Potenciais Unidimensionais

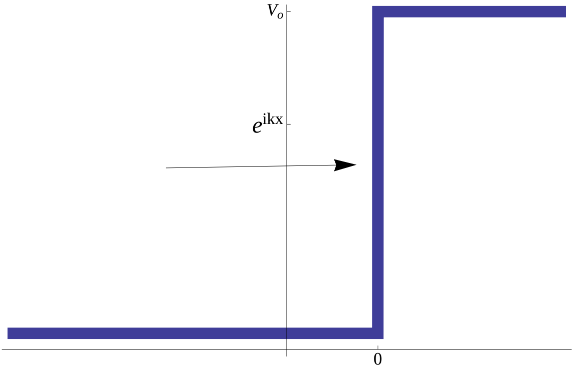
Ney Lemke

Mecânica Quântica

2011

Outline

Barreira de Potencial



Barreira de Potencial

- Discutir Importância
- Análogo Clássico
- Análogo Ótico

Barreira de Potencial $E > V_o$

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

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_o]u = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad q^2 = \frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2}$$

Solução

$$x < 0$$

$$u(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}$$

$$j = \frac{\hbar}{2m}\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right]$$

$$j = \frac{\hbar k}{m}\left[1 - |R|^2\right]$$

Solução

$$x > 0$$

$$u(x) = Te^{iqx}$$

$$j = \frac{\hbar}{2m} q |T|^2$$

Condições sobre u

Como determinar R e T?

- u é contínua.
- a derivada de u é contínua.

Derivada de u

Teorema: A derivada de u é contínua em $x = 0$.

$$\begin{aligned}
\left(\frac{du}{dx}\right)_{\epsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{-\epsilon} &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{d}{dx}\frac{du}{dx} \\
&= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]u(x) \\
&= \int_{0}^{\epsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}[V_o - E]u(x) + \int_{-\epsilon}^{0} dx \frac{2m}{\hbar^2}[-E]u(x) \\
&\sim \frac{2m}{\hbar^2}\left\{[V_o - E]u(-\epsilon) + Eu(\epsilon)\right\}\epsilon
\end{aligned}$$

$$\lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \left(\frac{du}{dx}\right)_{\epsilon} - \left(\frac{du}{dx}\right)_{-\epsilon} = 0$$

Equações

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < 0 \\ Te^{iqx} & x \geq 0 \end{cases}$$

Em $x = 0$

$$\begin{aligned} \psi(0^+) &= \psi(0^-) \\ u'(0^+) &= u'(0^-) \end{aligned}$$

Equações

$$\begin{aligned} 1 + R &= T \\ k(1 - R) &= qT \end{aligned}$$

$$R = \frac{k - q}{k + q} \quad T = \frac{2k}{k + q}$$

Equações

Mostre que:

$$|R|^2 + |T|^2 = \frac{\hbar k}{m}$$

Qual é o significado físico disso?

Barreira de Potencial $E < V_o$

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < 0 \\ Te^{-|q|x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Em $x = 0$

$$\begin{aligned} u(0^+) &= u(0^-) \\ u'(0^+) &= u'(0^-) \end{aligned}$$

Equações

$$\begin{aligned} 1 + R &= T \\ ik(1 - R) &= -|q|T \end{aligned}$$

$$R = \frac{ik + |q|}{ik - |q|} \qquad T = \frac{2ik}{ik - |q|}$$

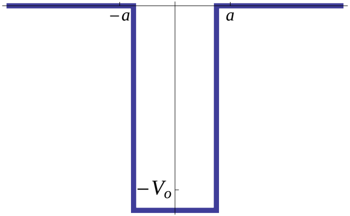
Note que:

$$\frac{\hbar k}{m}|R|^2 = \frac{\hbar k}{m}$$

Ou seja todo fluxo incidente é refletido!

Outline

Poço de Potencial



Poço de Potencial $E > 0$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad q^2 = \frac{2m(E + V_o)}{\hbar^2}$$

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < -a \\ Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & -a < x < a \\ Te^{ikx} & x \geq a \end{cases}$$

Equações

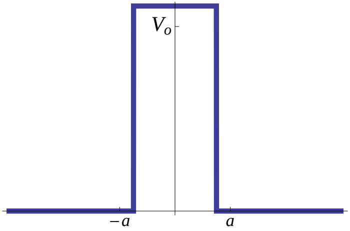
$$
\begin{aligned}
1 + Re^{-iak} &= Ae^{-iaq} + Be^{iaq} \\
-ikRe^{iak} &= iAqe^{-iaq} - iBqe^{iaq} \\
Ae^{iaq} + Be^{-iaq} &= Te^{iak} \\
iAqe^{iaq} - iBqe^{-iaq} &= ikTe^{iak}
\end{aligned}
$$

Soluções

Usando o Mathematica obtemos que

$$T = \frac{2kqe^{ia(k+2q)}}{k(k-q)\left(-e^{2ia(k+2q)}\right) - qe^{4iaq}(q-k) + ke^{2iak}(k+q) + q(k+q)}$$

Barreira de Potencial



Barreira de Potencial $E > 0$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad Q^2 = \frac{-2m(E - V_o)}{\hbar^2}$$

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < -a \\ Ae^{-|Q|x} + Be^{|Q|x} & -a < x < a \\ Te^{ikx} & x \geq a \end{cases}$$

Mesmo caso que o anterior se $q \rightarrow iQ$.

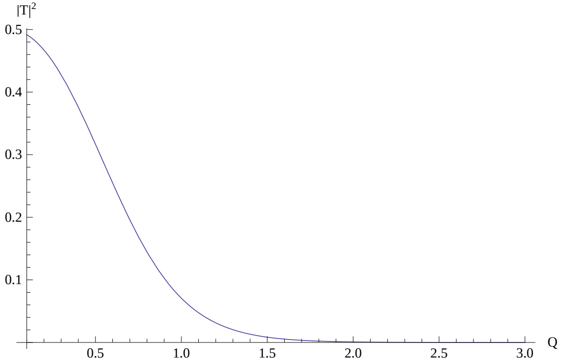
Soluções

Usando o Mathematica obtemos uqe

$$T = \frac{4kQe^{2aQ-2iak}}{ik^2e^{4aQ} - 2kQe^{4aQ} - iQ^2e^{4aQ} - ik^2 - 2kQ + iQ^2}$$

$$|T|^2 = -\frac{8k^2Q^2}{-\left(k^2+Q^2\right)^2\cosh(4aQ) + k^4 - 6k^2Q^2 + Q^4}$$

Transmitância



Aproximação WKB

Quando $Qa >> 1$ temos que:

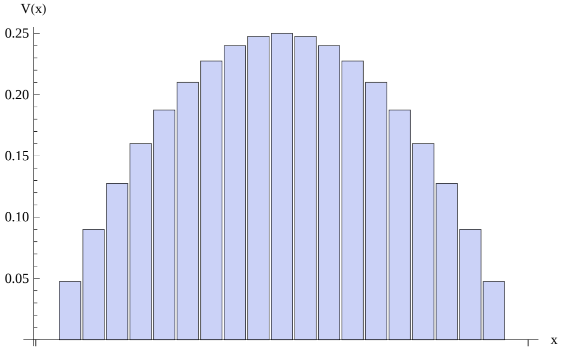
$$|T|^2 = \left(\frac{4kQ}{k^2 + Q^2} \right) e^{-4Qa}$$

$$\ln |T|^2 \sim 2 \ln \left(\frac{4kQ}{k^2 + Q^2} \right) - (2Q)(2a) \sim C - (2Q)(2a) \sim C - 2Q\Delta$$

onde Δ é a largura do potencial.

Aproximação WKB

WKB $\rightarrow$ Wentzel-Kramers-Brioullin



Aproximação WKB

No caso de um potencial qualquer:

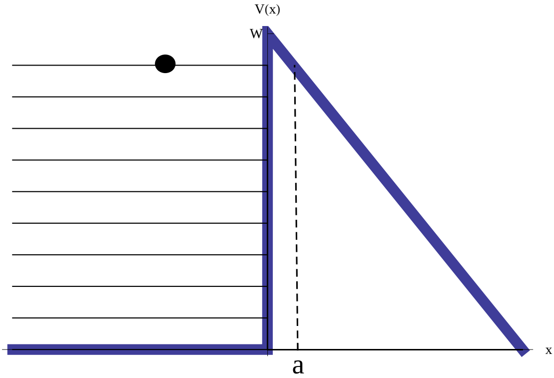
$$|T|^2 = |T_1|^2 \dots |T_N|^2$$

$$\ln|T|^2 \sim \sum_i \ln|T_i|^2 \sim -2\sum_i \Delta_i Q_i$$

$$= \sum_i \Delta_i \sqrt{2m(V(x_i) - E)/\hbar^2}$$

$$|T|^2 = Ce^{-2\int dx \sqrt{2m(V(x)-E)}}$$

Aproximação WKB-Exemplo



$$V(x) = W - e\epsilon x \quad a = \frac{W}{e\epsilon}$$

Aproximação WKB-Exemplo

$$|T|^2 = Ce^{-2\int dx \sqrt{2m(V(x)-E)}}$$

$$|T|^2 = C \exp\left[-\frac{4\sqrt{2}}{3}\sqrt{\frac{Wma^2}{\hbar^2}}\right]$$

Poço de Potencial $E < 0$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = -\alpha^2 \quad q^2 = \frac{2m(V_o - |E|)}{\hbar^2}$$

$$u(x) = \begin{cases} C_1 e^{\alpha x} & x < -a \\ A\cos qx + B\sin qx & -a < x < a \\ C_2 e^{-\alpha x} & x \geq a \end{cases}$$

Equações

$$
\begin{aligned}
C_1 e^{-a\alpha} &= A\cos(aq) - B\sin(aq) \\
A\cos(aq) + B\sin(aq) &= C_2 e^{-a\alpha} \\
\alpha C_1 e^{-a\alpha} &= Aq\sin(aq) + Bq\cos(aq) \\
Bq\cos(aq) - Aq\sin(aq) &= \alpha - C_2 e^{-a\alpha}
\end{aligned}
$$

Soluções Caso Par

Neste caso $B = 0$.

$$
\begin{aligned}
C_1 e^{-a\alpha} &= A\cos(aq) \\
A\cos(aq) &= C_2 e^{-a\alpha} \\
\alpha C_1 e^{-a\alpha} &= Aq\sin(aq) \\
-Aq\sin(aq) &= \alpha - C_2 e^{-a\alpha}
\end{aligned}
$$

Soluções Caso Par

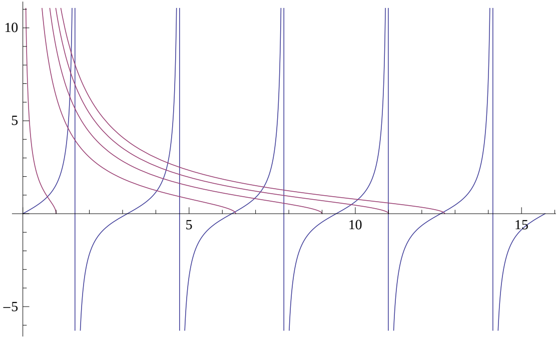
$$q \tan qa = \alpha$$

Definindo:

$$\lambda = \frac{2mV_o a^2}{\hbar^2} \quad y = qa$$

$$\tan y = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$$

Soluções Caso Par



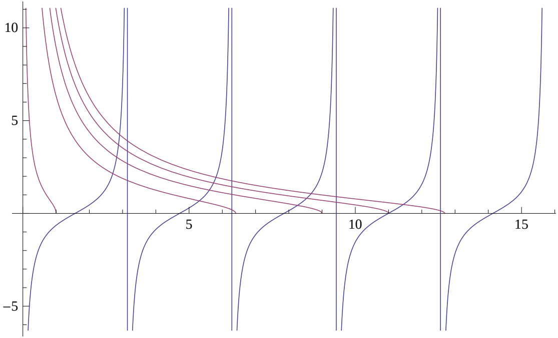
Equações Caso Impar

Neste caso $A = 0$.

$$\begin{aligned}
C_1 e^{-a\alpha} &= -B\sin(aq) \\
B\sin(aq) &= C_2 e^{-a\alpha} \\
\alpha C_1 e^{-a\alpha} &= Bq\cos(aq) \\
Bq\cos(aq) &= \alpha - C_2 e^{-a\alpha}
\end{aligned}$$

Soluções Caso Impar

$$-\frac{1}{\tan y} = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y}$$



Resumo da Ópera

- Dependendo de λ, ou seja da forma do poço eu posso ter 1 ou mais estados ligados.
- O número de estados ligados é sempre finito.
- A cada estado corresponde um nível de energia, ou seja o espectro para esses sistemas é bastante complexo.
- No limite em que V_o tende a infinito recuperamos os níveis de energia para a partícula em uma caixa.

Outline

Hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2u = Eu$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

Equação Diferencial

$$\frac{d^2u}{dy^2} + (\epsilon - y^2)u = 0$$

Equação Diferencial Caso Limite

Para $y >> 0$

$$\frac{d^2 u_o}{dx^2} - y^2 u_o = 0$$

$$\frac{du_o}{dy}\frac{d^2 u_o}{dy^2} - y^2 \frac{du_o}{dy} u_o = 0$$

$$\frac{d}{dy}\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2 \frac{d(u_o)^2}{dy} = 0$$

Equação Diferencial Caso Limite

$$\frac{d}{dy}\left[\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2u_o^2\right] = -2yu_o^2 \sim 0$$

$$\left(\frac{du_o}{dy}\right)^2 - y^2u_o^2 = C$$

$$\frac{du_o}{dy} = \sqrt{C + y^2u_o^2}$$

Quando $y \to \infty$ $u_o^2y^2 \to 0$ temos:

Equação Diferencial Caso Limite

$$\frac{du_o}{dy} \sim \sqrt{C}$$

Ou seja $C = 0$.

$$\frac{du_o}{dy} = \pm y u_o$$

Só o caso negativo interessa:

$$u_o = Ae^{-y^2/2}$$

.

$$\frac{d}{dy}\left[-4y^2 e^{-y^2} - y^2 e^{-y^2}\right] \sim y^3 e^{-y^2} >> ye^{-y^2}$$

Ansätz

$$u(y) = h(y)e^{-y^2/2}$$

Após algumas manipulações obtemos:

$$h'' - 2yh' + (\epsilon - 1)h = 0$$

Comportamento Assintótico

$$h(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} \{(m+2)(m+1)a_{m+2} + [-2m + (\epsilon - 1)]a_m\}$$

$$a_{m+2} = \frac{1 - \epsilon + 2m}{(m+2)(m+1)} a_m$$

Obs. Os dois primeiros termos do primeiro termo desaparecem

Comportamento Assintótico

$$a_{m+2} \sim \frac{a_m}{m/2}$$

$$h(y) \sim a_o \left(1 + y^2 + \frac{y^4}{2!} + \ldots \right) = e^{y^2}$$

$$u = h(y) e^{-y^2/2} \sim e^{y^2/2}$$

Ou seja u diverge no infinito. Para evitar isso:

$$\epsilon = 1 + 2n$$

$$\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Polinômios de Hermite

Reunindo estes resultados temos que:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Além disso:

$$a_{m+2} = \frac{2(m-n)}{(m+1)(m+2)}a_m$$

Ou seja a série é truncada em $m = n$ e $h(y)$ se tornam polinômios, chamados de Polinômios de Hermite denotados por $H_n(y)$.

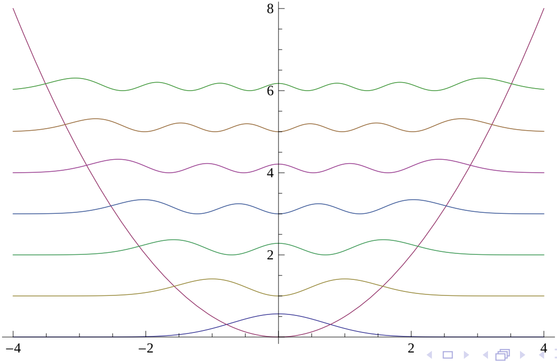
Polinômios de Hermite

$$
\begin{aligned}
H_o(y) &= a_o \\
H_1(y) &= ya_1 \\
H_2(y) &= a_o\left(1 - 2y^2\right)
\end{aligned}
$$

Autofunções

$$u_m(y) = e^{-y^2/2} H(y)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y) dy = \delta_{nm}$$



Exercício

Considere partículas incidindo na direção positiva do eixo x com $V_! < E < V_2$ e escreva as equações que a função de onda deve obedecer.