

Física Quântica (BCK0103-15)

aula 10 - 2019



Na última aula (05/11/19)

- Potenciais simples: poço quadrado finito;
- Operadores e valores médios de observáveis,
- Pontos quânticos e suas aplicações.

Na aula de hoje (12/11/19)

- Potenciais simples: potenciais degraus;
- Reflexão, Transmissão de Ondas Quânticas
- Tunelamento.
- Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.

A equação de Schrodinger independente do tempo

Para o caso de potenciais independentes do tempo [para $V(x,t) = V(x)$]

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

E a solução geral da Equação será dada por:

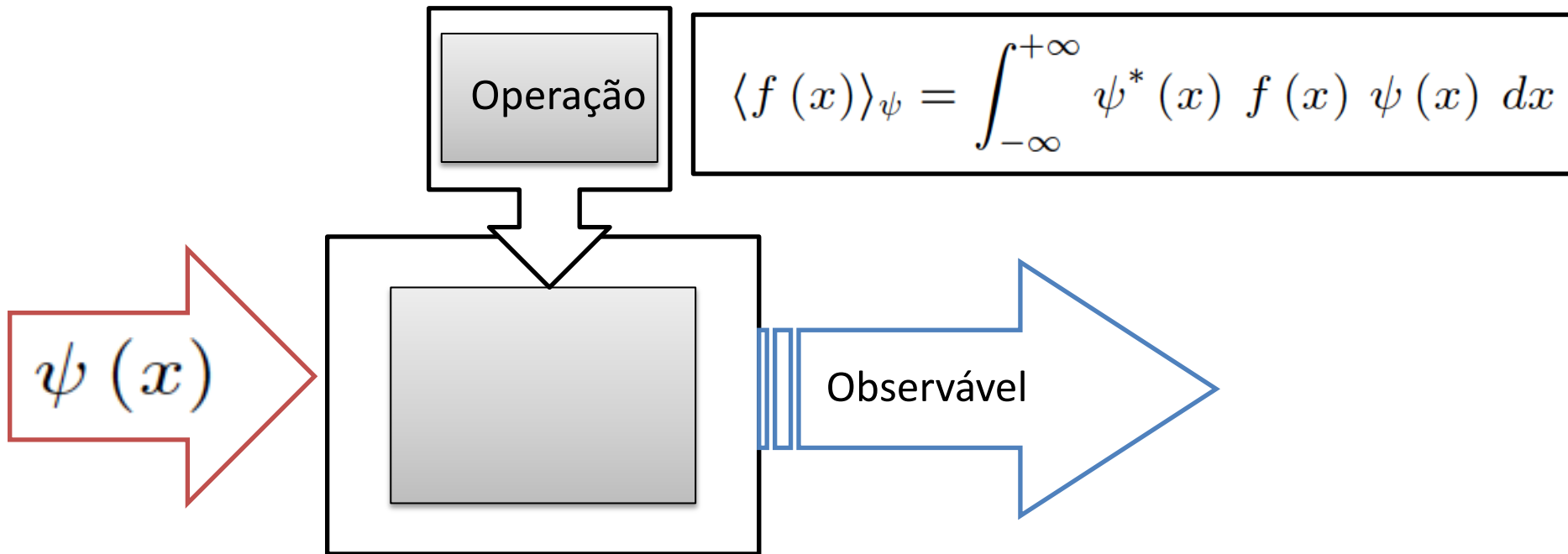
$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

A distribuição de probabilidade pode ser então calculada diretamente como:

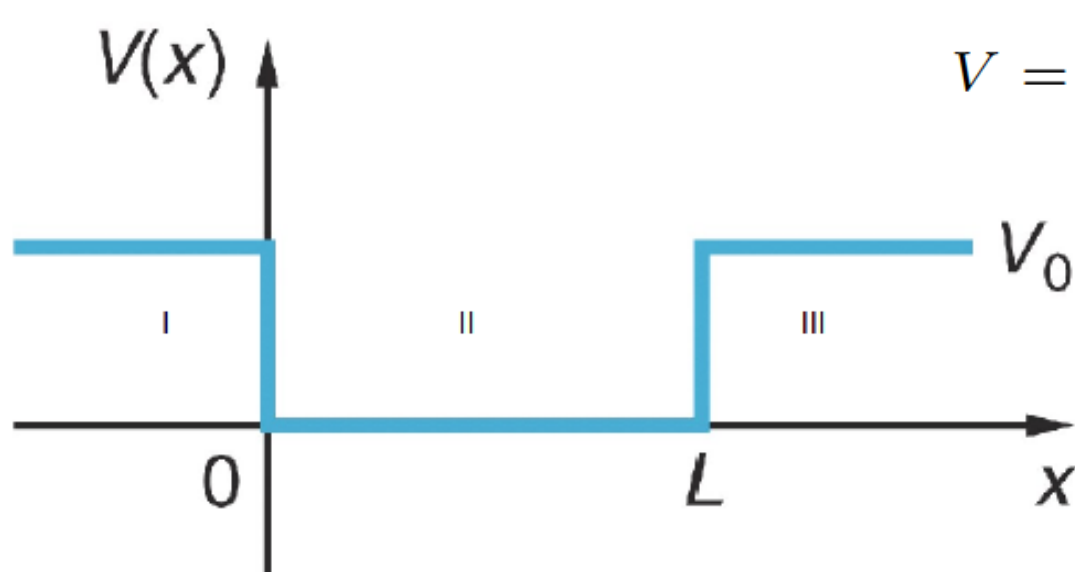
$$P(x) = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = \psi^*(x) \psi(x)$$

Processo de Medida

Para se obter um observável específico, devemos definir a operação (matemática) adequada a ser realizada sobre a função de onda e obter o observável (valor real que representa o resultado da medida).



Poço Finito em uma dimensão



$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } 0 < x < L \\ V_0, & \text{para } x \leq 0, \text{ e } x \geq L \end{cases}$$

$$\psi_I(x) = A_I e^{\kappa x}$$

$$\psi_{II}(x) = A_{II} \sin kx + B_{II} \cos kx$$

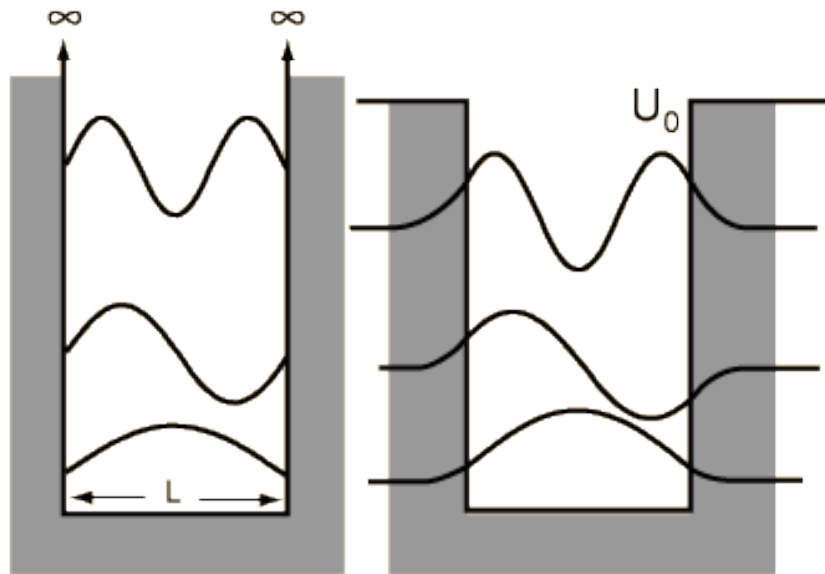
$$\psi_{III}(x) = B_{III} e^{-\kappa x}$$

As constantes são obtidas aplicando as condições de contorno e a normalização da função de onda.

$$-\cot kL = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right)$$

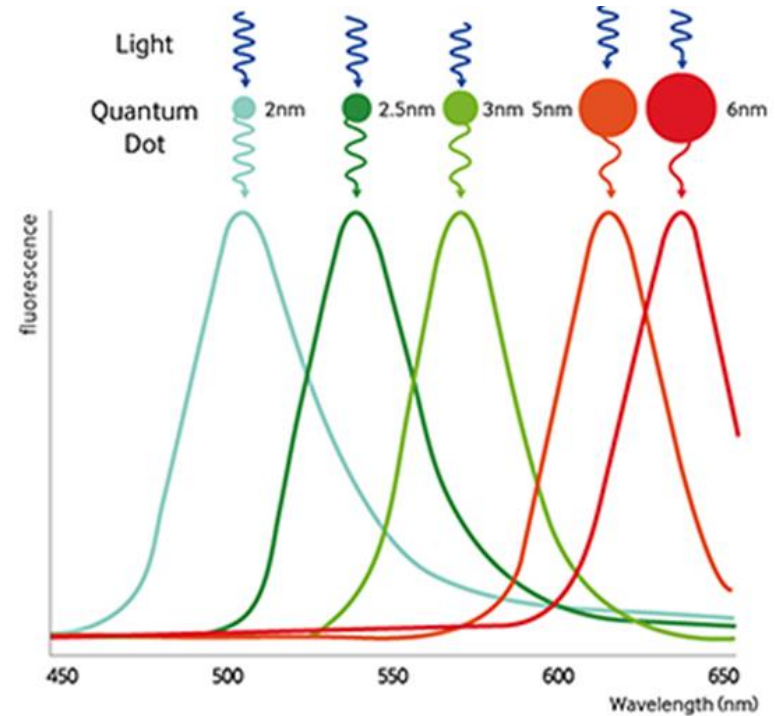
A partir da solução da equação transcendental é possível determinar os valores de energia associados aos estados ligados da partícula.

Modelo: Partícula **confinada** numa caixa



Potencial Infinito

Potencial Finito



Um elétron está confinado em um poço quadrado finito cujas “paredes” têm 10,0 eV de altura. Se a energia do estado fundamental é 0,5 eV.

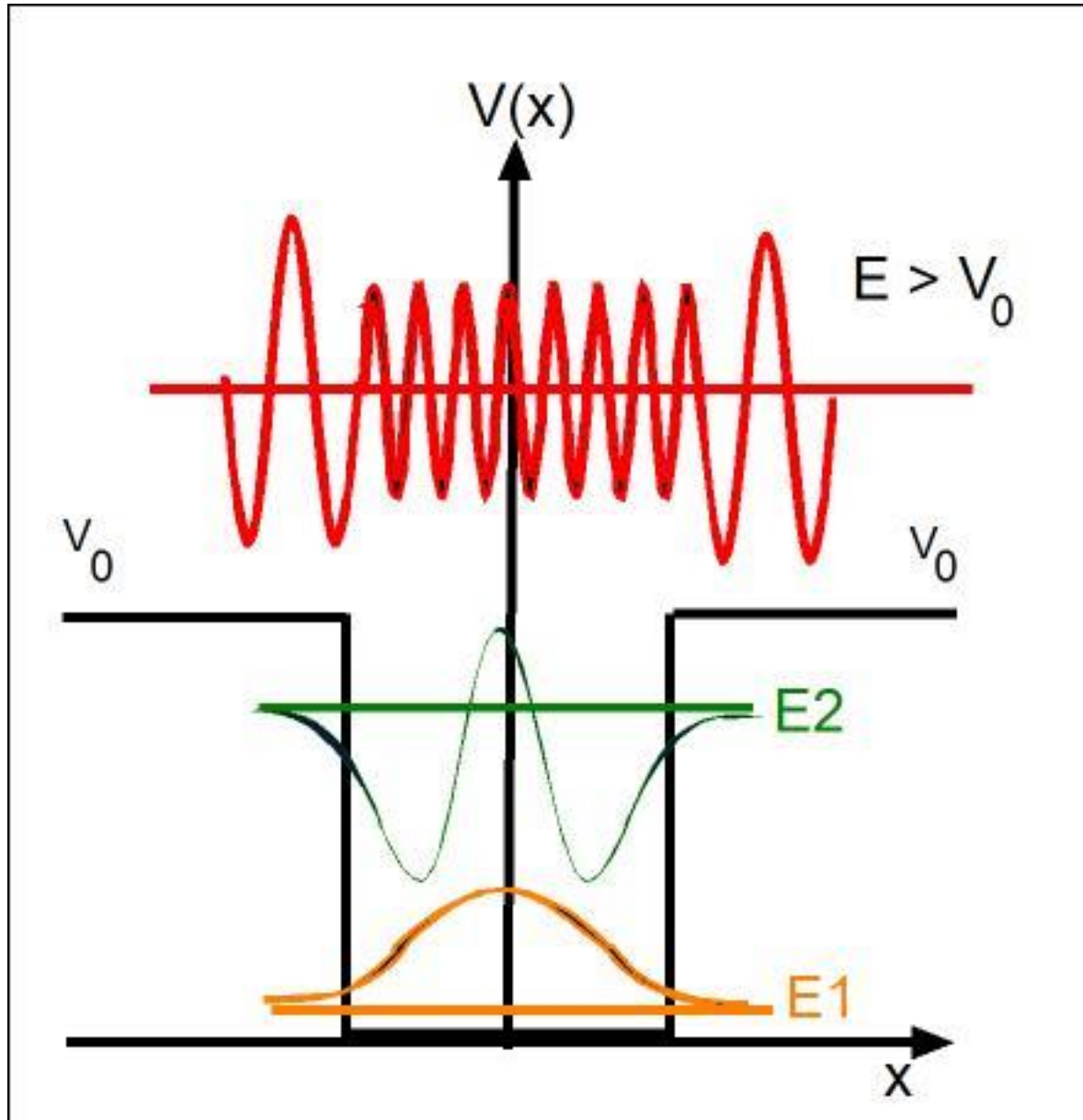
- a) Estime a largura do poço.
- b) Quantos estados ligados existem para este poço?

Respostas:

a) $L = 0,868$ nm

b) Temos 4 estados ligados

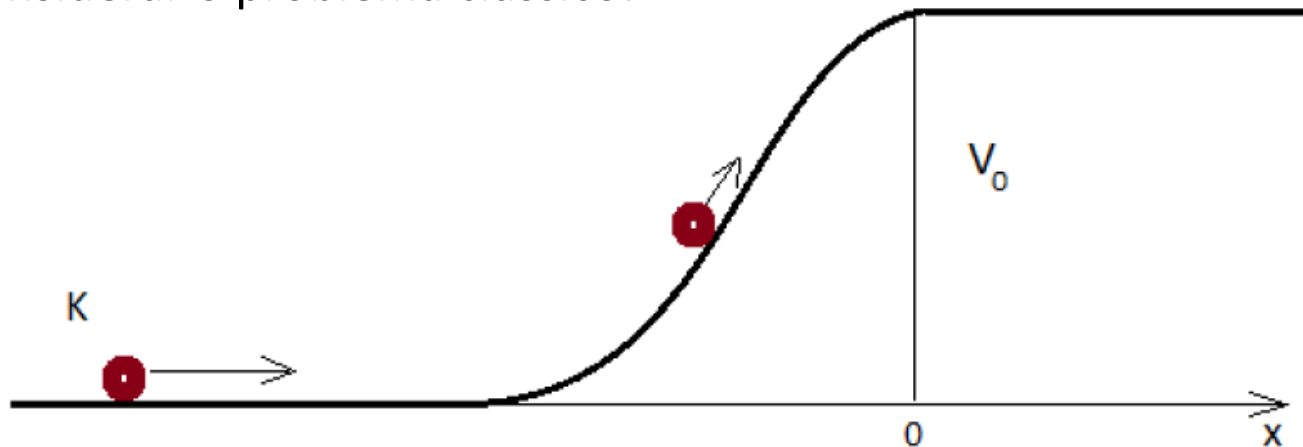
O caso de partículas com $E > V_0$.



Reflexão e transmissão de ondas

Nos problemas tratados até o momento, obtivemos sempre soluções que representavam estados ligados. Vamos discutir alguns exemplos em que as soluções são **estados não ligados**, ou seja, estados não limitados a uma região do espaço específica. Em geral, estes problemas são denominados problemas de **barreira de potencial**.

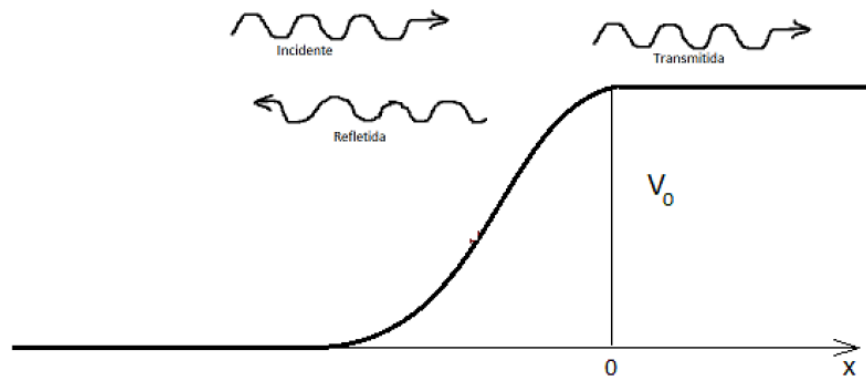
Vamos considerar o problema clássico:



Se a energia cinética for menor que a energia potencial V_0 , a partícula não poderá ser encontrada em posições para $x > 0$.

Para problemas quânticos, veremos que as consequências podem ser bem diferentes e teremos resultados bastante curiosos.

Para o caso em que a energia total $E > 0$, a partícula seguiria no sentido de x positivo, segundo a física clássica. Devido ao comportamento ondulatório das partículas, imaginamos ser possível termos reflexão desta onda em relação ao potencial. Tal hipótese é realmente possível segundo a Equação de Schrodinger.



Nestes problemas com $E > V(x)$, qualquer valor de energia é permitido (temos uma distribuição contínua para a energia) e a função de onda de uma onda plana não é limitada, ou seja, teremos um problema de convergência para a normalização da função de onda.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \longrightarrow \infty$$

Devemos, então considerar um pacote de onda de tamanho finito. Também podemos normalizar a função em termos do número de partículas N por unidade de comprimento, que definirá um fluxo de partículas.

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 dx = \int_a^b \rho dx = \int_a^b dN = N$$

Se este fluxo de partículas é enviado a barreira, teremos uma parcela delas sendo refletida (R) e outra sendo transmitida (T), de modo a termos uma conservação do fluxo incidente, ou seja:

$$R + T = 1$$

Vamos considerar, então, os coeficientes de reflexão R e o de transmissão T e verificar seu comportamento em função do valor do potencial V_0

$$R \equiv R(E, V_0)$$

$$T \equiv T(E, V_0)$$

Antes de iniciar este tratamento, devemos fazer algumas considerações sobre o pacote de onda a ser utilizado e questões de normalização. Claramente, se consideramos o problema como apresentado, temos uma onda inicial se propagando da esquerda para direita e que não satisfará a condição de convergência necessária para a normalização da função de onda resultante.

Densidade e corrente de probabilidade

Definimos a densidade de probabilidade para uma partícula quântica de massa m como:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

Podemos obter uma equação de continuidade para sistemas quânticos, como a equação já estudada para sistemas clássicos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

Onde $j(x, t)$ será a corrente de probabilidade que pode ser determinada usando:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\psi^*(x, t) \psi(x, t)] = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi$$

Usando que:
$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi \quad (\text{equação de Schrodinger})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\psi^*}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \right] - \frac{\psi}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi^* \right]$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right) =$$

$$= -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right)$$

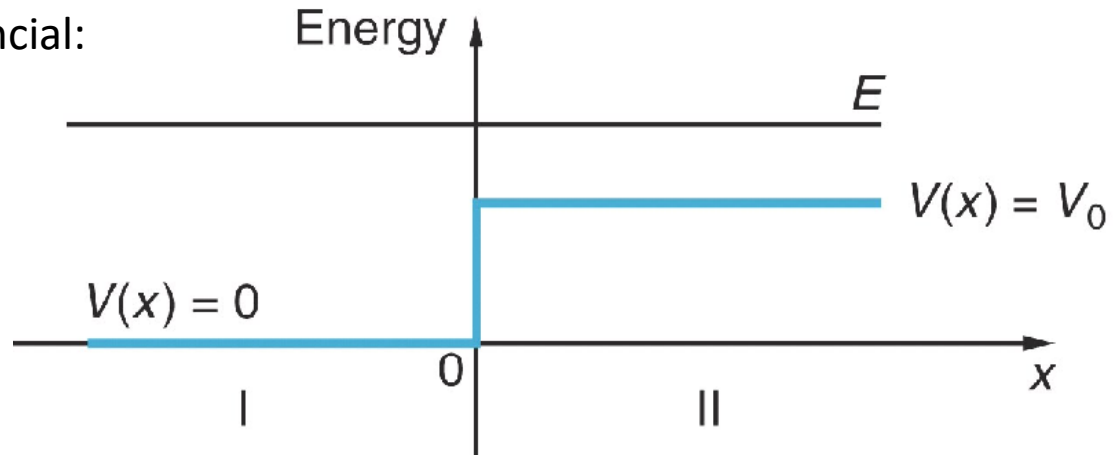
Portanto, obtemos que a corrente de probabilidade é dada por:

$$j(x, t) \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right)$$

Potencial Degrau

Vamos considerar o seguinte potencial:

$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } x < 0 \\ V_0, & \text{para } x > 0 \end{cases}$$



Caso $E > V_0$:

Região I: $x < 0$; $V(x) = 0$

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

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= -\frac{2m E}{\hbar^2} \psi(x) & k_1^2 &= \frac{2m E}{\hbar^2} \\ &= -k_1^2 \psi(x) \end{aligned}$$

A solução pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \\ &= \psi_{inc}(x) + \psi_{ref}(x) \end{aligned}$$

As escolhas para onda incidente e onda refletida foram feitas desse modo, pois quando inserimos a dependencia temporal nas função de onda temos:

$$\Psi_{inc}(x, t) = A e^{ikx - i\omega t}, \text{ para partícula que se move para a direita.}$$

$$\Psi_{ref}(x, t) = B e^{-ikx - i\omega t}, \text{ para partícula que se move para a esquerda.}$$

Região II: $x > 0$; $V(x) = V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$= -k_2^2 \psi(x)$$

$$k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}$$

$$= C e^{ik_2 x}$$

$$= \psi_{tra}(x)$$

Para obter as constantes, devemos aplicar as condições na fronteira entre I e II:

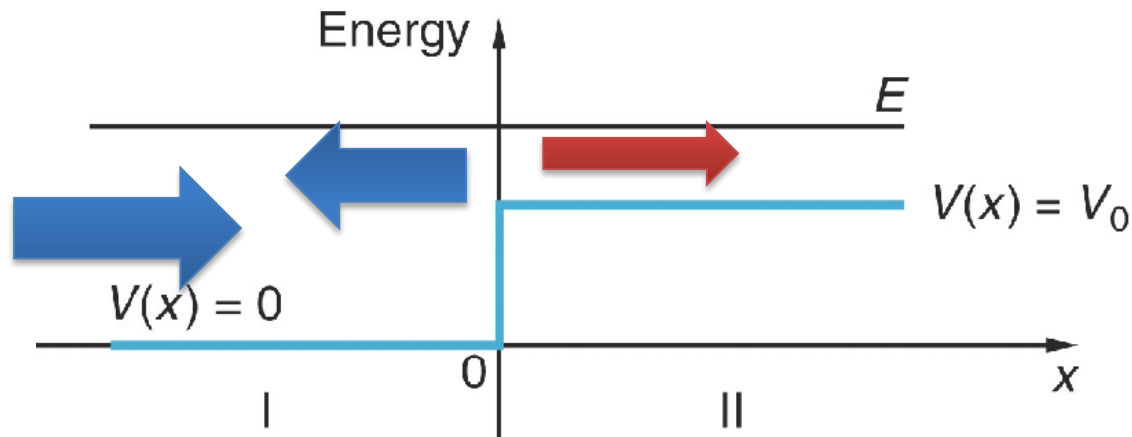
$$\begin{array}{lcl} \psi_I(0) & = & \psi_{II}(0) \\ \frac{d\psi_I}{dx}(0) & = & \frac{d\psi_{II}}{dx}(0) \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{lcl} A + B & = & C \\ k_1 A - k_1 B & = & k_2 C \end{array}$$

Podemos escrever B e C em termos da constante A:

$$\begin{array}{lcl} B & = & \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \\ C & = & \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \end{array}$$

Assim, as funções de onda são dadas por:

$$\begin{array}{lcl} \Psi_{inc}(x, t) & = & A e^{ik_1 x - i\omega t} \\ \Psi_{ref}(x, t) & = & B e^{-ik_1 x - i\omega t} \\ \Psi_{tra}(x, t) & = & C e^{ik_2 x - i\omega t} \end{array}$$



$$\begin{aligned}
 \Psi_{inc}(x, t) &= A e^{ik_1 x - i\omega t} & B &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \\
 \Psi_{ref}(x, t) &= B e^{-ik_1 x - i\omega t} \\
 \Psi_{tra}(x, t) &= C e^{ik_2 x - i\omega t} & C &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A
 \end{aligned}$$

Se considerarmos as correntes de probabilidades temos:

$$j_{inc} = |A|^2 v_1, \quad j_{refl} = -|B|^2 v_1, \quad j_{trans} = |C|^2 v_2$$

Onde: $v_j = \hbar k_j / m$ ($j = 1, 2$) (que tem unidade de velocidade)

O cálculo detalhado das correntes pode ser visto no Apêndice A (no final desta aula).

Na interpretação em termos de feixes de partículas, as correntes são proporcionais aos números por unidade de tempo de partículas incidentes, refletidas e transmitidas, respectivamente. Logo, as probabilidade de reflexão (R) e transmissão (T) são dadas por:

$$R = -\frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{inc}}} = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

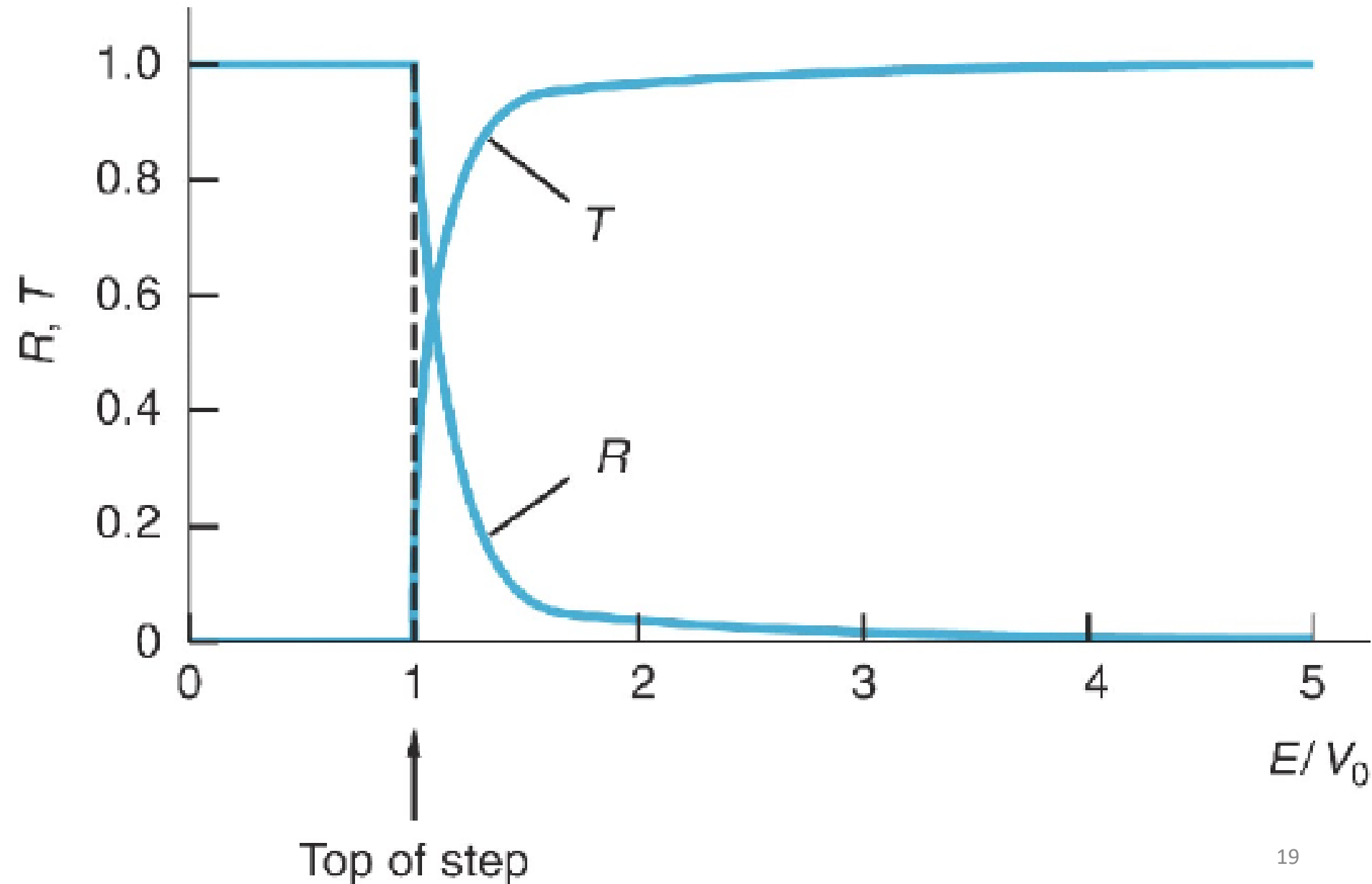
$$T = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{inc}}} = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{C}{A} \right|^2$$

Por fim, temos como coeficientes de Reflexão e Transmissão:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

$$T = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad T = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$



Analogia com Óptica

Podemos considerar as diferentes pontenciais como se “feitas” de materiais diferentes. Assim, podemos definir um “índice de refração relativo”:

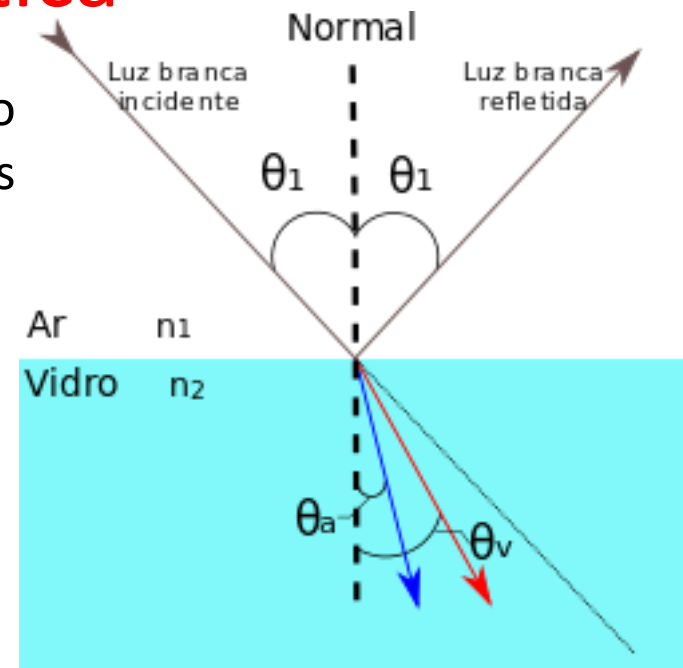
$$n = \frac{k_2}{k_1} = \frac{p_2}{p_1}$$

O que nos leva a:

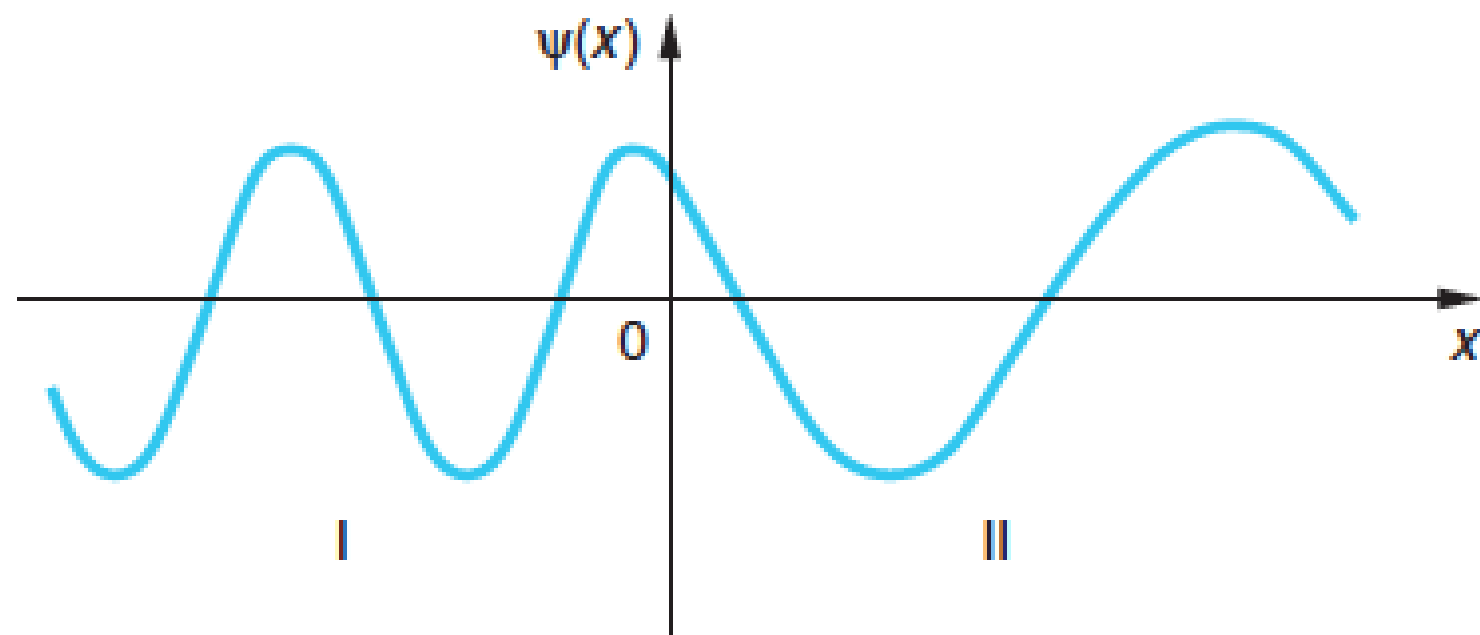
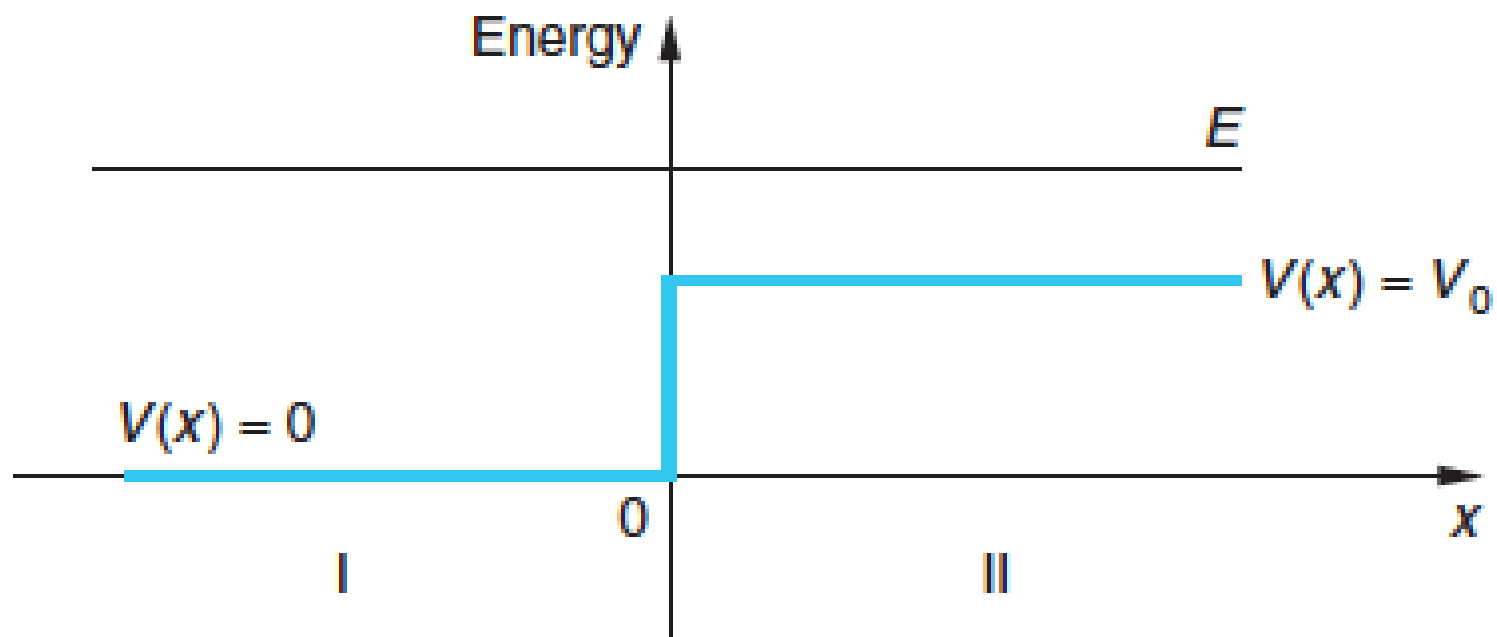
$$R = \left(\frac{n - 1}{n + 1} \right)^2 \quad T = \frac{4n}{(n + 1)^2}$$

Este é exatamente o resultado para um feixe de luz em incidência perpendicular a interface ($\theta_1 = 0$)

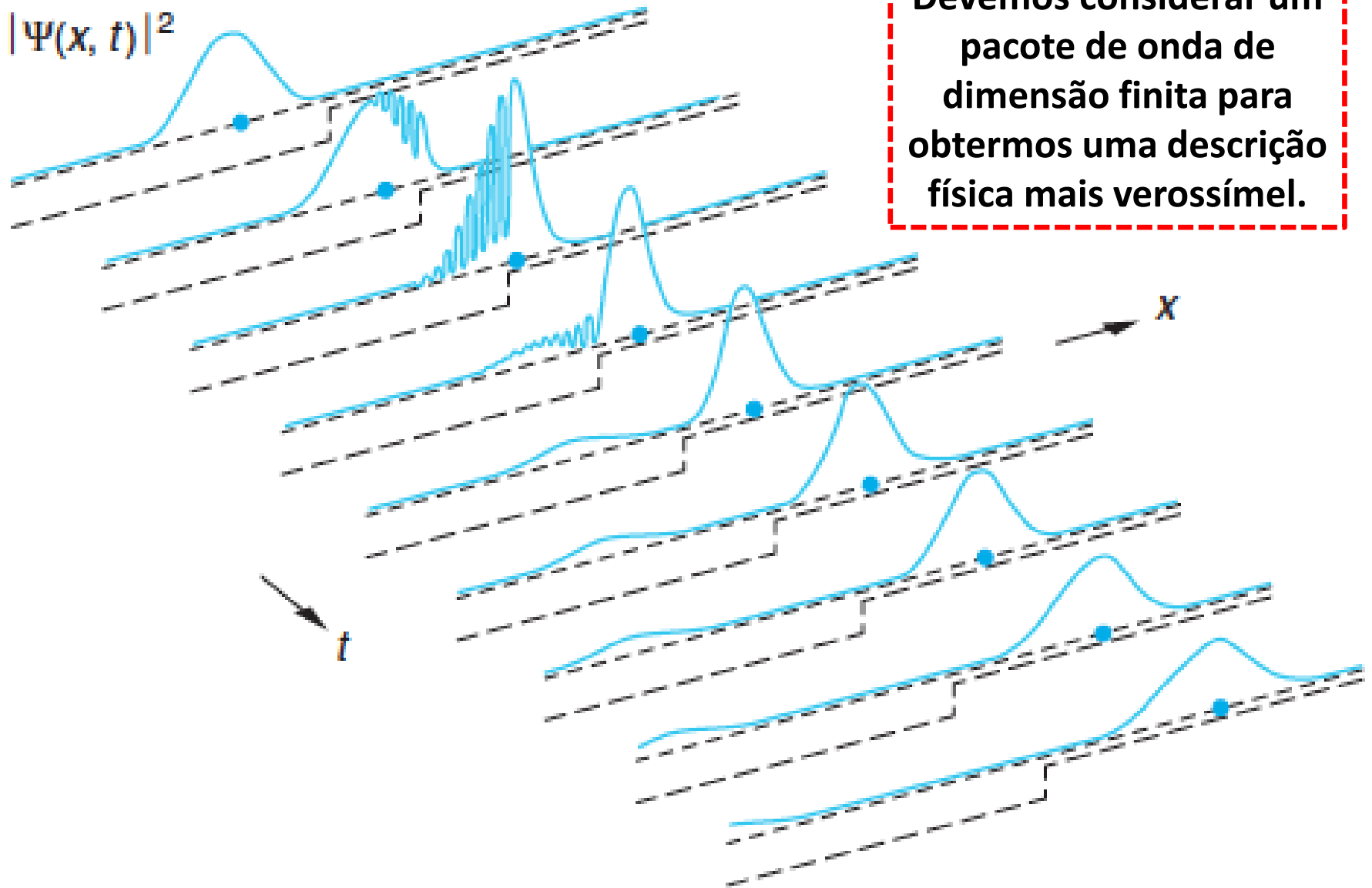
Novamente, observamos que um resultado obtido para um cálculo quântico nos resultado no resultado já conhecido pela óptica clássica para a luz.



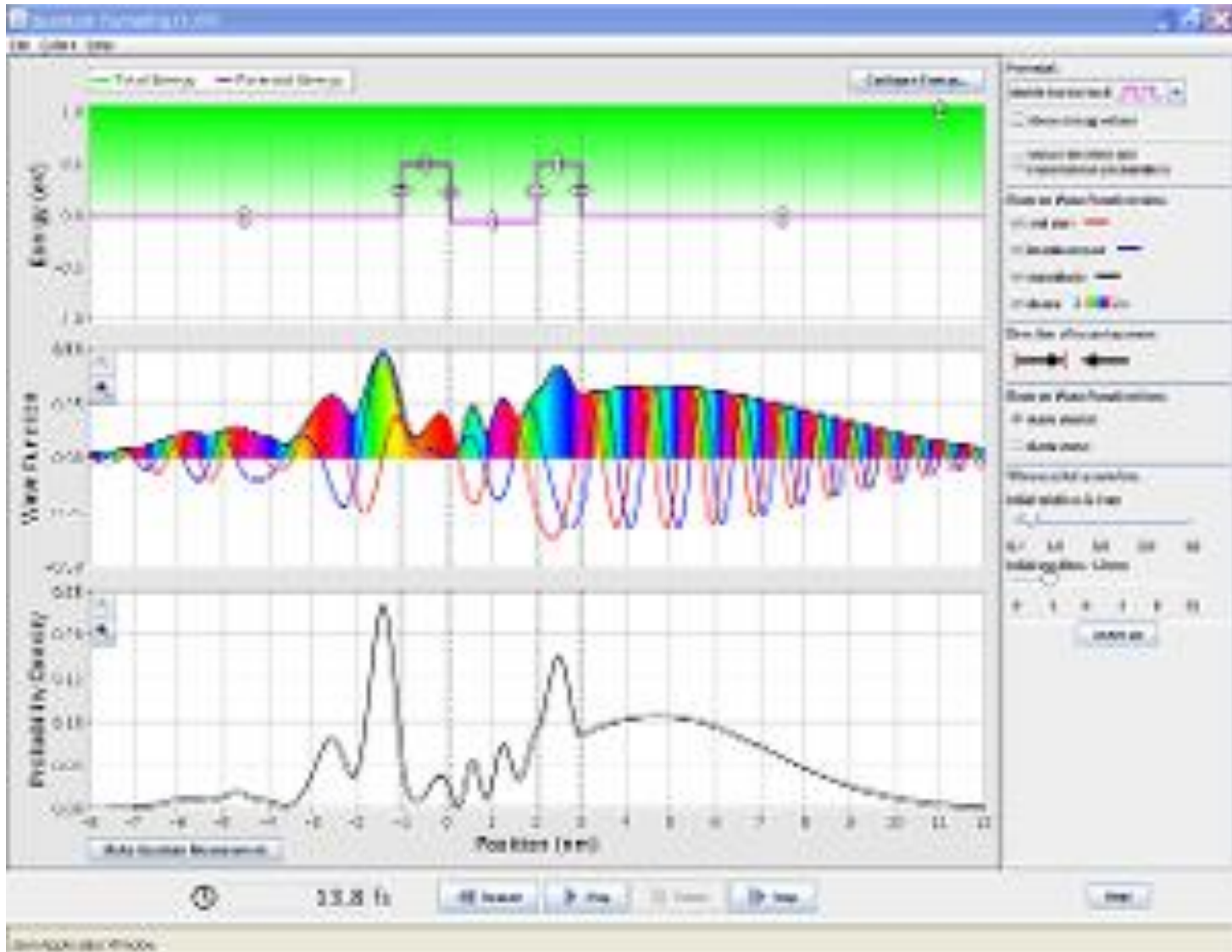
A refração da luz é descrita pelo princípio de Fermat: ***“A trajetória percorrida pela luz ao se propagar de um ponto a outro é tal que o tempo gasto em percorrê-la é um mínimo”***, que é um conceito variacional.



$$|\Psi(x, t)|^2$$



Uma simulação para “clarear” as ideias.

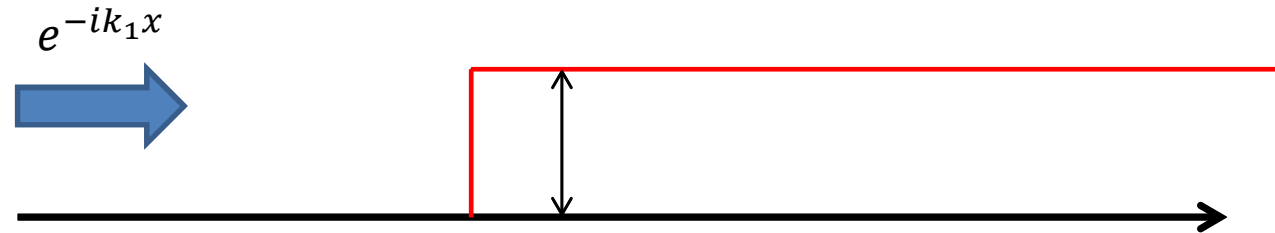


Considere uma partícula de massa m que se move da esquerda para direita inicialmente em uma região cujo potencial é nulo. No ponto, $x = 0$, essa partícula atinge uma barreira cuja energia potencial é metade da energia cinética inicial dessa partícula, essa barreira de potencial mantém seu valor para todo $x > 0$.

- A) Determine os coeficientes de Reflexão e transmissão para a partícula ao atingir a barreira.
 B) Qual seria o esboço do módulo ao quadrado da função de onda desta partícula em todo o espaço.

Energia cinética: E_k

Potencial: $E_k/2$



$$\left. \begin{aligned} A) \quad k_1^2 &= \frac{2mE_k}{\hbar^2} \\ k_2^2 &= \frac{2m\left(E_k - \frac{1E_k}{2}\right)}{\hbar^2} = \frac{mE_k}{\hbar^2} \end{aligned} \right\} k_1^2 = 2k_2^2$$

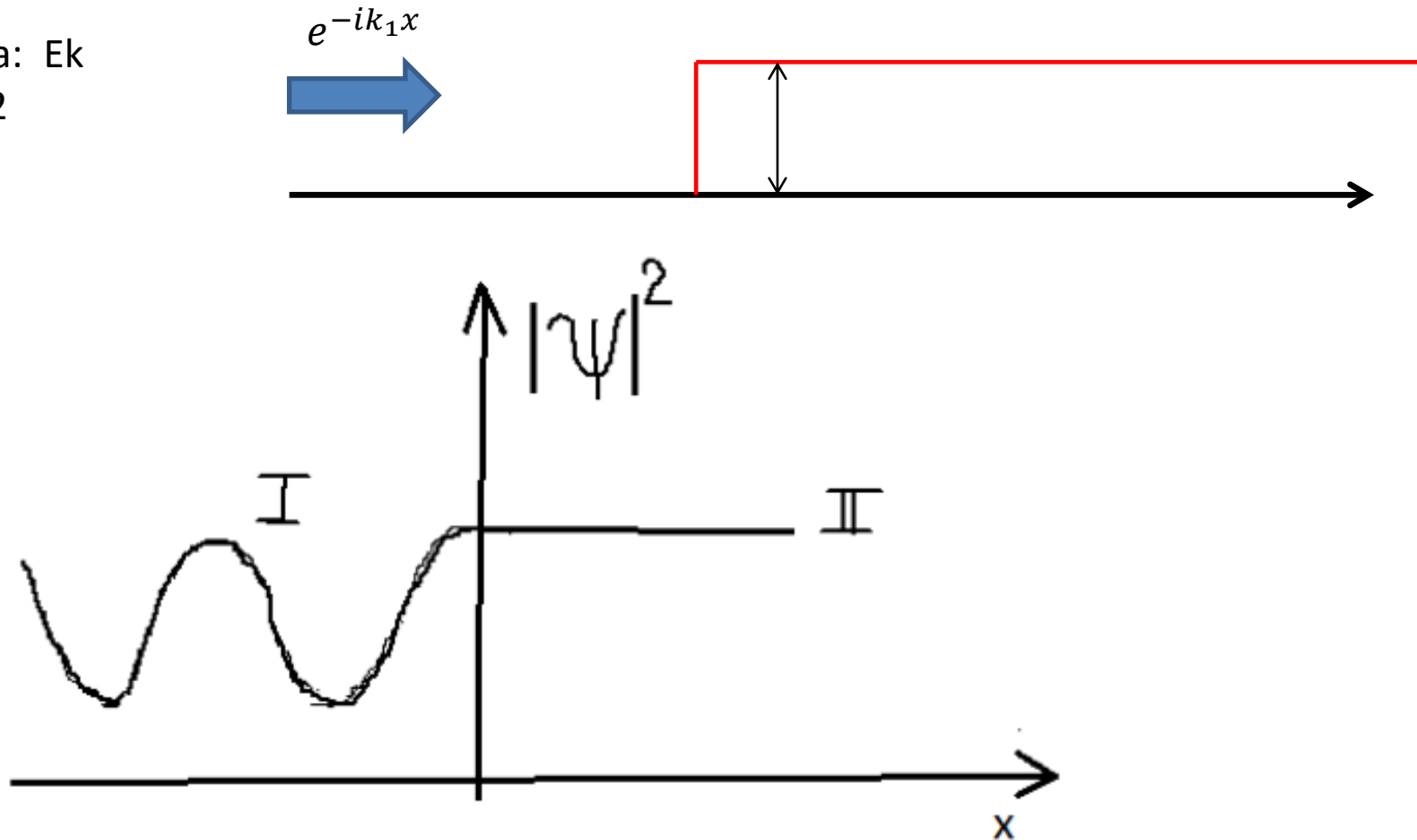
$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left(\frac{3 - 2\sqrt{2}}{3 + 2\sqrt{2}} \right)^2 \approx 0,029$$

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \left(\frac{4\sqrt{2}}{3 + 2\sqrt{2}} \right)^2 \approx 0,971$$

Considere uma partícula de massa m que se move da esquerda para direita inicialmente em uma região cujo potencial é nulo. No ponto, $x = 0$, essa partícula atinge uma barreira cuja energia potencial é metade da energia cinética inicial dessa partícula, essa barreira de potencial mantém seu valor para todo $x > 0$.

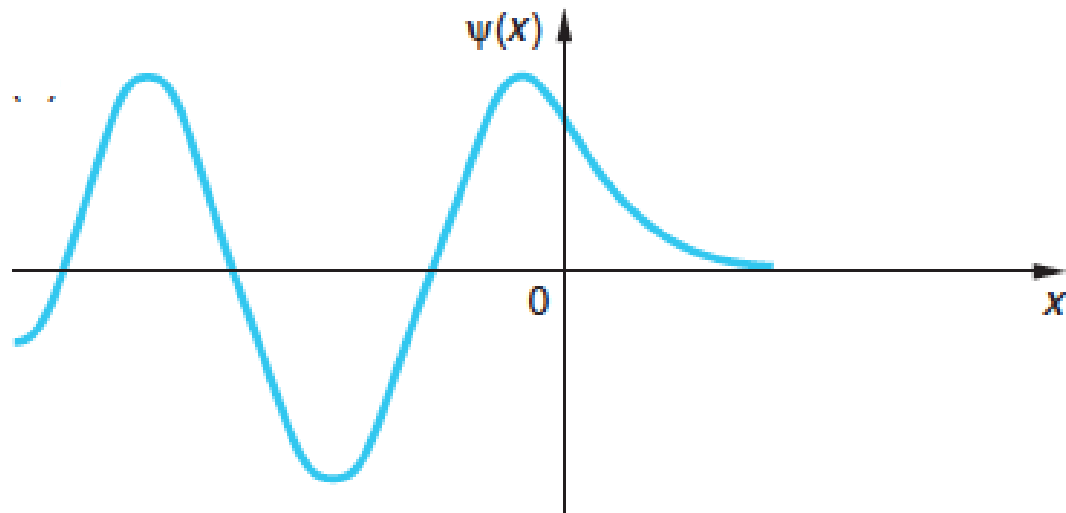
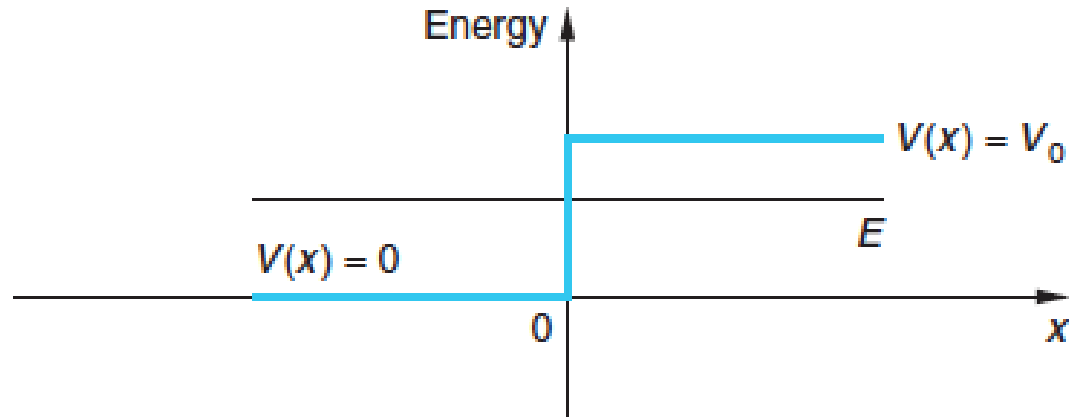
- A) Determine os coeficientes de Reflexão e transmissão para a partícula ao atingir a barreira.
B) Qual seria o esboço do módulo ao quadrado da função de onda desta partículas em todo o espaço.

Energia cinética: E_k
Potencial: $E_k/2$

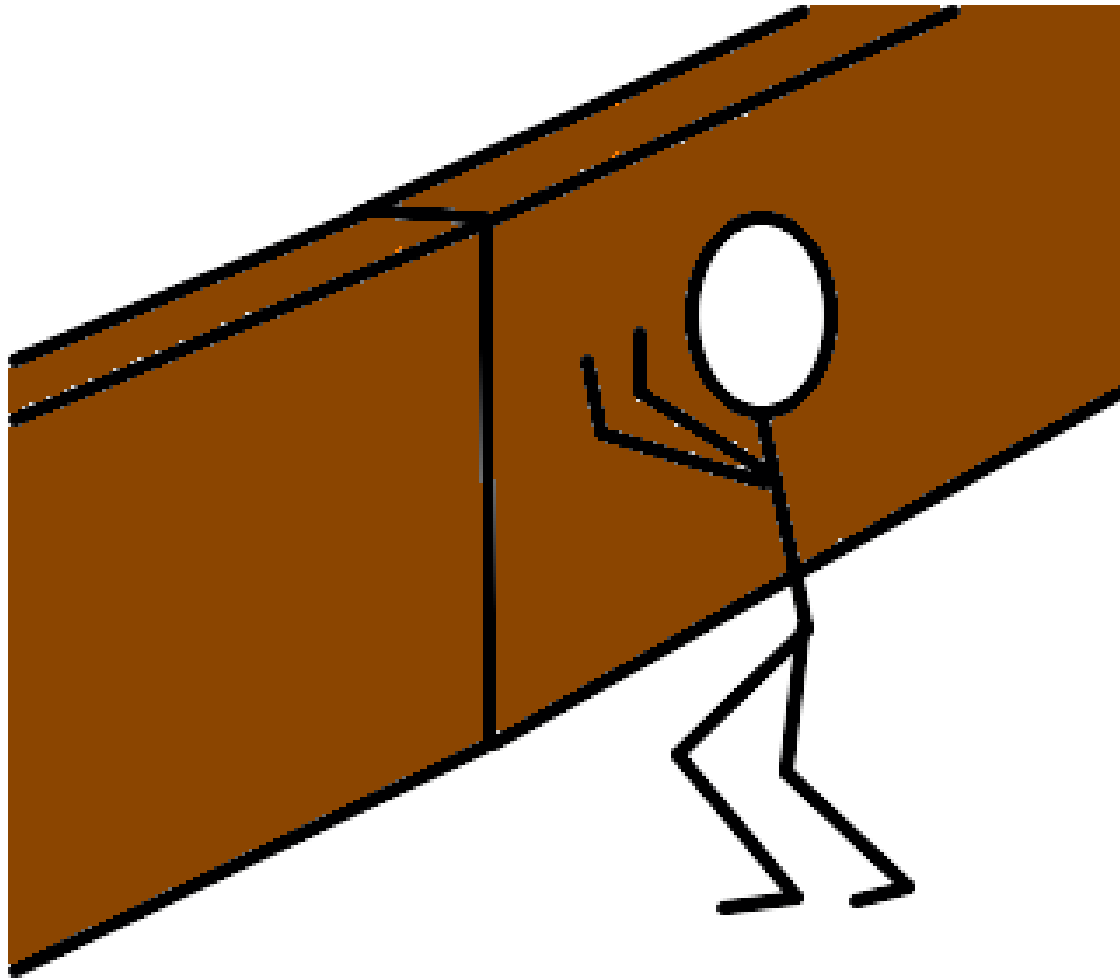


Exercício para casa ;-)

Resolva agora o caso quando $E < V_0$. Mostre que a função resultante para $x > 0$ é uma exponencial que decai para zero.



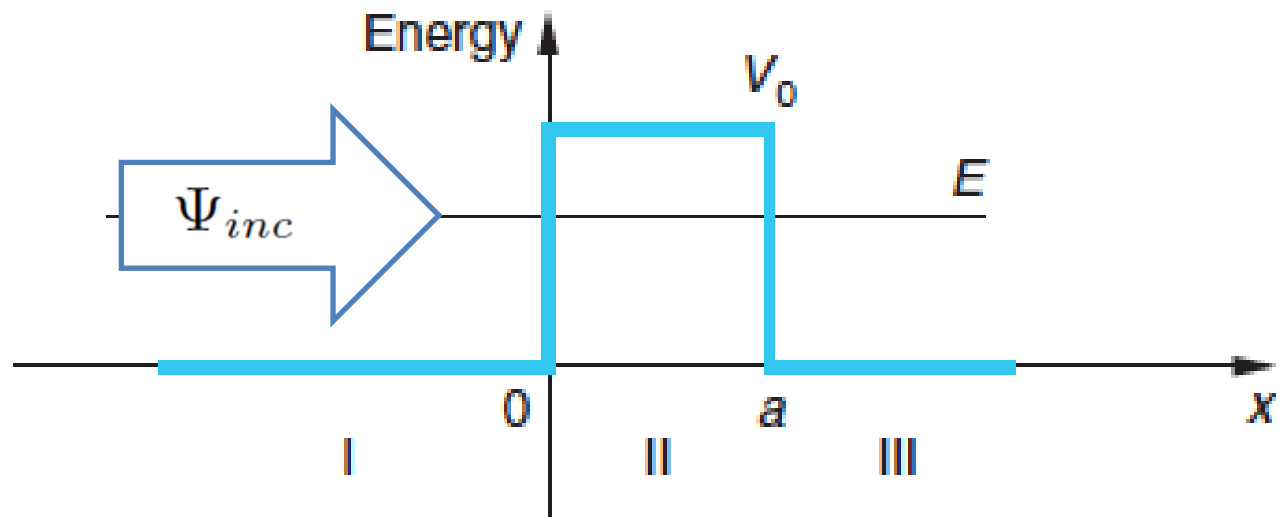
O Problema da Barreira de Potencial



Barreira de Potencial

Considere um potencial definido por:

$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } x < 0 \\ V_0 & \text{para } 0 \leq x < a, \\ 0 & \text{para } x \geq a \end{cases}$$



Para um feixe se movendo para a direita, podemos proceder como nas aulas anteriores e dividir o problema em 3 regiões a serem resolvidas.

Caso $E < V_0$

Região I: $x < 0$; $V(x) = 0$

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

$$\psi_I(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

$$k_1^2 = \frac{2m E}{\hbar^2}$$

Região II: $0 < x < a$; $V(x) = V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \alpha^2 \psi(x)$$

$$\alpha^2 = \frac{2m (V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x}$$

Região III: $x > a$; $V(x) = 0$

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

$$\psi_{III}(x) = F e^{ik_1 x} \quad k_1^2 = \frac{2m E}{\hbar^2}$$

Neste caso, o termo $e^{-ik_1 x}$ não foi incluído pois sabemos que o movimento das partículas é para a direita.

Agora, consideramos as condições de contorno nas fronteiras para encontrar o valor das constantes:

Fronteira entre I e II:

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0) & \frac{d\psi_I}{dx}(0) &= \frac{d\psi_{II}}{dx}(0) \\ A + B &= C + D & ik_1(A - B) &= -\alpha(C - D) \end{aligned}$$

Fronteira entre I e II:

$$\begin{aligned}\psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a) & \frac{d\psi_{II}}{dx}(a) &= \frac{d\psi_{III}}{dx}(a) \\ C e^{-\alpha a} + D e^{\alpha a} &= F e^{ik_1 a} & -\alpha (C e^{-\alpha a} - D e^{\alpha a}) &= ik_1 F e^{ik_1 a}\end{aligned}$$

Trabalhando as expressões obtidas, podemos escrever:

$$D = \left(1 + i \frac{k_1}{\alpha}\right) e^{(ik_1 - \alpha)a} \frac{F}{2}$$

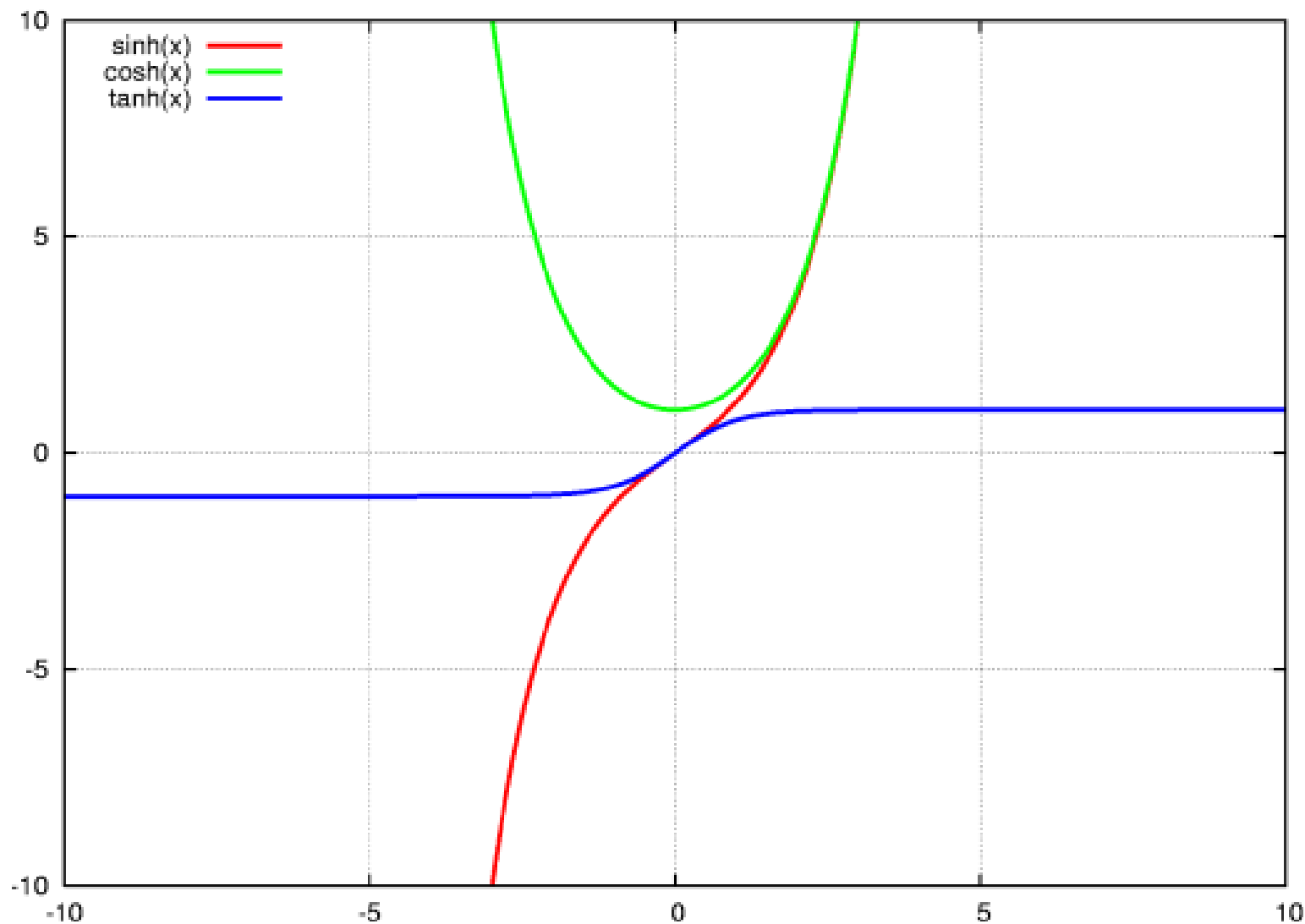
$$C = \left(1 - i \frac{k_1}{\alpha}\right) e^{(ik_1 + \alpha)a} \frac{F}{2}$$

**Faça estas deduções
em casa!**

$$B = -\frac{i}{2} \left(\left(\frac{k_1}{\alpha} + \frac{\alpha}{k_1} \right) \sinh(\alpha a) \right) e^{ik_1 a} F$$

$$A = \left(\cosh(\alpha a) + \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha}{k_1} - \frac{k_1}{\alpha} \right) \sinh(\alpha a) \right) e^{ik_1 a} F$$

Funções Hiperbólicas



$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} = \frac{e^{2x} - 1}{2e^x} = \frac{1 - e^{-2x}}{2e^{-x}}$$

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} = \frac{e^{2x} + 1}{2e^x} = \frac{1 + e^{-2x}}{2e^{-x}}$$

Para discutir o efeito de tunelamento, estamos interessados no coeficiente de transmissão que pode ser obtido do cálculo da corrente (fluxo de partículas) :

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

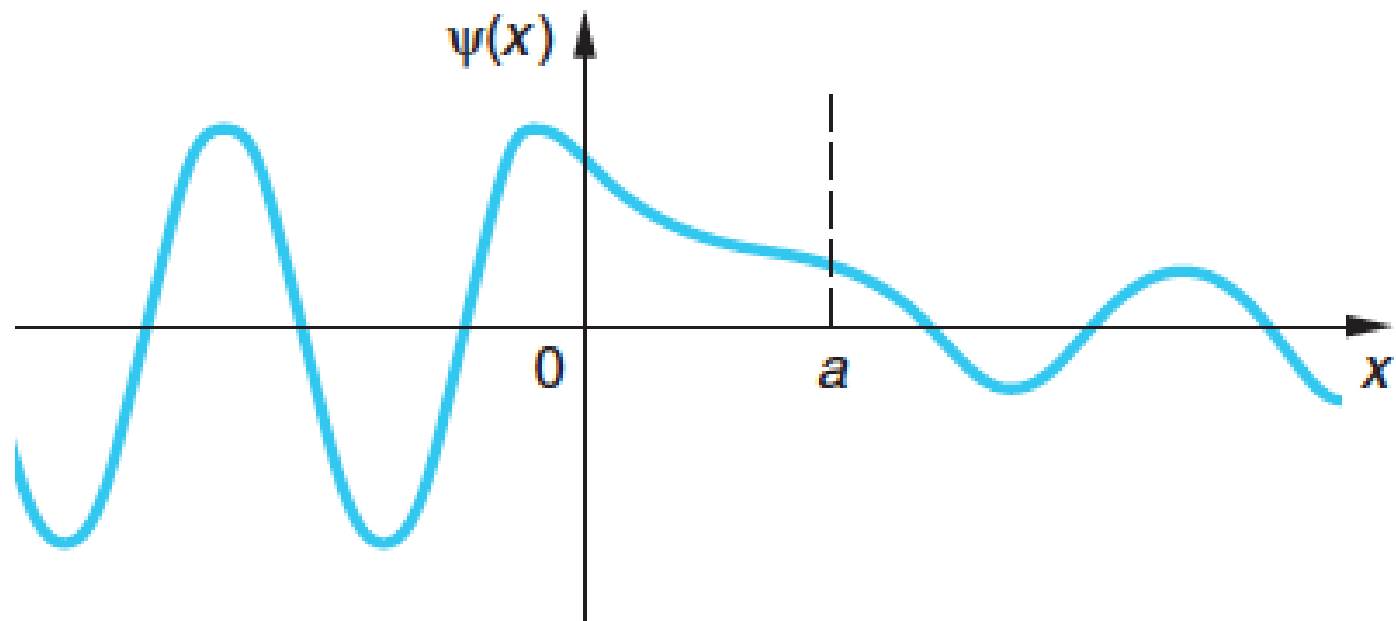
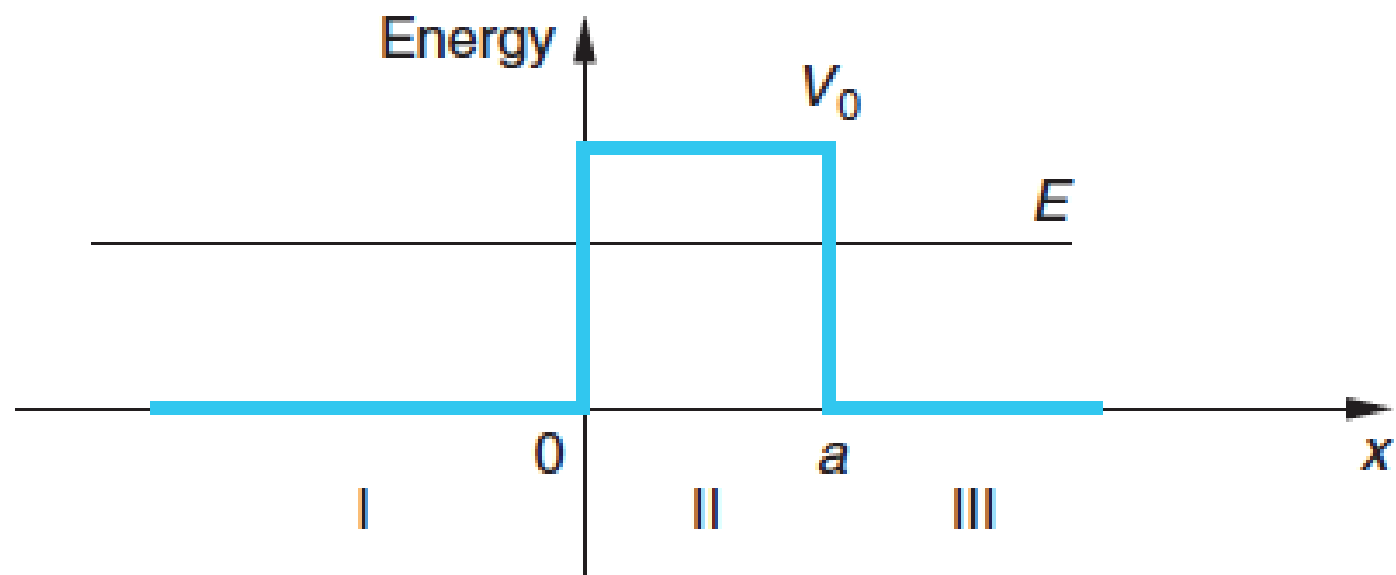
$$T = \left[1 + \frac{(k_1^2 + \alpha^2) \sinh^2(\alpha a)}{4k_1^2 \alpha^2} \right]^{-1}$$

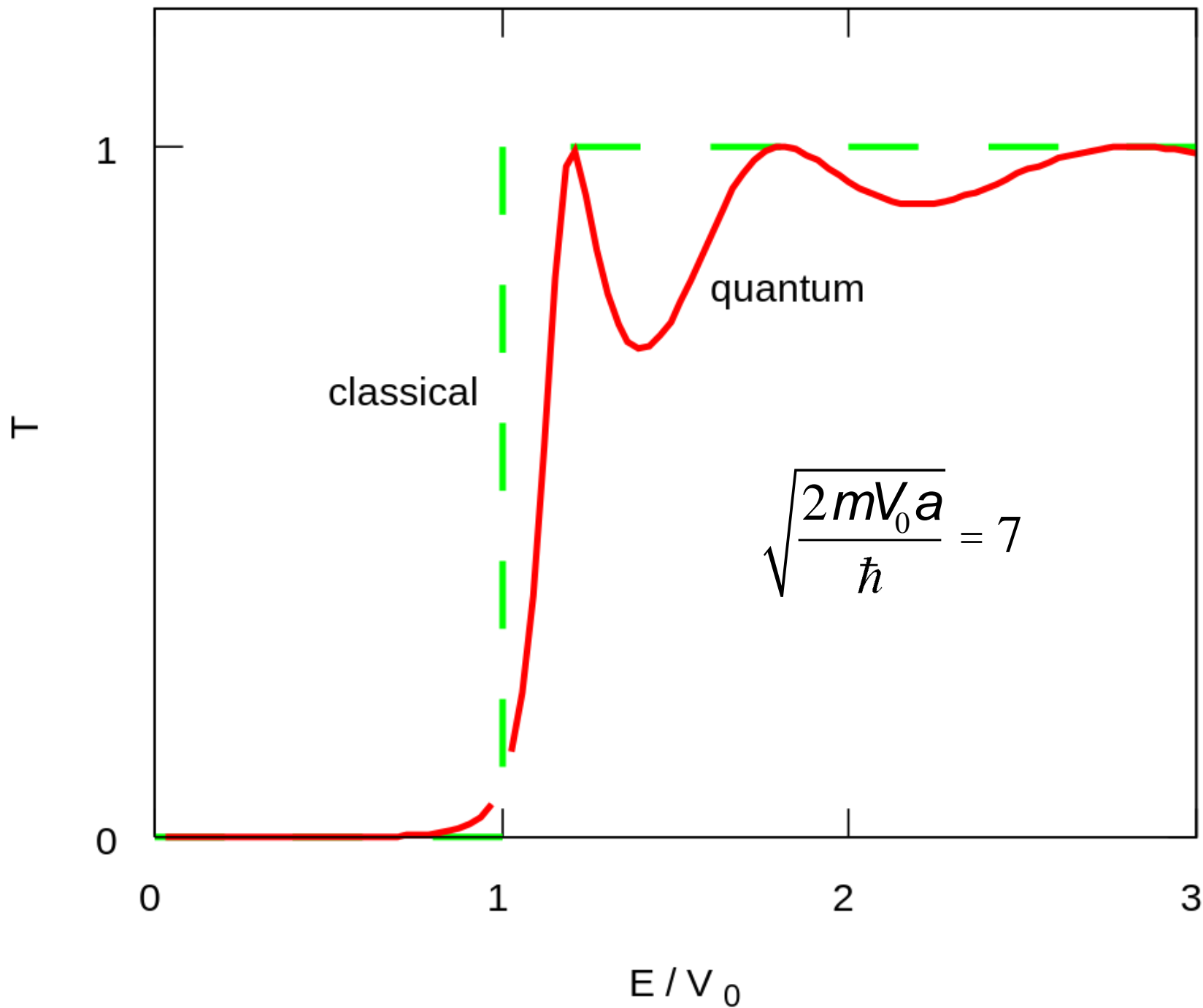
No caso de $\alpha a \gg 1$, podemos escrever uma expressão simples:

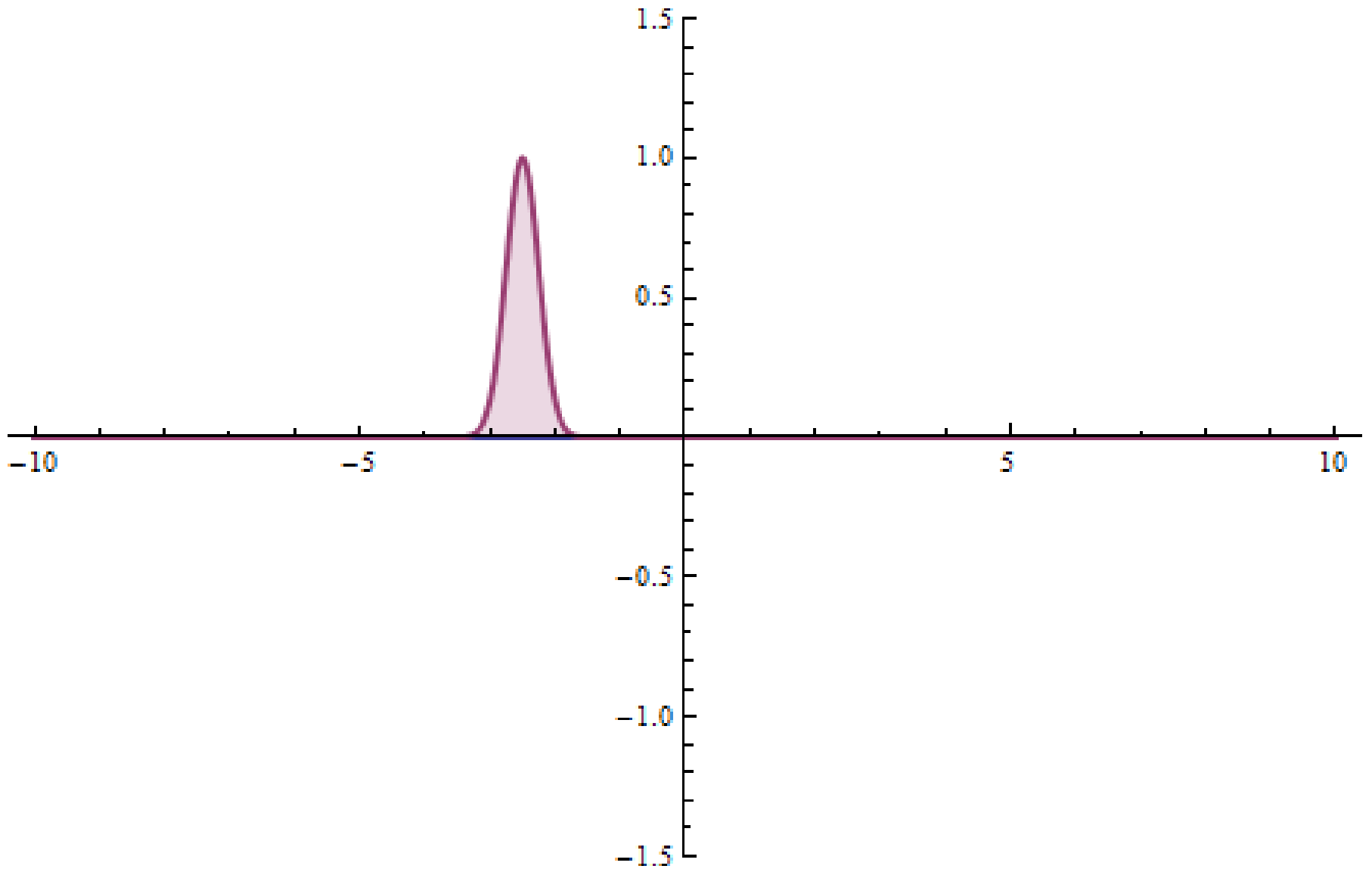
$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2\alpha a}$$

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

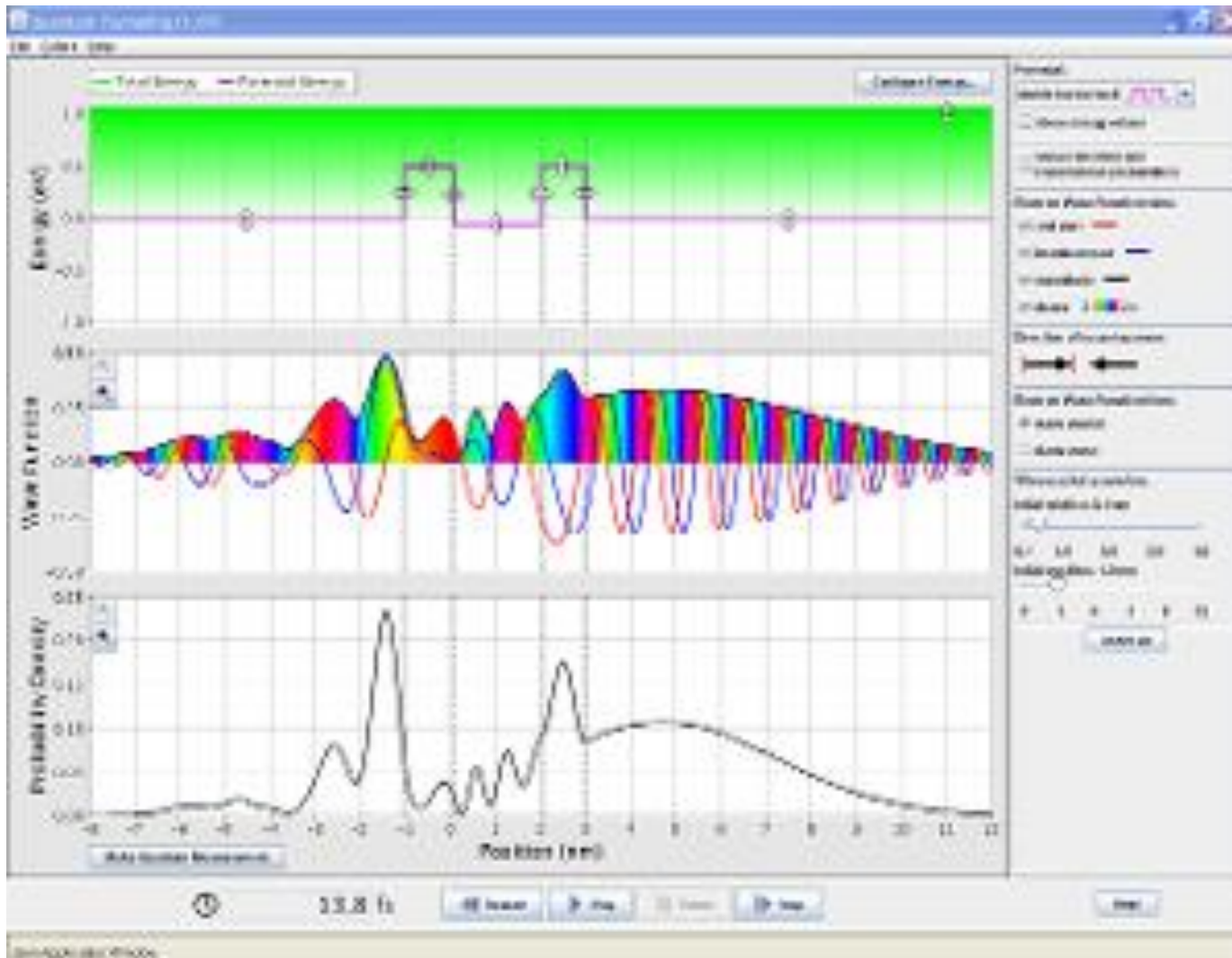
Veja que a transmissão de partículas, ou seja, o tunelamento depende da relação entre a energia (E), a largura (a) e a altura do potencial (V_0) da Barreira.



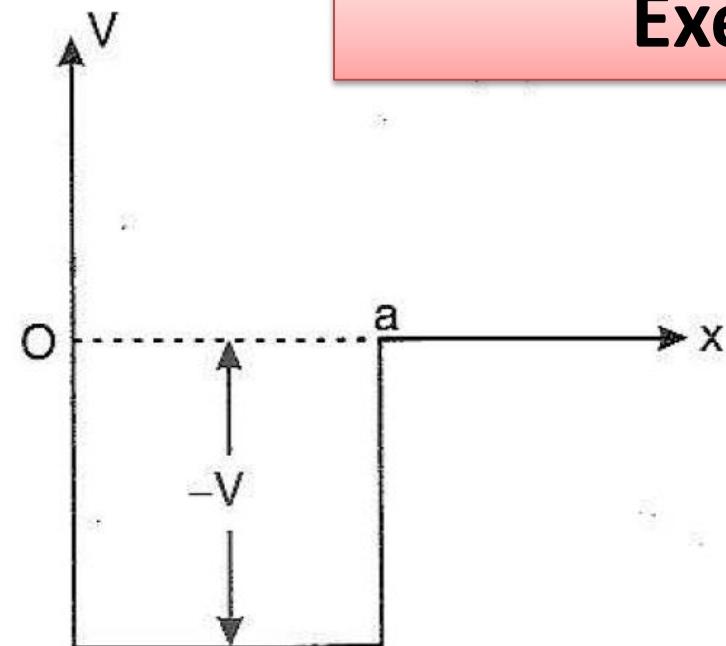




Também podemos usar este simulador para observar o
TUNELAMENTO!



Exercício para casa



$$\begin{aligned} V(x) &= \infty \quad (x < 0), \\ &= -V \quad (0 < x < a), \\ &= 0 \quad (x > a). \end{aligned}$$

onde $V > 0$.

Uma partícula de massa m está confinada, em uma dimensão, por um poço de potencial retangular, limitado à esquerda por uma barreira impenetrável, correspondendo ao potencial indicado ao lado. Responda:

- (a) Para $-V < E = -|E|$, escreva as soluções estacionárias de energia E da equação de Schrodinnger dentro e fora do poço de potencial.
- (b) Aplicando as condições de contorno, demonstre que os autovalres de energia são as raízes da equação

$$\operatorname{tg} \left[\frac{\sqrt{2m(V - |E|)}}{\hbar} a \right] = -\sqrt{\frac{V - |E|}{|E|}}$$

Faça as questões 18 a 25 da lista de exercícios 2

The Nobel Prize in Physics 1973

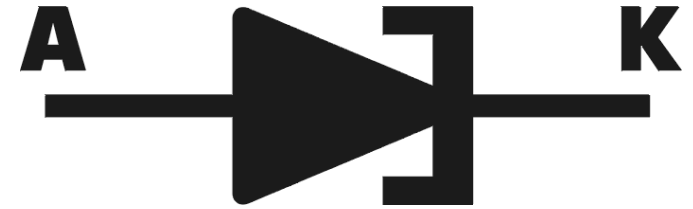
Leo Esaki, Ivar Giaever, Brian D. Josephson



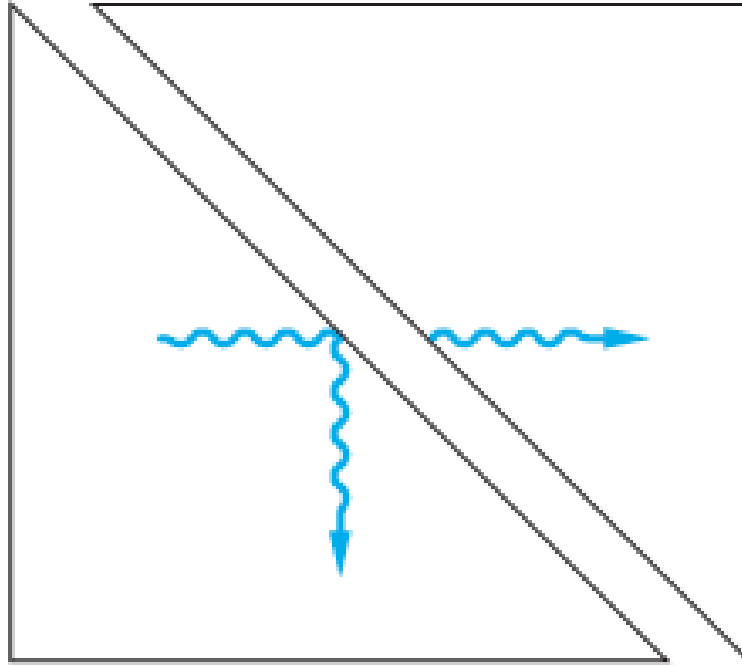
The Nobel Prize in Physics 1973 was divided, one half jointly to Leo Esaki and Ivar Giaever "for their experimental discoveries regarding tunneling phenomena in semiconductors and superconductors, respectively" and the other half to Brian David Josephson "for his theoretical predictions of the properties of a supercurrent through a tunnel barrier, in particular those phenomena which are generally known as the Josephson effects".

Diodo Túnel

O diodo túnel é muito parecido com os diodos convencionais, que são diodos de junção PN. O diodo túnel recebe seu nome por conta do tunelamento quântico. Estes diodos tem alta dopagem (alto nível de impureza) nas duas camadas, tanto a P quanto a N. Por conta desse alto nível de a região da camada de depleção se torna muito estreita quando comparada aos diodos usuais, distorcendo a curva característica de agindo como se tivesse uma “resistência negativa”, que permite uma velocidade de operação altíssima, logo os diodos túnel podem ser utilizados em circuitos que oscilam em alta frequência, da ordem de 1Ghz, gendo muito comuns na construção de osciladores.



Barreira óptica



O Efeito de tunelamento pode ser observado até mesmo com 2 prismas e um laser. No primeiro prisma é esperado se observar a reflexão total da luz e, portanto, não teríamos luz sendo transmitida. Ao se colocar próximo um segundo prisma, criamos uma barreira de potencial (o espaço preenchido pelo ar entre os prismas) e como esperado pelos resultados da física quântica podemos ver luz sendo transmitida através do segundo prisma. Este efeito também é denominado **frustração da reflexão total**.

Tunelamento da luz

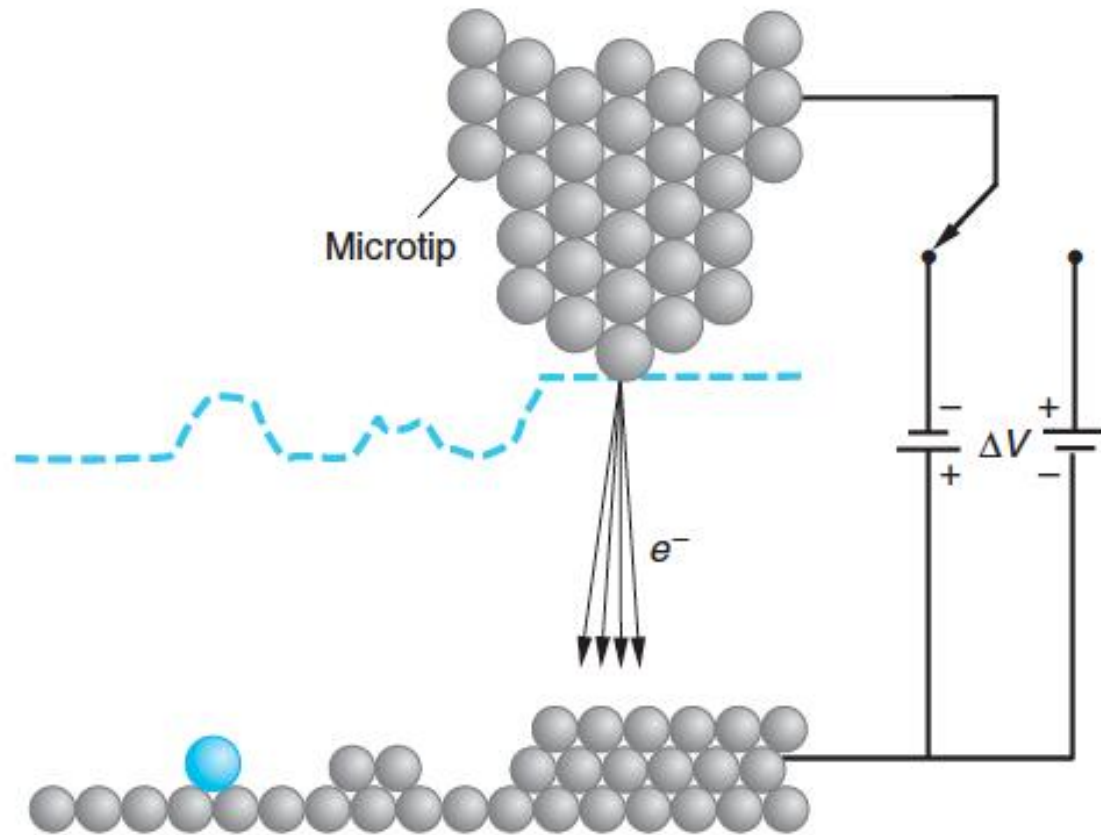
Em óptica esse efeito é chamado **Reflexão Interna Total Frustrada**

Microscópio de Tunelamento

O microscópio de tunelamento (STM) é um dispositivo que usa o tunelamento para criar imagens de superfícies com resolução comparável ao tamanho de um único átomo.

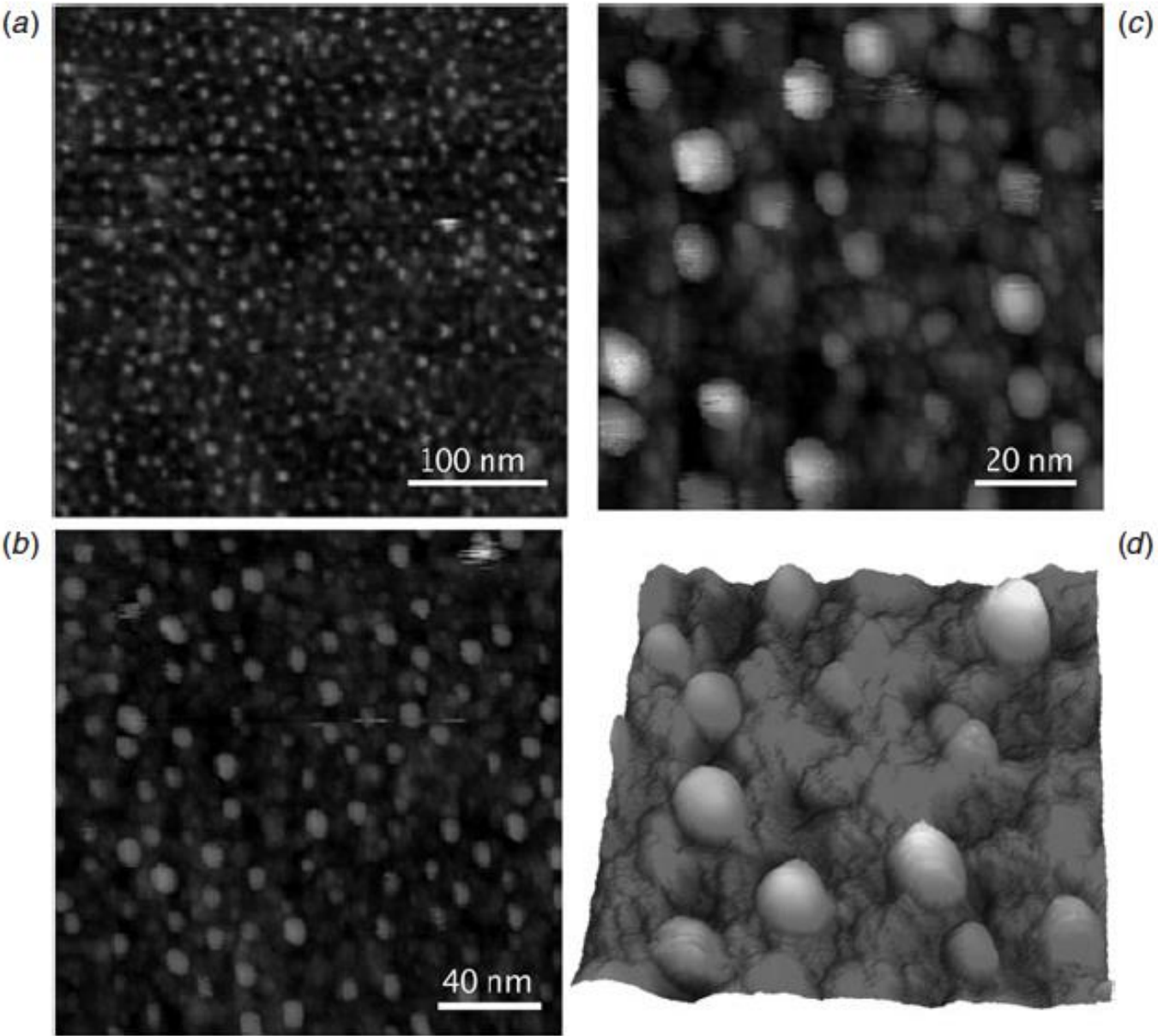
Uma pequena sonda com uma ponta muito fina faz um escaneamento muito perto da superfície de uma amostra. Uma corrente de tunelamento é mantida entre a superfície e sonda; a corrente é muito sensível à altura da barreira e a posição vertical da sonda é ajustada em função da corrente medida.

O movimento vertical da sonda segue o contorno da superfície da amostra, uma imagem da superfície pode ser obtida. Essa foi a técnica usada para observar os “currais quânticos” apresentados na aula 8.

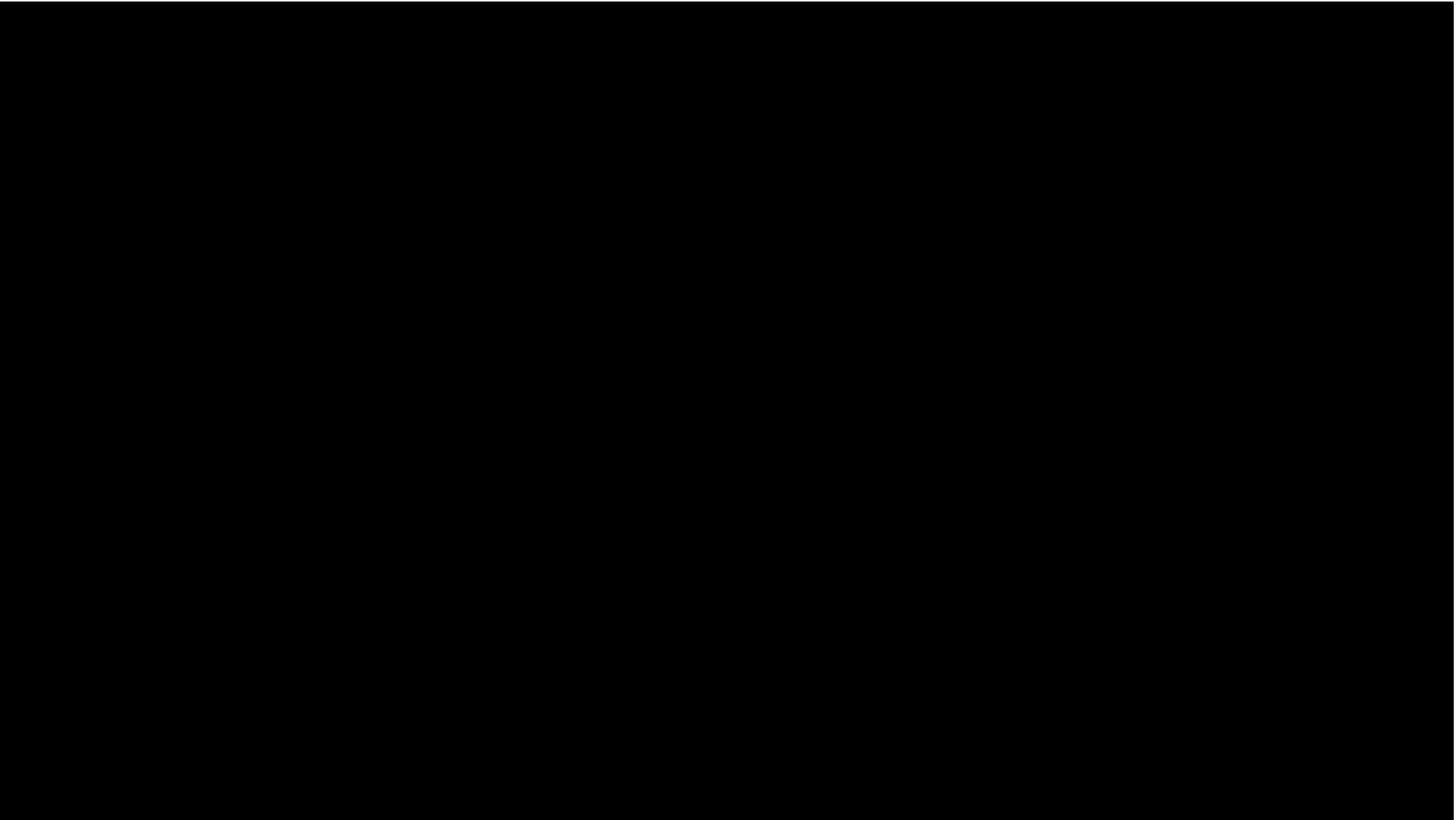


Uma mudança de 0,5 nm na largura da barreira pode modificar a corrente de tunelamento de um fator 10.000.

Room temperature UHV-STM images of gold (Au) nanoparticles supported on TiC after annealing at 500°C. Images are (a) 375 nm \times 375 nm, (b) 200 \times 200 nm, and (c) 100 \times 100 nm. (d) A 3-D image of a 70 nm \times 70 nm section of (c). [The authors thank Beatriz Roldán Cuenya for permission to use these STM images.]



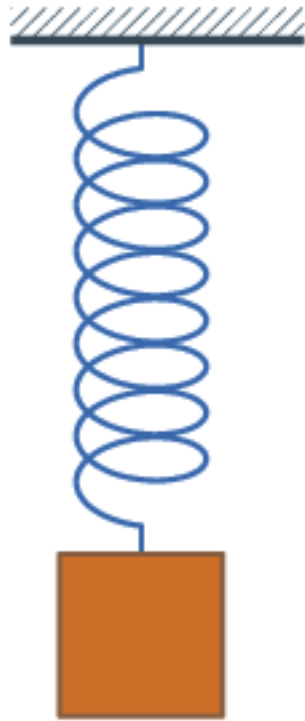
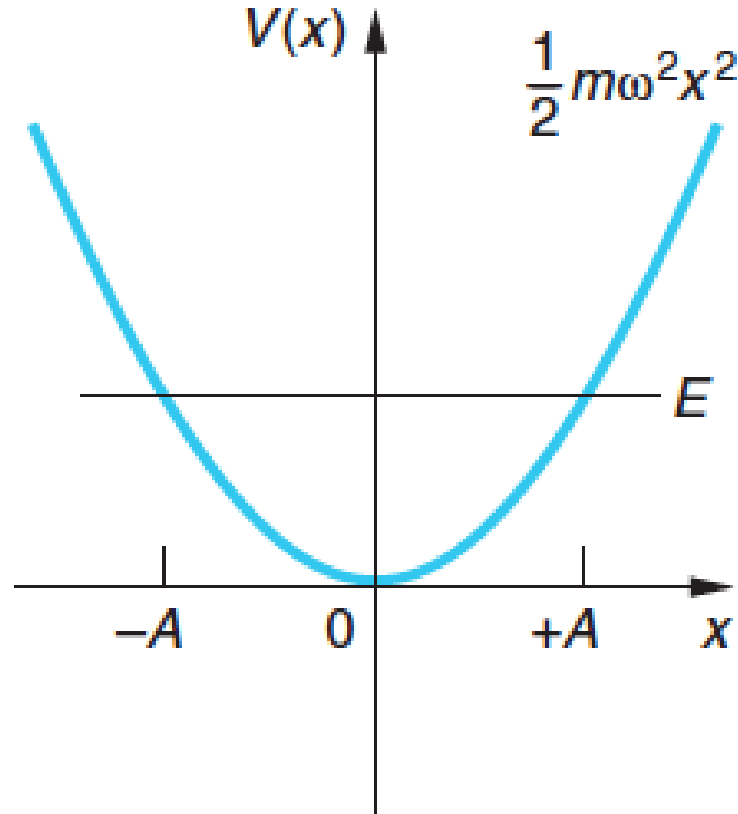
Descrição no IMDb: https://www.imdb.com/title/tt2884148/?ref=fn_al_tt_1



Para ver como o filme foi feito: <https://www.youtube.com/watch?v=xA4QWwaweWA>

Na próxima aula, estudaremos o caso do **Oscilador Harmônico Quântico**

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$



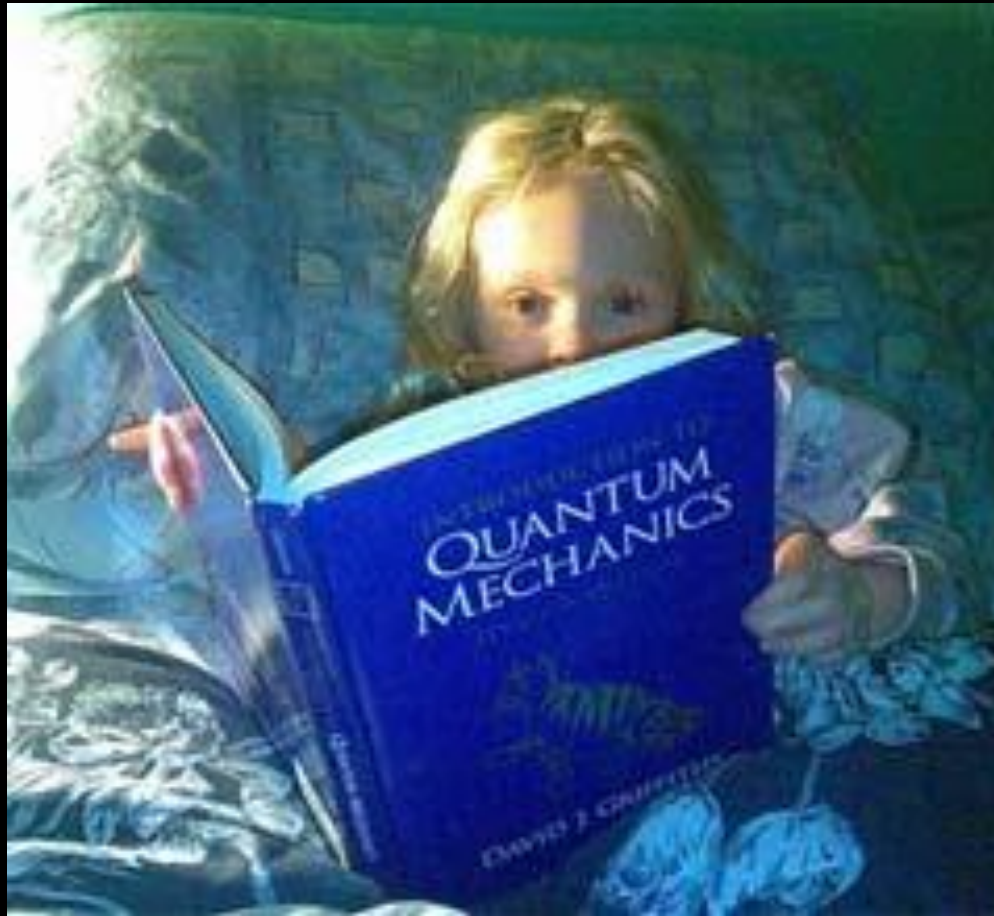
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

Na aula de hoje (12/11/19)

- Potenciais simples: potenciais degraus;
- Reflexão, Transmissão de Ondas Quânticas
- Tunelamento.
- Tempo de tunelamento em uma barreira (revisitando o princípio de incerteza de Heisenberg).
- Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.

Na próxima aula (14/11/19)

- Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico.
- Armadilhas de íons e princípios de informação quântica.
- Requisitos essenciais de um computador quântico.
- Potenciais em mais de uma dimensão.



Perguntas, dúvidas, comentários, aflições?

Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 1)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
1	24/09 (Ter)	1	Apresentação a disciplina; Evidências experimentais da teoria quântica : radiação do Corpo Negro.
	---	---	-----
2	01/10 (Ter)	2	Evidências experimentais da teoria quântica: efeito foto-elétrico, efeito Compton, espectros atômicos
	03/10 (Qui)	3	Modelos atômicos, Modelo quântico de Bohr, Experimento de Franck-Hertz, Hipótese de de Broglie e ondas de matéria.
3	08/10 (Ter)	4	Revisitando ondas; interferência (fótons e elétrons) e interferômetros; dualidade onda-partícula e princípio de complementaridade; Princípio de incerteza de Heisenberg.
	---	---	-----
4	15/10 (Ter)	5	Interferômetros e fótons únicos, polarização da luz, postulados da física quântica e notação de Dirac
	17/10 (Qui)	6	Relação entre estados quânticos e funções de onda. Espaços discretos e contínuos na física quântica. Probabilidade e interpretações em Física Quântica. Gato de Schrodinger. e estados emaranhados.
5	22/10 (Ter)	7	Mecânica Quântica Ondulatória, Determinação eurística da Equação de Schrodinger, propriedades da equação de Schrodinger e funções de ondas.
	---	---	-----
6	29/10 (Ter)	P1	Primeira Avaliação
	31/10 (Qui)	8	Potenciais simples: poço de potencial, Espaço de estados e transições entre estados de energia; Elétrons em currais quânticos e o

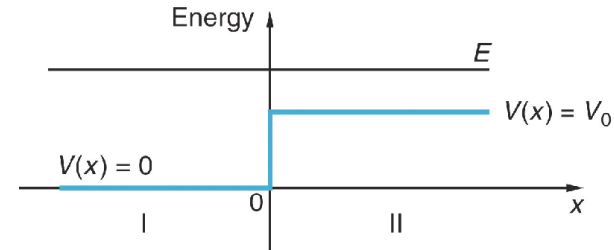
Cronograma e conteúdo programático da disciplina (parte 2)

Semana	Dia	Aula	Conteúdo
7	05/11 (Ter)	9	Potenciais simples: poço quadrado finito; operadores e valores médios de observáveis; pontos quânticos e suas aplicações.
	---	---	-----
8	12/11 (Ter)	10	Potenciais simples: potenciais degraus, reflexão, Transmissão de Ondas, Tunelamento. Tempo de tunelamento em uma barreira. Microscópios de tunelamento e mapeamento de átomos e moléculas.
	14/11 (Qui)	11	Potenciais simples: Oscilador Harmônico Quântico. Armadilhas de íons e princípios de informação quântica. Requisitos essenciais de um computador quântico.
9	19/11 (Ter)	12	Equação de Schrodinger em três dimensões: O cubo quântico (coordenadas cartesianas), O átomo de Hidrogênio (coordenadas esféricas), Separação de variáveis e a quantização de Momento Angular e Energia.
	---	---	-----
10	26/11 (Ter)	13	Funções de ondas do átomo de Hidrogênio; Orbitais; Significado físico dos números quânticos atômicos. Imagens, Abstrações e Interpretações.
	28/11 (Qui)	14	Introdução (noções gerais) aos Átomos de muitos elétrons, spin (quarto número quântico atômico) e tabela periódica. O fim de um começo.
11	03/12 (Ter)	P2	Segunda Avaliação da Disciplina
	---	---	-----
12	10/12 (Ter)	Psub\REC	Avaliação Substitutiva ou Avaliação de Recuperação
13			
	14 a 21/9		Lançamento de conceitos e faltas

Apêndice A

Para a determinação dos coeficientes de reflexão e transmissão, devemos calcular o fluxo de partículas associada a cada uma das ondas. Vamos considerar o problema resolvido nesta aula.

$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } x < 0 \\ V_0, & \text{para } x > 0 \end{cases}$$



Em ambas as regiões a energia deve ser conservada. Portanto, a frequência deve ser a mesma nas duas regiões:

$$\Psi_{inc}(x, t) = A e^{ik_1 x - i\omega t}$$

$$\Psi_{ref}(x, t) = B e^{-ik_1 x - i\omega t}$$

$$\Psi_{tra}(x, t) = C e^{ik_2 x - i\omega t}$$

Observe que o número de onda não é o mesmo na região I e II. A partir da equação de Schrodinger podemos definir uma lei de conservação expressa por:

$$\frac{\partial}{\partial x} j + \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0$$

Esta é a lei de continuidade, como vista, por exemplo, em fen. Eletromagnéticos.

Na lei de continuidade, temos a densidade (ρ) e a corrente (j) de partículas, definidas por:

$$j = -i\frac{\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right)$$
$$\rho = \Psi^* \Psi$$

A determinação destas expressões pode ser encontrada em texto de mecânica quântica mais avançados. Determinando a corrente na região II:

$$j_{II}(x) = -i\frac{\hbar}{2m} \left(\Psi_{II}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{II} - \Psi_{II} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{II}^* \right)$$
$$= \frac{\hbar k_2}{m} |\Psi_{II}|^2$$
$$= \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2$$

Lembrando, que $|C|^2$ é o número de partículas/unidade de comprimento na região II.

Neste caso, $j_{||}$ defini o número de partículas que atravessa $x=0$ por unidade de tempo. Devemos ter a conservação destas partículas através do degrau, ou seja

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x} j \, dx = - \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial t} \rho \, dx$$

$$j_{II}(\varepsilon) - j_I(-\varepsilon) = \frac{d}{dt} \left[\int_{-\varepsilon}^0 |\Psi_I|^2 \, dx + \int_0^{+\varepsilon} |\Psi_{II}|^2 \, dx \right]$$

Tomando, ε tendendo a zero. Temos:

$$j_I(0) = j_{II}(0)$$

Na região I, nós temos:

$$\Psi_I(x) = \Psi_{inc}(x) + \Psi_{ref}(x)$$

Assim, podemos determinar a corrente na região, como segue:

$$\begin{aligned}
j_I(x) &= -i\frac{\hbar}{2m} \left(\Psi_I^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_I - c.c \right) \\
&= -i\frac{\hbar}{2m} \left[\left(\Psi_{inc}^* + \Psi_{ref}^* \right) \frac{\partial}{\partial x} (\Psi_{inc} + \Psi_{ref}) - c.c \right] \\
&= -i\frac{\hbar}{2m} \left[\Psi_{inc}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{inc} + \Psi_{ref}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{ref} - c.c \right] \\
&= j_{inc}(x) - j_{ref}(x)
\end{aligned}$$

Acima, definimos j_{inc} (incidente) e j_{ref} (refletida), ambas positivas.

$$\begin{aligned}
j_{inc}(x) &= -i\frac{\hbar}{2m} \left[\Psi_{inc}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{inc} - c.c \right] \\
&= \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 > 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 j_{ref}(x) &= i \frac{\hbar}{2m} \left[\Psi_{ref}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{ref} - c.c \right] \\
 &= \frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 > 0
 \end{aligned}$$

Sendo, $j_{||} = j_{trans}$, temos pela lei de conservação:

$$\begin{aligned}
 j_{inc}(x) &= j_{ref}(x) + j_{tra}(x) \\
 \implies 1 &= \frac{j_{ref}(x)}{j_{inc}(x)} + \frac{j_{tra}(x)}{j_{inc}(x)} \\
 &= R + T
 \end{aligned}$$

Portanto:

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{j_{ref}(x)}{j_{inc}(x)} \\
 &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{j_{tra}(x)}{j_{inc}(x)} \\
 &= \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}
 \end{aligned}$$