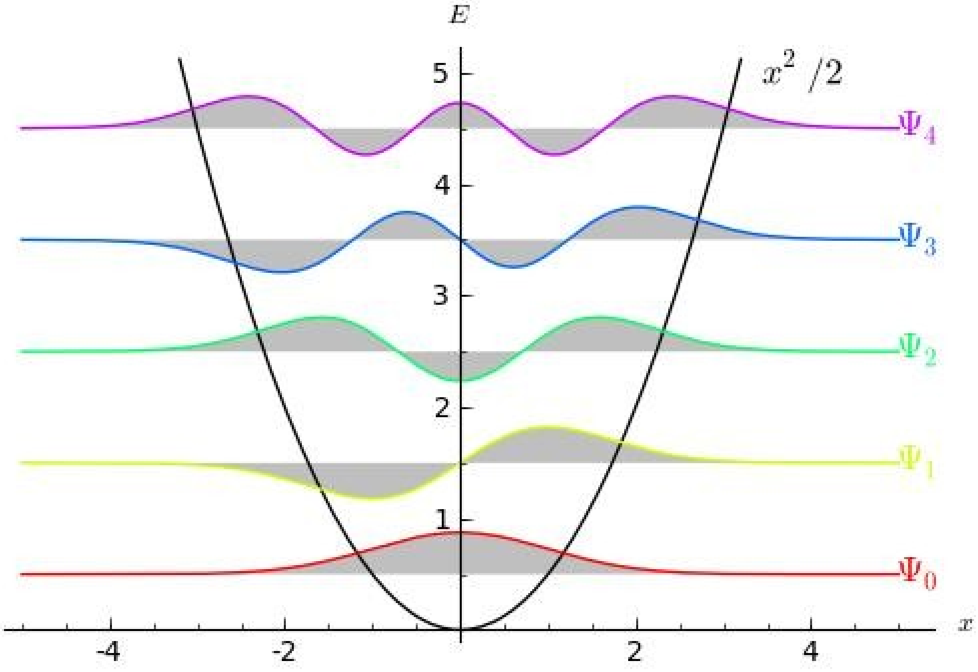
Física Quântica

Aula 8:
Potenciais Simples II: Oscilador Harmônico, Degrau de Potencial

Pieter Westera
pieter.westera@ufabc.edu.br

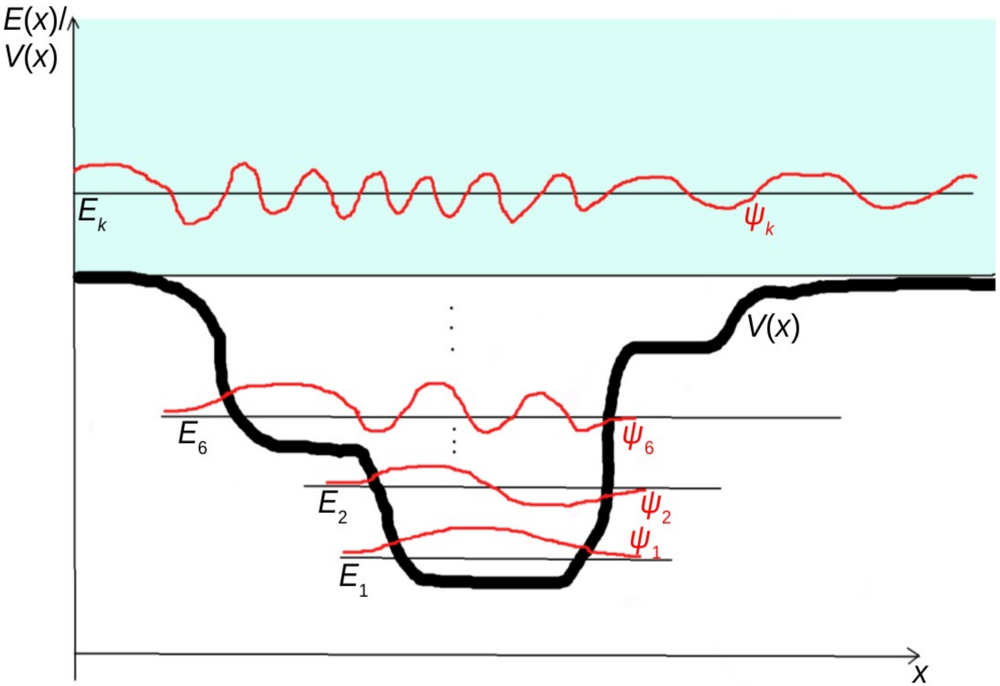
Universidade Federal do ABC



http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html

“Receita de Bolo”

Dado $V(x)$ => Procurar combinações $\psi(x)$, E (resolver a E. d. S.)



Para $E > V(-\infty)$ e/ou $E > V(\infty)$:
estado “livre”,
espectro contínuo de energias

Para $E < V(-\infty)$ e $E < V(\infty)$,
“poço de potencial”:
estado ligado,
níveis de energia quantizados

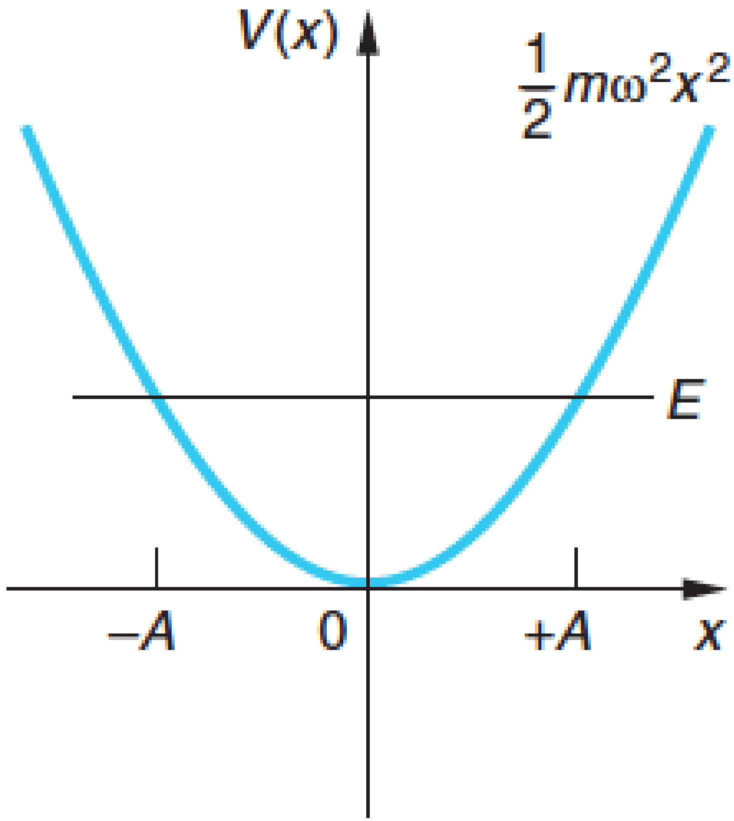
Para $E < V_{min}$ não há solução

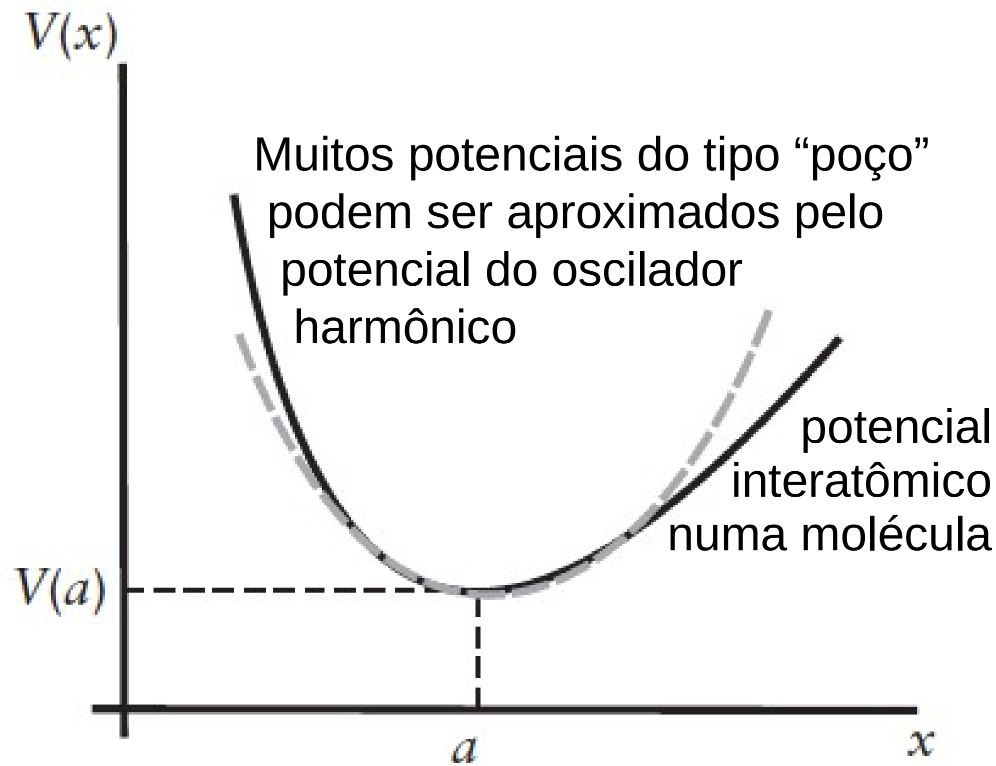
Em regiões, onde:

- $E > V(x)$ (classicamente “permitido”) => sinal de ψ''/ψ negativo: $\psi(x)$ oscilatório, cos/sen kx, ou $e^{\pm ikx}$, onde $k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$ ($\lambda = 2\pi/k$)
- $E < V(x)$ (classicamente “proibido”) => sinal de ψ''/ψ positivo: $\psi(x)$ exponencial, $e^{\pm \alpha x}$, onde $\alpha = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$
- $V(x) = \infty$: $\psi(x) = 0$

O Oscilador Harmônico

Força $F(x) = -kx$ => Potencial $V(x) = -\int F \cdot dx = \frac{1}{2} \cdot kx^2 = \frac{1}{2} \cdot m\omega^2 x^2$

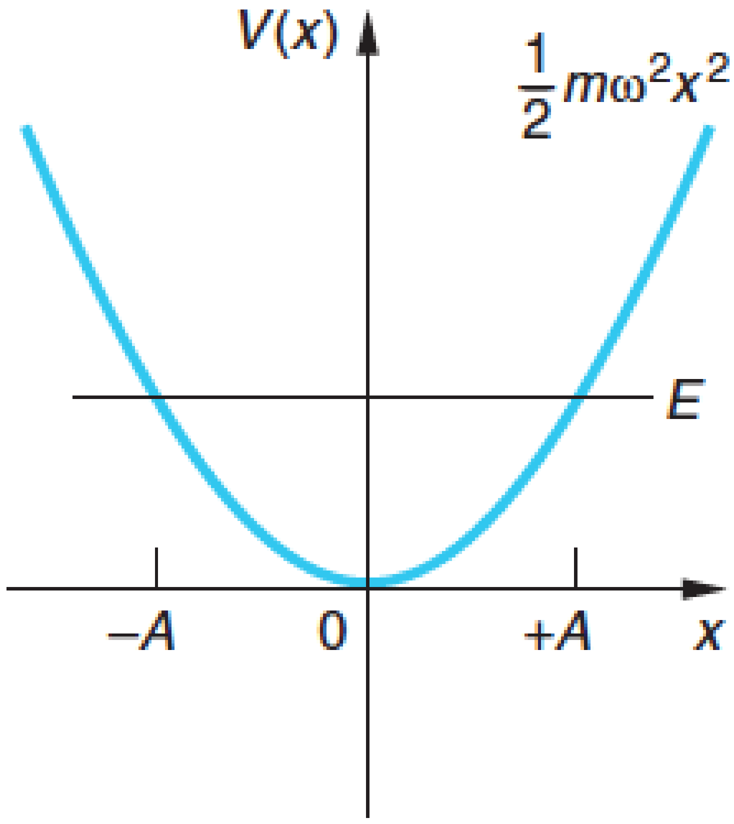




Na física clássica (exemplo mola), a partícula com energia E oscila com frequência angular $\omega = \sqrt{k/m}$, que não depende da energia, entre as posições $-A$ e $+A$, onde $E = \frac{1}{2} \cdot m\omega^2 A^2 = \frac{1}{2} \cdot kA^2$.

O Oscilador Harmônico

Potencial $V(x) = ½\cdot kx^2 = ½\cdot m\omega^2x^2$



Dá para determinar a velocidade da partícula em função da posição x pela conservação de energia:

$½\cdot mv^2 + ½\cdot m\omega^2x^2 = E$

$\Rightarrow v(x) = \sqrt{(2/m)\cdot(E - ½\cdot m\omega^2x^2)}$

A probabilidade de estadia é inversamente proporcional a v (quanto mais lentamente a partícula passa por uma certa posição, tanto maior a probabilidade de flagrá-la lá):

$P(x)$ prop. $1/\sqrt{(2/m)\cdot(E - ½\cdot m\omega^2x^2)}$

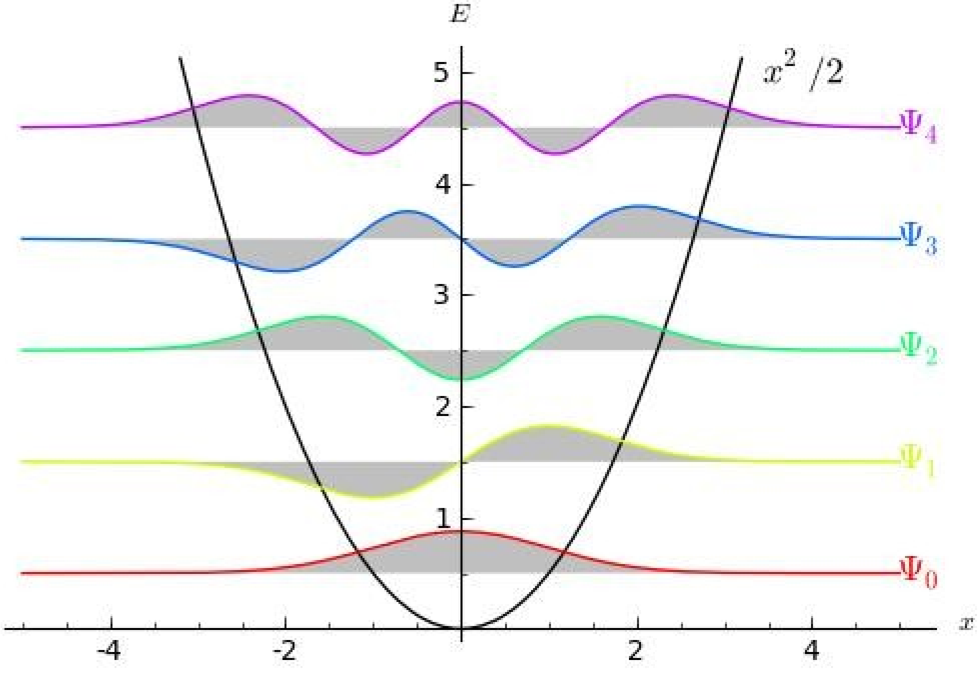
=> A probabilidade de estadia é mais alta perto dos pontos de retorno -A e +A.

O Oscilador Harmônico

Caso quântico

Por ser um potencial tipo “poço”, a receita de bolo prevê

Funções de Onda do Oscilador Harmônico



- quantização de energias

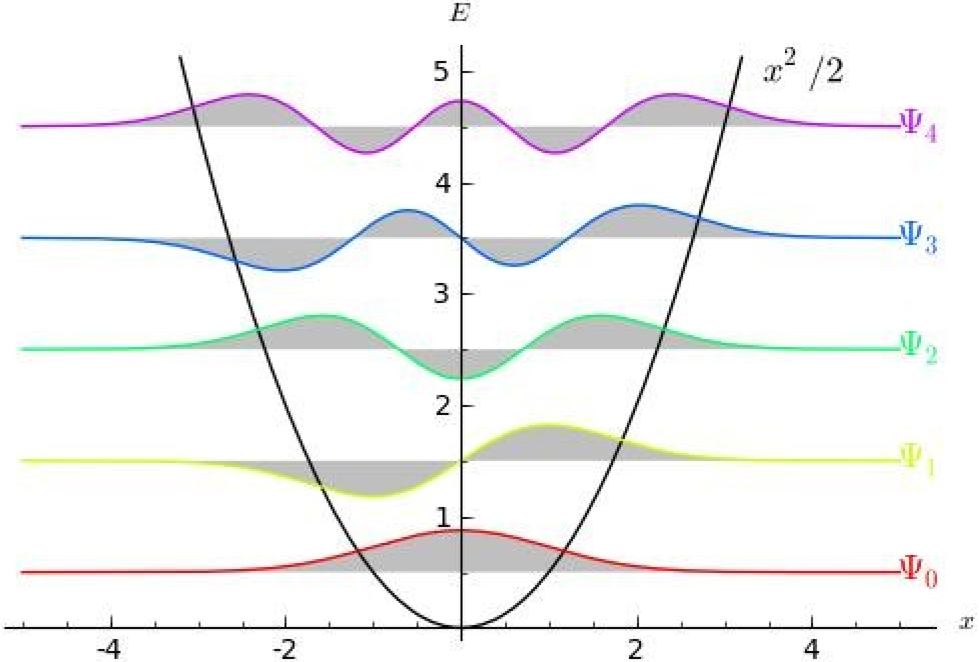
- comportamento oscilatório lá,
  onde $E > V(x)$,
  e exponencial
  onde $E < V(x)$

Pela simetria de $V(x)$, $V(x) = -V(-x)$
esperamos que $P(x) = |\psi(x)|^2$
seja simétrica também
=> $\psi(x)$ tem que ser simétrica, $\psi(x) = \psi(-x)$,
ou antissimétrica, $\psi(x) = -\psi(-x)$.

O Oscilador Harmônico

Caso quântico

Funções de Onda do Oscilador Harmônico



As soluções são da forma:

$\psi_n(x) = C_n \cdot e^{-m\omega x\text{^}2/2\hbar} \cdot H_n(x)$,

onde C_n = const. de norm.

$e^{-m\omega x\text{^}2/2\hbar}$ é uma gaussiana, e

$H_n(x)$ = polinômio de Hermite de n-ésimo grau

$$\Psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-y^2/2}$$

verificaremos no quadro

$$\Psi_1 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2}\, y\, e^{-y^2/2}$$

$$\Psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2y^2 - 1)\, e^{-y^2/2}$$

$$\Psi_3 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} (2y^3 - 3y)\, e^{-y^2/2}$$

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

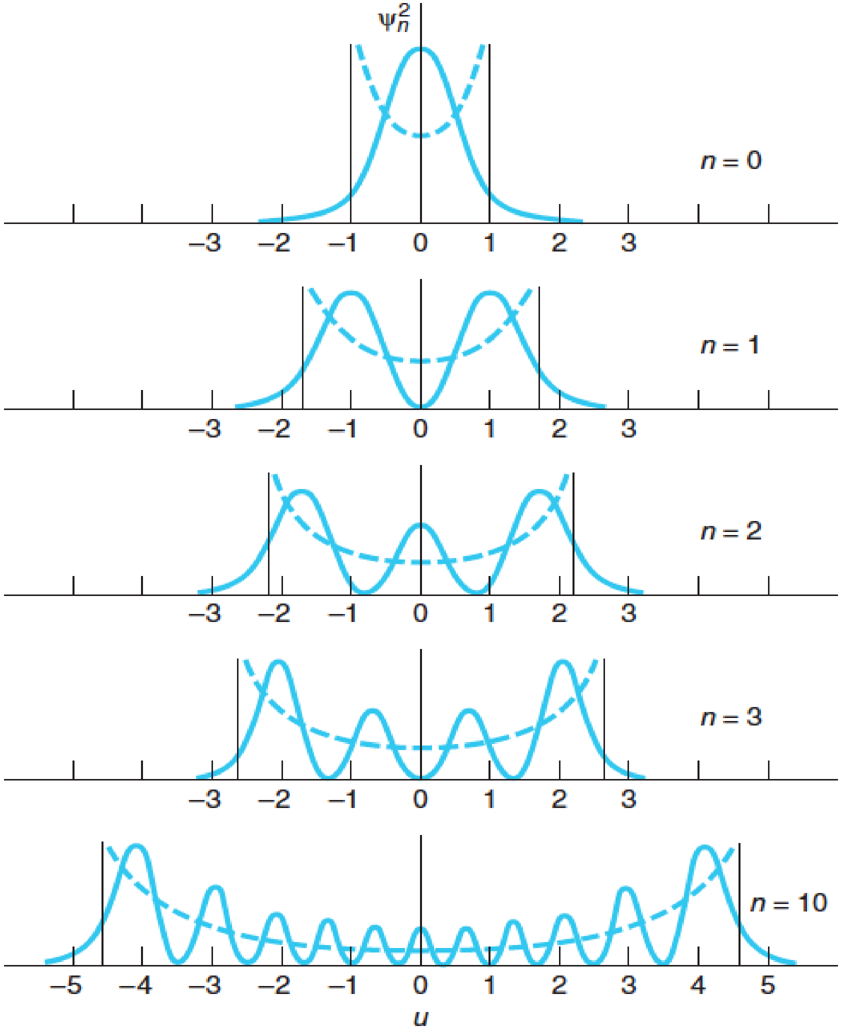
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Regra de seleção: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x \psi_m \, dx \neq 0$ apenas para $n = m \pm 1$

=> Só transições com $\Delta n = \pm 1$ são possíveis.

O Oscilador Harmônico

As funções de onda levam a estas distribuições de probabilidade:



Para grandes números quânticos, as quantização da energia e comprimento de onda da função de onda são imperceptíveis (igual como no caso do poço quadrado infinito), e a probabilidade de estadia é mais alta perto dos pontos de retorno clássicos, .
=> Princípio de correspondência

O Oscilador Harmônico

Exemplo de uma verificação

Mostre que a função de onda $\psi_0(x) = C \cdot e^{-\alpha x^2/2}$ satisfaz a equação de Schrödinger de uma partícula no potencial do oscilador harmônico, $V(x) = ½ \cdot m\omega^2 x^2$.
Determine a constante α e a energia total da partícula.

$d\psi_0/dx = C(-\alpha x)e^{-\alpha x^2/2}$

$d^2\psi_0/dx^2 = C[-\alpha e^{-\alpha x^2/2} + (-\alpha x)^2 e^{-\alpha x^2/2}] = (\alpha^2 x^2 - \alpha) \cdot Ce^{-\alpha x^2/2} = (\alpha^2 x^2 - \alpha) \cdot \psi_0$

Substituir na Equação de Schrödinger:

$-\hbar^2/2m \cdot (\alpha^2 x^2 - \alpha) \cdot \psi_0 + (½ \cdot m\omega^2 x^2) \cdot \psi_0 = E\psi_0$

$\Rightarrow -\hbar^2/2m \cdot (\alpha^2 x^2 - \alpha) + (½ \cdot m\omega^2 x^2) - E = 0$

$\Rightarrow [-½ \cdot \hbar^2\alpha^2/m + ½ \cdot m\omega^2] \cdot x^2 + ½ \cdot \hbar^2\alpha/m - E = 0$

Satisfeita, se os termos constante (em x^0) e quadrático (em x^2) são zero:

termo em x^2: $-½ \cdot \hbar^2\alpha^2/m + ½ \cdot m\omega^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha = m\omega/\hbar$

termo constante: $½ \cdot \hbar^2\alpha/m - E = 0 \quad \Rightarrow \quad E = ½ \cdot \hbar^2\alpha/m = ½ \cdot \hbar\omega$

Reflexão e Transmissão de Ondas

Um problema interessante é, ver como partículas em estado livre (elas podem “escapar” para o “infinito”: $E > V(x)$ para $x \to \infty$ e/ou $-\infty$) se comportam diante de um “obstáculo”.

A partícula livre é deste tipo, com “obstáculo zero”.

=> A energia não é quantizada e a função de onda não cai exponencial- ou outramente e portanto, não é normalizável.

Dá para torná-la normalizável fazendo um pacote de ondas (caso realista para partículas individuais), mas aqui faremos outro coisa:

Interpretamos a função de onda como representação de um feixe de partículas, e normalizamos pela densidade de partículas $\rho := |\psi(x)|^2$. Se tem N partículas entre as posições a e b, $\rho = N/(b-a)$:

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

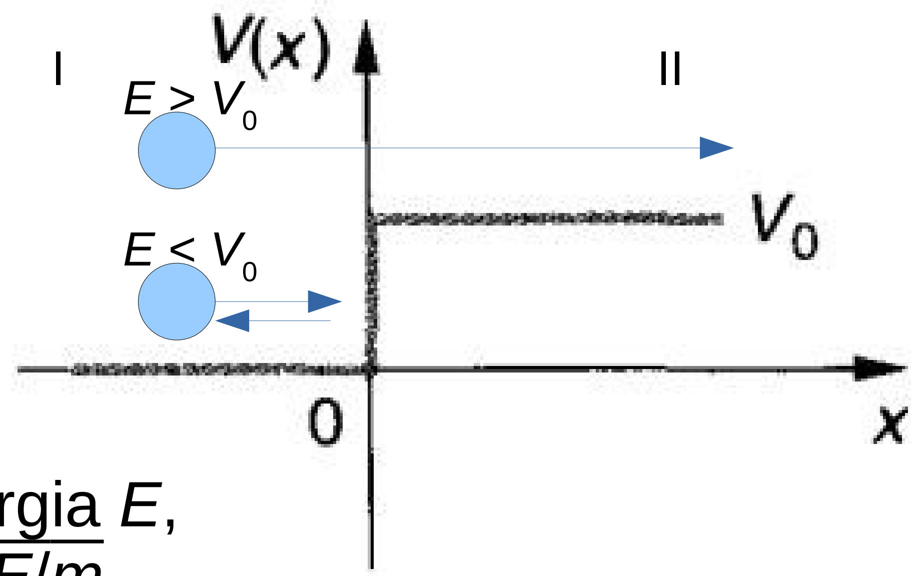
Reflexão e Transmissão de Ondas

Degrau de Potencial

Potencial da forma:

$V(x) = 0$ para $x < 0$ (região I)

V_0 para $x > 0$ (região II)



Caso Clássico

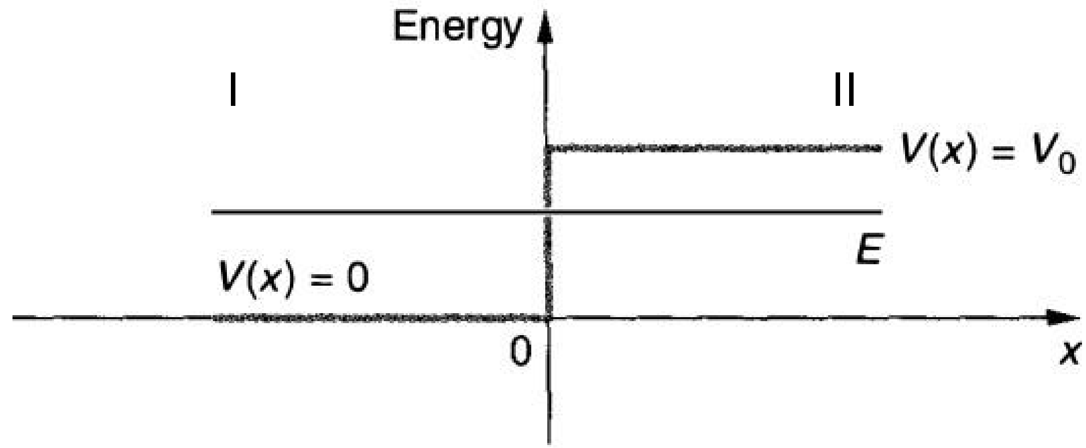
Partícula(s) vindo de $x < 0$ com energia E, respectivamente, velocidade $v = \sqrt{2E/m}$

$E < V_0$: Refletida(s) em $x = 0$, sem chance de se encontrar em $x > 0$
=> reflexão total

$E > V_0$: Passa o degrau e continua em $x > 0$ com $v = \sqrt{2(E\text{-}V_0)/m}$
=> transmissão

Reflexão e Transmissão de Ondas

Caso Quântico



- $E < V_0$:

$x < 0$ (partícula livre):

$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$,

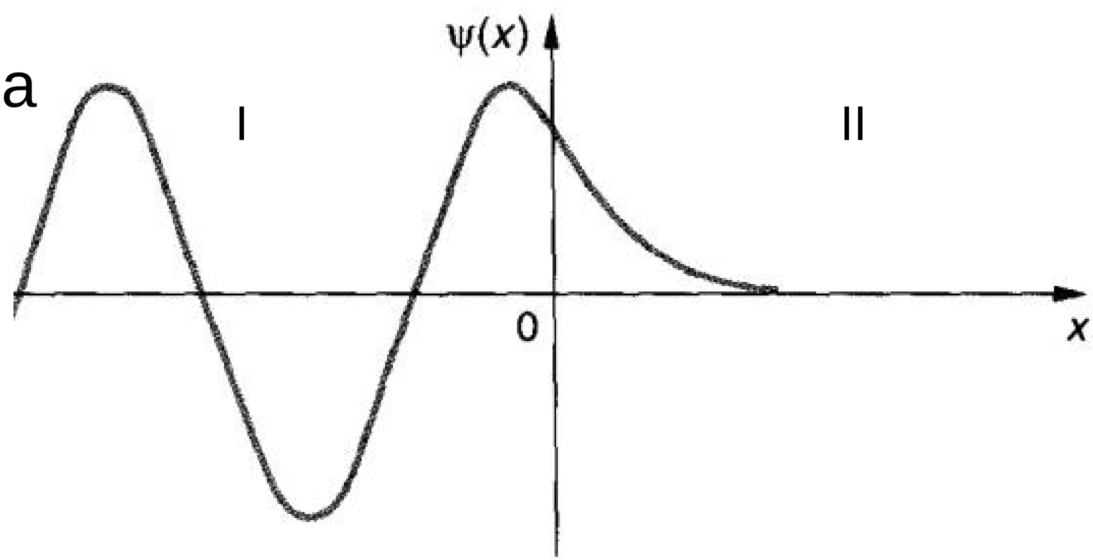
feixe incidindo feixe refletido

onde $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $|A|^2 = \rho$

para ψ_I ser real, $B = \overline{A}$

=> onda estacionária da forma

$\psi_I(x) = 2|A|\cos(k_1x + \varphi)$



$x > 0$ (class. "proibido"):

$\psi_{II}(x) = Ce^{-\alpha x} + \cancel{De}^{\alpha x}$, seria uma onda que cresce infinitamente

onde $\alpha = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

=> $|\psi_{II}(x)|^2 = C^2e^{-2\alpha x}$

φ e C têm que ser ajustados tal, que $\psi_I(x = 0) = \psi_{II}(x = 0)$

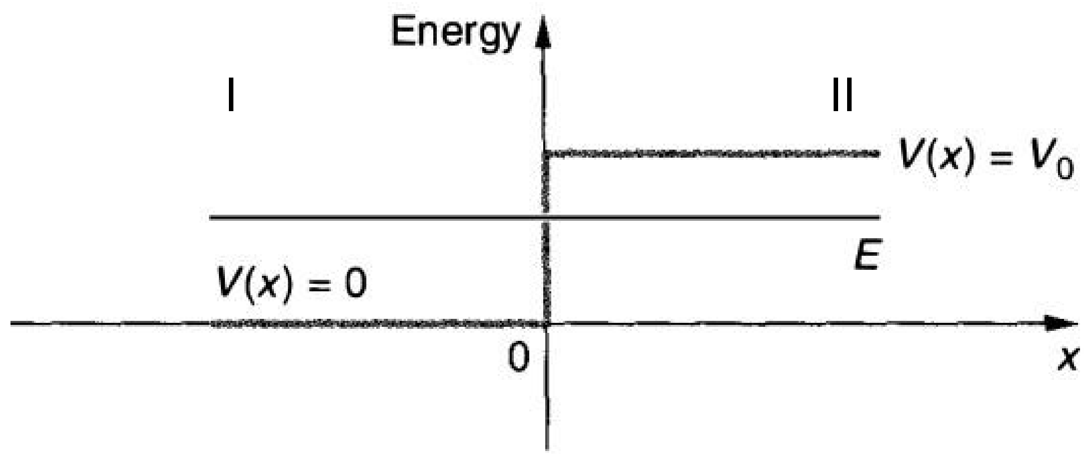
e $d\psi_I(x = 0)/dx = d\psi_{II}(x = 0)/dx$

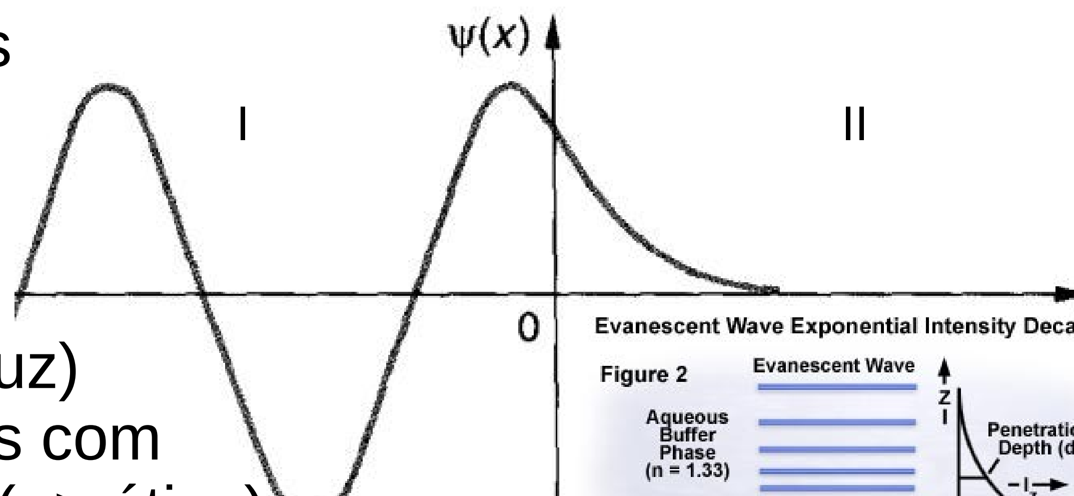
Reflexão e Transmissão de Ondas

Caso Quântico

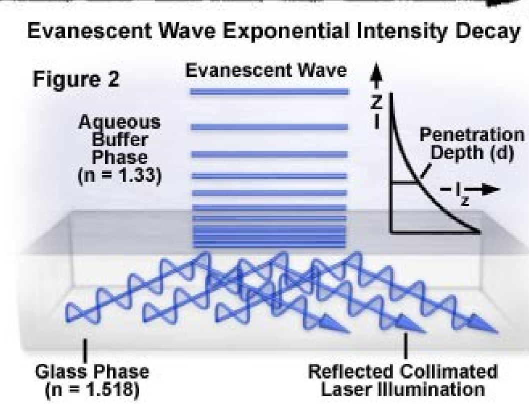
- $E < V_0$:

Ocorre reflexão total do feixe, igual ao caso clássico, resultando em uma onda estacionária em $x < 0$, mas ao contrário do caso clássica, a onda de partículas penetra um pouco na região "proibida".





Parecido com a reflexão total de ondas eletromagnéticas (luz) na superfície entre dois meios com índices refratórios diferentes (=> ótica).
Neste caso, a onda que penetra um pouco no meio "proibido" é chamada onda evanescente.



Reflexão e Transmissão de Ondas

Caso Quântico

- $E > V_0$:

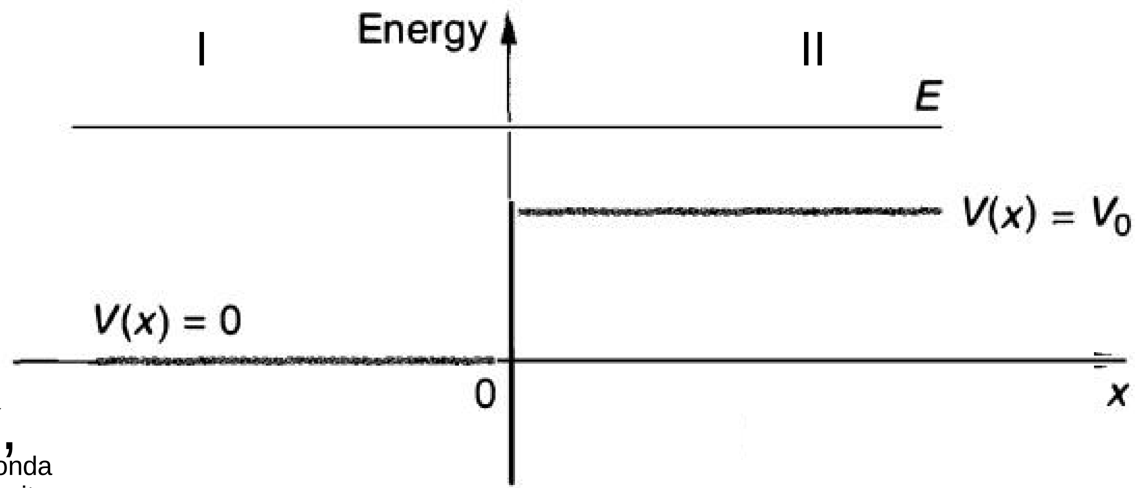
$x < 0$: $\psi_I(x) = Ae^{ik1x} + Be^{-ik1x}$,

onde $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $|A|^2 = \rho$

$x > 0$: $\psi_{II}(x) = Ce^{ik2x} + \cancel{De^{-ik2x}}$,

seria uma onda vindo da direita

onde $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$,



Já que $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)$

$\Rightarrow A + B = C$

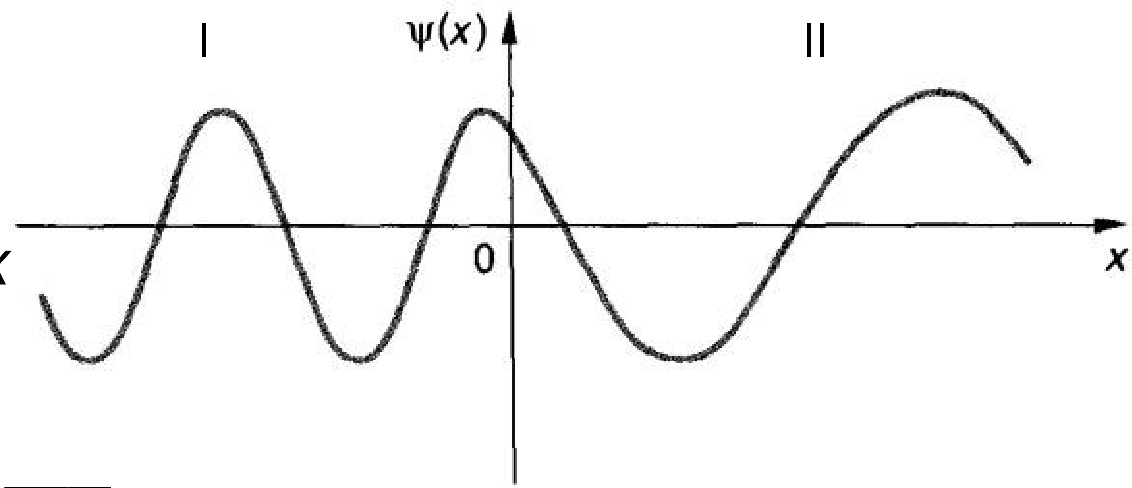
e $d\psi_I(x=0)/dx = d\psi_{II}(x=0)/dx$

$\Rightarrow k_1A - k_1B = k_2C$

$\Rightarrow B = (k_1-k_2)/(k_1+k_2) \cdot A$

$= (\sqrt{E} - \sqrt{E-V_0})/(\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0}) \cdot A$,

$C = 2k_1/(k_1+k_2) \cdot A = 2\sqrt{E}/(\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0}) \cdot A$

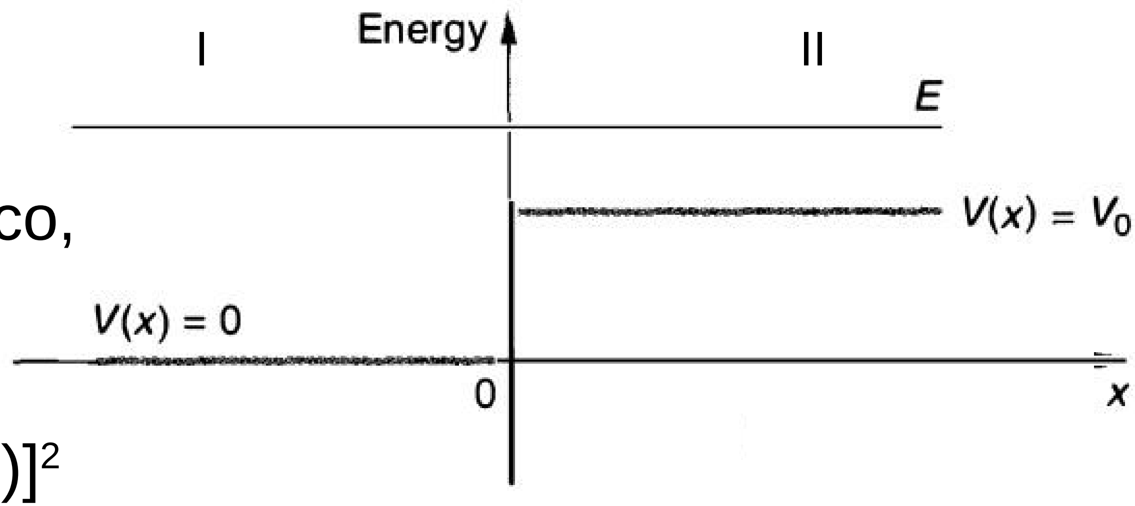


Reflexão e Transmissão de Ondas

Caso Quântico

- $E > V_0$:

Ao contrário do caso clássico, parte do feixe é refletido.

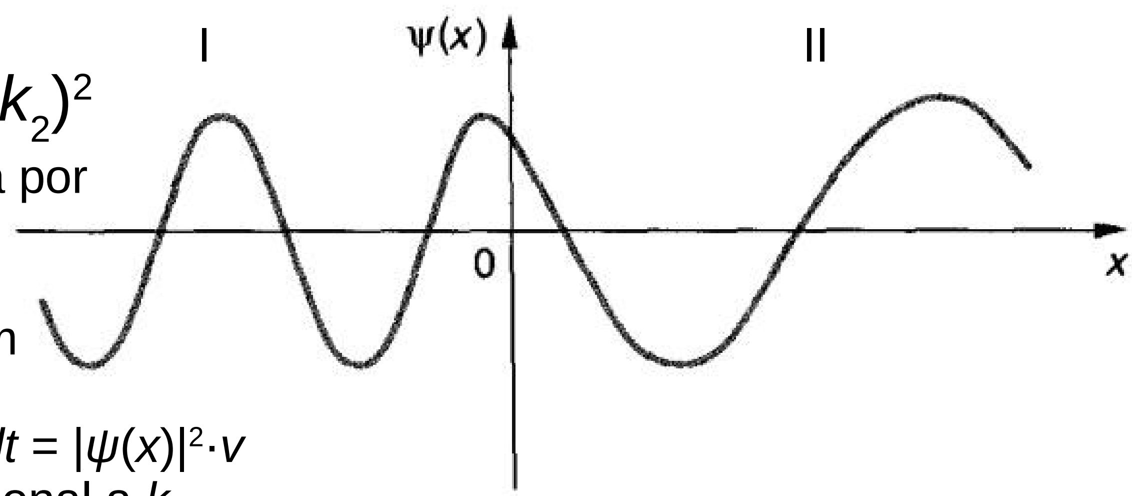


coeficiente de reflexão:

$R = |B|^2/|A|^2 = [(k_1-k_2)/(k_1+k_2)]^2$

coeficiente de transmissão:

$T = k_2|C|^2/k_1|A|^2 = 4k_1k_2/(k_1+k_2)^2$



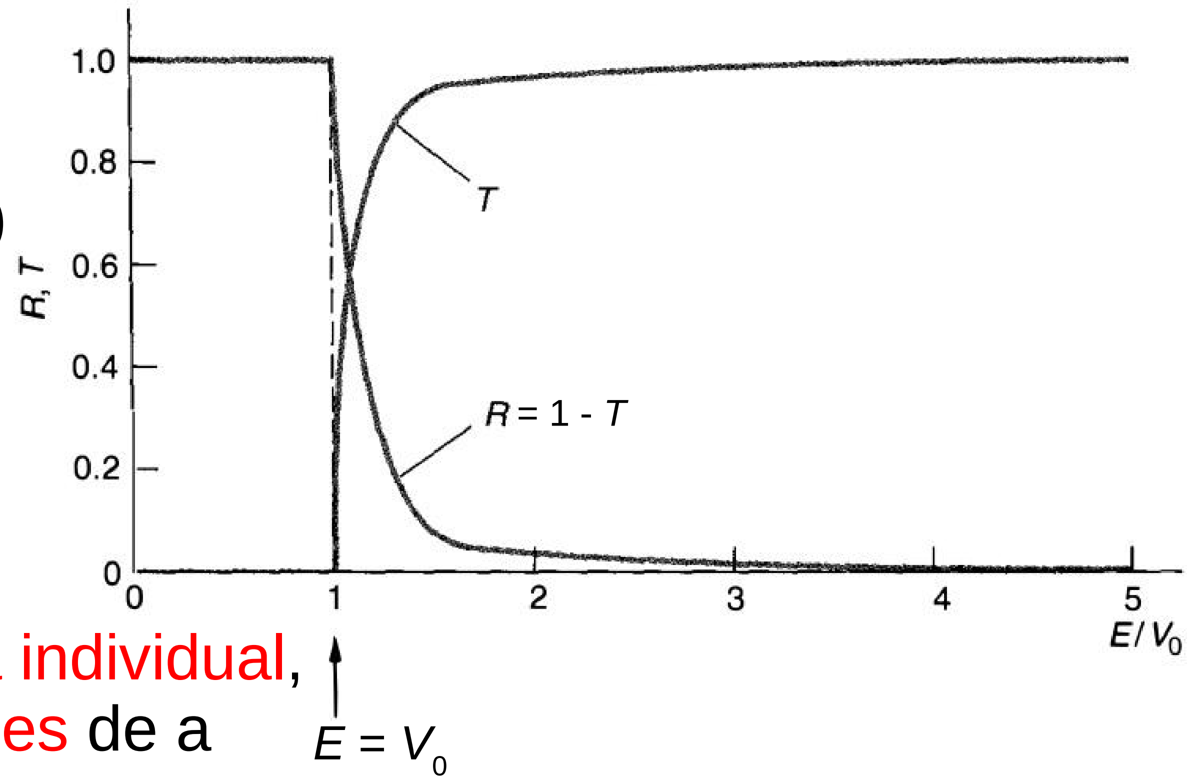
A taxa de partículas dN/dt que passa por um trechinho dx é proporcional não apenas à amplitude da função de onda, mas também à velocidade com aquela elas passam pelo trechinho, já que $dN/dt = P(x)dx/dt = |\psi(x)|^2 dx/dt = |\psi(x)|^2 \cdot v$ e v é proporcional a p que é proporcional a k.

Exercício simples: mostre, que $R + T = 1$

Reflexão e Transmissão de Ondas

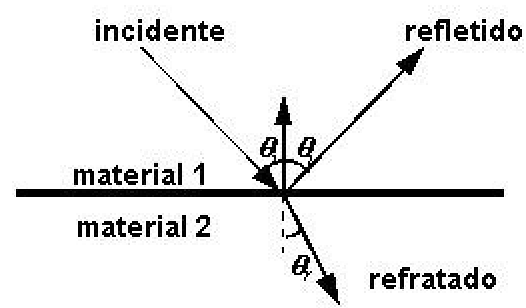
Caso Quântico

Resumo:
$T = 0$ para $E < V_0$
$T = 4\sqrt{E(E-V_0)}/(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0})$
para $E > V_0$
para $E >> V_0$, T tende a 1
=> princípio de correspondência



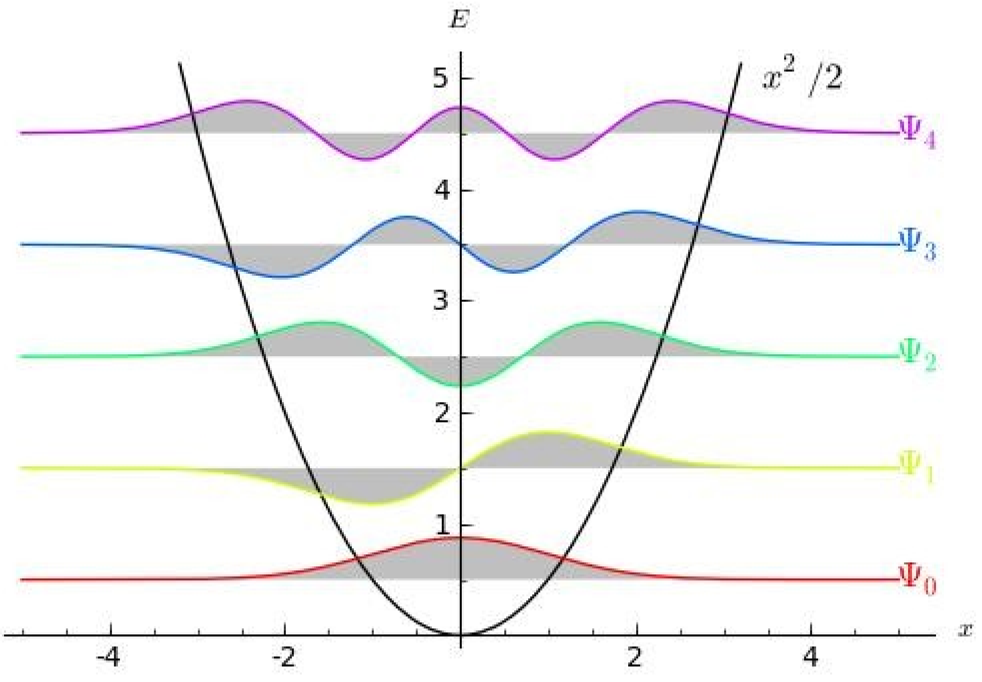
No caso de uma partícula individual, R e T são as probabilidades de a partícula ser refletida ou passar, respectivamente.

Este fenômeno é análogo à reflexão e transmissão de luz na ótica.



Física Quântica

FIM PARA HOJE



http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html