbar}t)} + B \cdot e^{i(-kx - \frac{E}{\hbar}t)}$$

que correspondem a duas ondas planas, uma movendo-se da esquerda para a direita, e a outra movendo-se da direita para a esquerda



As constantes A e B serão determinadas pelas condições fronteira que tivermos que impor no contexto de cada problema.

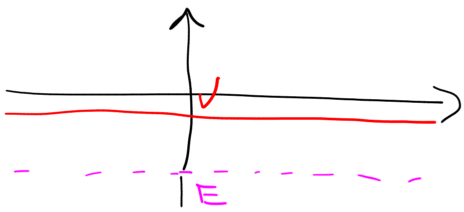
Nota: O coeficiente da parte temporal da onda plana, $\frac{E}{\hbar}$, pode ser escrito como

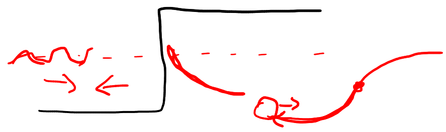
$$\omega = \frac{E}{\hbar} \Leftrightarrow E = \hbar\omega$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega$$

$$\Leftrightarrow \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{V}{\hbar}$$

* <u>Caso $E < V$</u>:





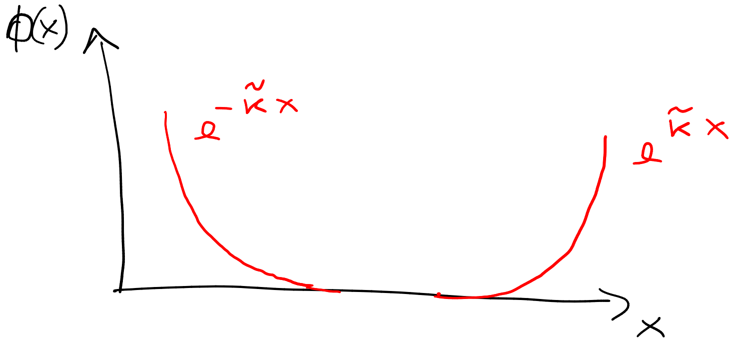
Neste caso teremos que κ é dado por

$$\kappa = \pm \sqrt{2m(V-E)}/\hbar = \pm \tilde{\kappa}, \quad \tilde{\kappa} \in \mathbb{R}.$$

As soluções gerais serão então

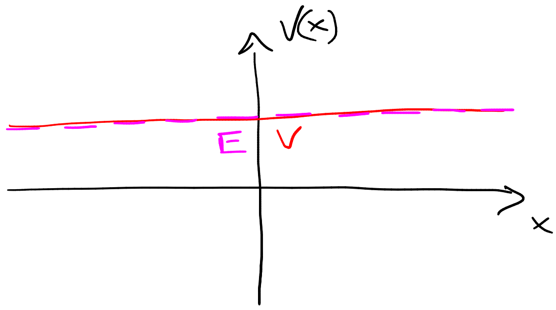
$$\phi(x) = \tilde{A}\, e^{\kappa x} + \tilde{B}\, e^{-\tilde{\kappa} x},$$

que são duas exponenciais, uma crescendo com x e outra decrescendo com x. Estas f. o. exponenciais costumam ser chamadas de "<u>ondas evanescentes</u>".



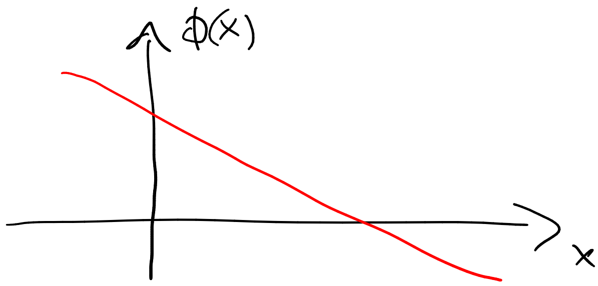
Tal como no caso anterior, $\tilde{A}$ e $\tilde{B}$ serão determinados pelas condições fronteira de cada problema.

* Caso $E = V$:



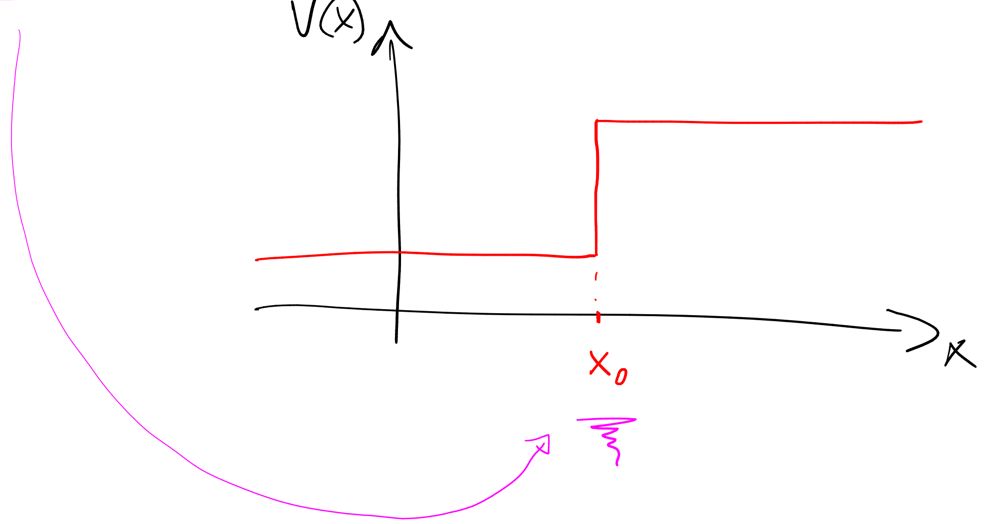
A eq. Schr. indep. do tempo é

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = 0 \iff \phi(x) = c' \cdot x + c$$



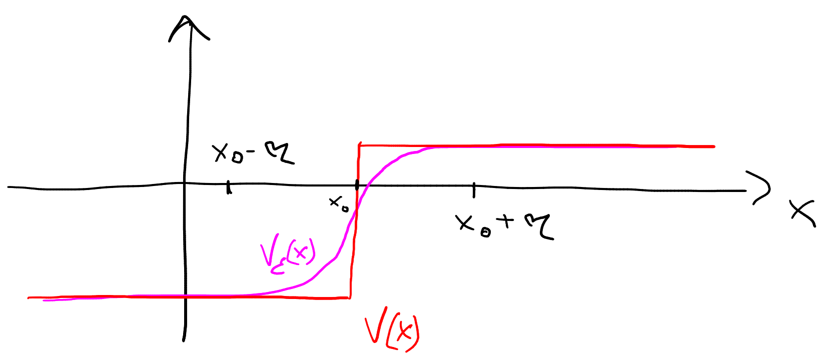
com c' e c determinados pelas condições fronteira.

Mas agora que já sabemos a forma das soluções nas regiões onde o potencial é constante, resta-nos perceber o que vai acontecer com as f.o. nos pontos de descontinuidade do potencial



3.3.2) Condições de continuidade da f.o. nos pontos de descontinuidade de $V(x)$.

Consideremos $V(x)$ descontínuo em $x = x_0$.



$V(x)$ é aprox. do potencial real $V_\varepsilon(x)$. Este último é contínuo em $x \in [x_0-\varepsilon, x_0+\varepsilon]$, ao contrário de $V(x)$ que é descontínuo neste intervalo.

$V(x)$ e $V_\varepsilon(x)$ são iguais fora de $[x_0-\eta, x_0+\eta]$.

Vamos trabalhar com $V_\varepsilon(x)$ e no final tomaremos o limite $\lim_{\varepsilon \to 0} V_\varepsilon(x) \longrightarrow V(x)$.

Para um dado potencial $V_\varepsilon(x)$ teremos um estado estacionário $\phi_\varepsilon(x)$, obedecendo à eqç Schr.,

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi_\varepsilon(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_\varepsilon(x) - E\right).\phi_\varepsilon(x)$$

Integremos em todo o espaço x, e separemos o integral em 3 partes

$$\begin{cases} x \in\,]-\infty, x_0-\eta[\\ x \in [x_0-\eta, x_0+\eta] \\ x \in [x_0+\eta, \infty[\end{cases} \longrightarrow \begin{array}{l} V_\varepsilon(x) = V(x) \\ \phi_\varepsilon(x) = \phi(x) \end{array}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \ldots dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \ldots dx \Rightarrow \int + \int + \int = \int + \int + \int ,$$

bastar-nos-à olhar para os integrais em $x \in [x_0-\eta, x_0+\eta]$

$$\int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} \left[\frac{d^2}{dx^2}\phi_\varepsilon(x)\right].dx = \int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_\varepsilon(x) - E\right)\phi_\varepsilon(x).dx$$

$$\Leftrightarrow \left[\frac{d\phi_\varepsilon(x)}{dx}\right]_{x_0+\eta} - \left[\frac{d\phi_\varepsilon(x)}{dx}\right]_{x_0-\eta} = \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta}\left(V_\varepsilon(x)-E\right)\phi_\varepsilon(x)\,.\,dx}_{\substack{|||\\ I_\varepsilon(\eta)}}$$

Para que $\phi_\varepsilon(x)$ e $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\phi_\varepsilon(x) = \phi(x)$ sejam boas f.o., elas não podem divergir em nenhum ponto de x

$\hookrightarrow$ $\phi_\varepsilon(x)$ é finito em $x\in[x_0-\eta, x_0+\eta]$, mesmo quando $\varepsilon\to 0$.

Então, o integrando em $I_\varepsilon(\eta)$ é finito (desde que $V_\varepsilon(x)$ seja finito) em $x\in[x_0-\eta, x_0+\eta]$.

Se fizermos $\varepsilon\to 0$

$$\lim_{\varepsilon\to 0} I_\varepsilon(\eta) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta}(\dots)\,.\,dx = \text{finito}(\eta)$$

que se então tomarmos $\eta\to 0$, será zero!

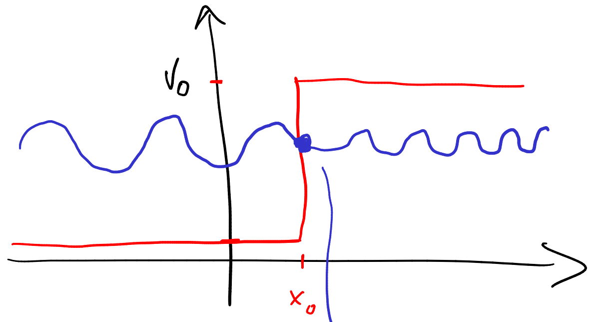
Teremos então que

$$\Rightarrow \left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{x_0^+} - \left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{x_0^-} = 0$$

ou seja, a derivada da f.o. será contínua no ponto x_0 onde $V(x)$ é descontínuo. Se $\phi'(x)$ é contínua, então $\phi(x)$ também é contínua.

Teremos que impor (se o potencial finito) que

- A f.o. seja contínua em x_0.
- A derivada (espacial) da f.o. em x_0 também seja contínua



↳ f.o. + derivada f.o. contínuas.

Comentário: Esperamos que f.o. seja contínua pois não seria fisicamente aceitável ter $\psi(x)$ descontínuo, logo $|\psi(x)|^2$ descontínuo. Seria fisicamente estranho que probabilidade de encontrar partícula em $[x, x+dx]$ e em $[x+\delta, x+\delta+dx]$ fossem muito diferentes.

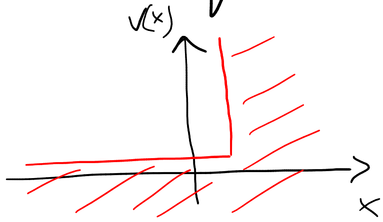
Mas o que acontecerá se $V(x)$ não for finito?

$$\left.\frac{d\phi_E}{dx}\right|_{x_0+\eta} - \left.\frac{d\phi_E}{dx}\right|_{x_0-\eta} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} \underbrace{(V_E(x)-E).\phi_E(x)}.dx$$

↳ I = Primitiva [...]

se $\varepsilon \to 0$, $\underline{V_{\varepsilon \to 0} = \infty \quad x > x_0}$, sendo finito em $x < x_0$,

↳ $\underline{\phi(x) \to 0}$



$$\lim_{\varepsilon \to 0} I_\varepsilon(\eta) = I(\cancelto{0}{x_0+\eta}) - I(x_0-\eta) \neq 0$$

$$\lim_{\eta \to 0} I(\eta) \neq 0$$

e assim a derivada da f.o. já não será contínua em tal descontinuidade.

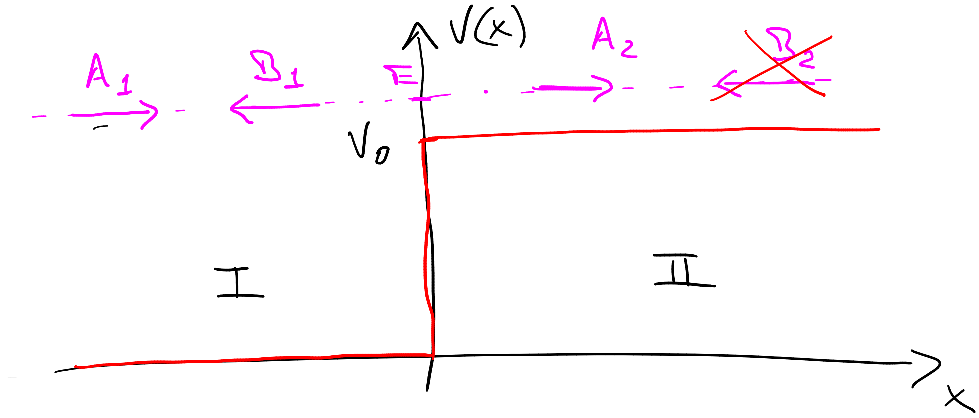
No entanto continuaremos a impor a continuidade da f.o. (ver comentário anterior)

Teremos que impor (descontinuidade potencial infinito):

- Continuidade da f.o. em x_0.
- a derivada da f.o. já não precisa ser contínua em x_0.

3.3.3) Exemplos de potenciais quadrados

3.3.3.1) Salto de potencial $E > V_0$



O potencial é dado por $V(x) = \begin{cases} V_0, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$

Partícula vindo de $x = -\infty$ (da esquerda para a direita).

Soluções em ambas as regiões

$$\begin{cases} \phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 \cdot e^{-ik_1 x}, & \text{onde } k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \phi_2(x) = A_2 \cdot e^{ik_2 x} + B_2 \cdot e^{-ik_2 x}, & \text{onde } k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \end{cases}$$

Requerer a continuidade da f.o. e da sua derivada em $x = 0$

$$\begin{cases} \phi_1(0) = \phi_2(0) \\ \left.\dfrac{d\phi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\dfrac{d\phi_2}{dx}\right|_{x=0} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 & (1) \\ k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2) & (2) \end{cases}$$

Como queremos partícula vindo de $x=-\infty$ não faz sentido ter $B_2 \neq 0$ pois é partícula vindo de $x=+\infty$.

$$① \Rightarrow B_1 = A_2 - A_1$$

$$② \Rightarrow K_1(2A_1 - A_2) = K_2 A_2 \Leftrightarrow A_2(K_2+K_1) = 2K_1 A_1$$

$$\Leftrightarrow A_2 = \frac{2K_1}{K_1+K_2} \cdot A_1.$$

e então ① fica $\Rightarrow B_1 = \dfrac{K_1 - K_2}{K_1+K_2} \cdot A_1$.

Podemos definir intensidade de uma f.o. como densidade probabilidade vezes velocidade.

↳ $\Leftrightarrow$ intensidade onda EMG: energia atravessa superfície $\perp$ à propagação da onda por unidade de tempo $\Leftrightarrow$ densidade energia $\times$ velocidade

$$\left[\frac{E}{V} \cdot |\vec{v}|\right] = E \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}.$$

$$\frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

$$\boxed{\text{Intensidade da } \phi(x) = \left|A \cdot e^{i(kx-\omega t)}\right|^2 \cdot v_{fl} = |A|^2 \cdot \frac{\hbar k}{2m}}$$

Assim, podemos escrever a intensidade

de das ondas incidente, I_i, refletida, I_r, e transmitida, I_t, como

$$I_i = |A_1|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{2m}$$

$$I_r = |B_1|^2 \frac{\hbar k_1}{2m} = |A_1|^2 \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 \frac{\hbar k_1}{2m}$$

$$I_t = |A_2|^2 \frac{\hbar k_2}{2m} = |A_1|^2 \cdot \left|\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right|^2 \cdot \frac{\hbar k_2}{2m}$$

Com estas intensidades, poderemos definir a probabilidade de a partícula ser refletida e a probabilidade de ser transmitida no salto de potencial.