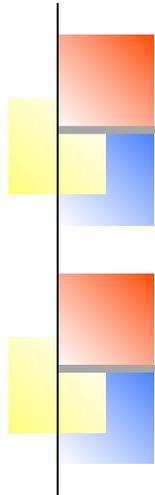


INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Física IV



Cap 41 – Mecânica Quântica em 1D

Prof. Daniel Jonathan

Niterói, Abril 2015

A Equação de Schrödinger



Erwin Schrödinger, físico austríaco, descobriu esta equação em 1925 (Nobel 1933)

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

- Nos diz qual tem de ser a função de onda de uma partícula de energia E bem-definida, submetida a uma energia potencial da forma $U(x)$
- É a equação-chave da Mecânica Quântica

A Equação de Schrödinger

Motivação: encontrar uma 'equação de onda' para as funções de onda

Uma onda senoidal de comprimento de onda λ : $\psi(x) = \psi_0 \text{sen} \left(\frac{2\pi x}{\lambda} \right)$

satisfaz a eq. diferencial $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{(2\pi)^2}{\lambda^2} \psi(x)$

Ideia 1: para concordar com a relação de De Broglie, precisamos

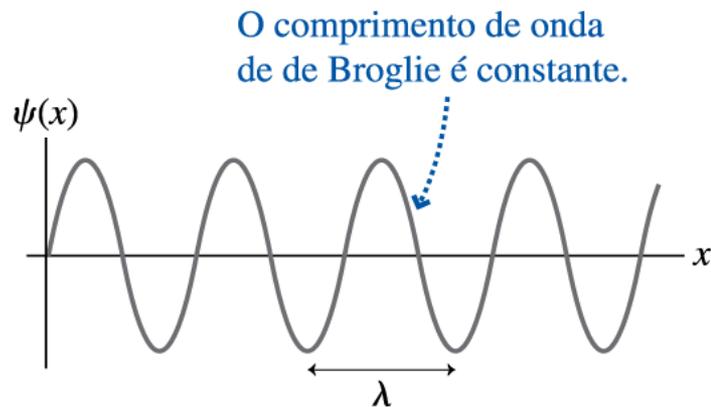
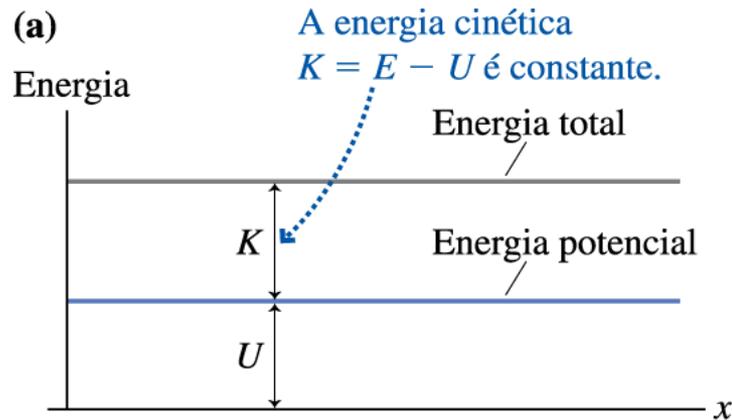
$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{p^2}{h^2} = \frac{2mK}{h^2} \quad \longrightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mK}{\hbar^2} \psi(x)$$

Ideia 2: vamos assumir que essa relação continua valendo se a partícula está numa região com energia potencial $U(x) = E - K(x)$ dependente da posição

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

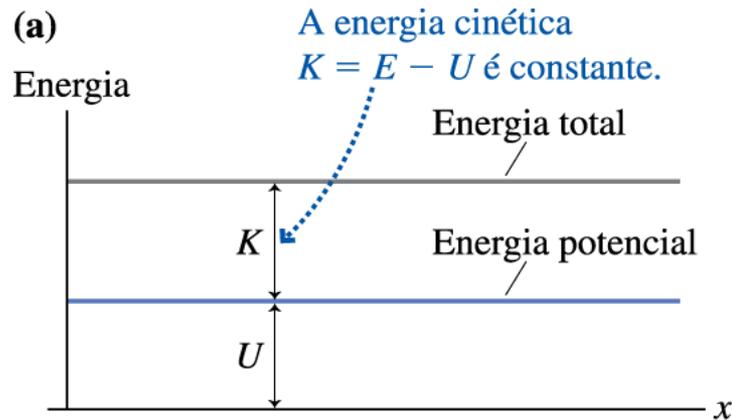
Energia cinética e comprimento de onda

U constante

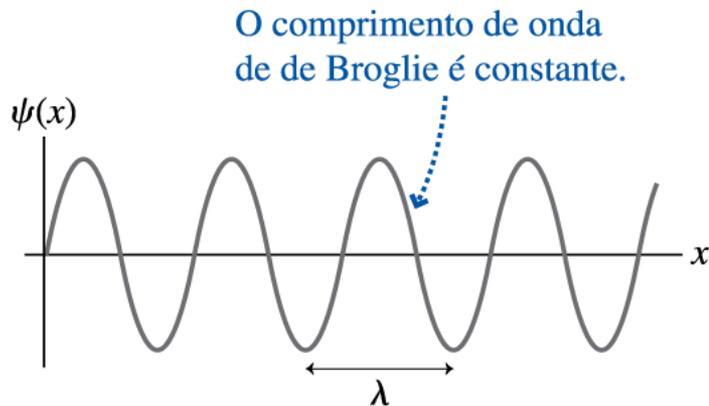
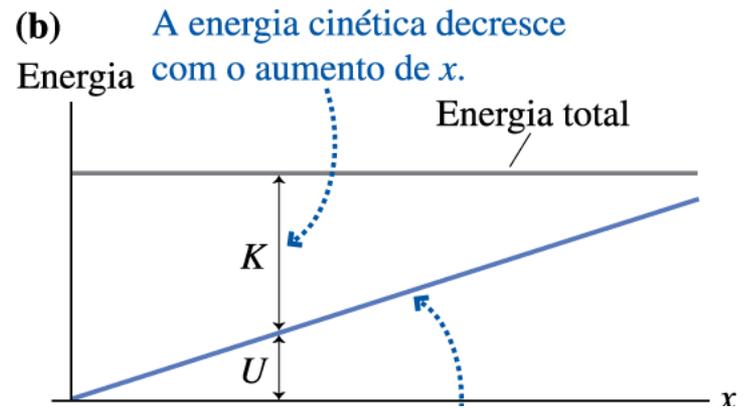


Energia cinética e comprimento de onda

U constante

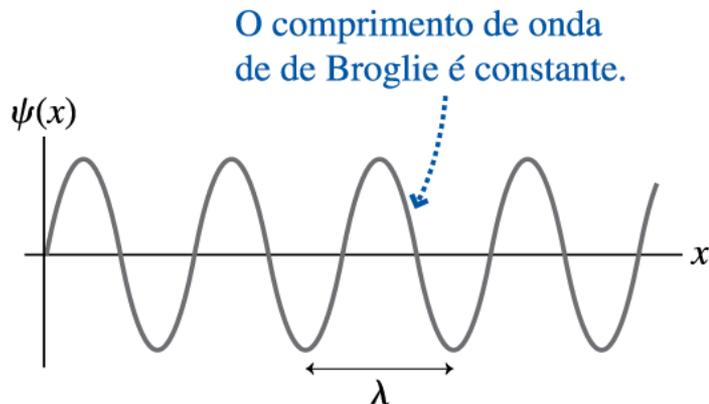
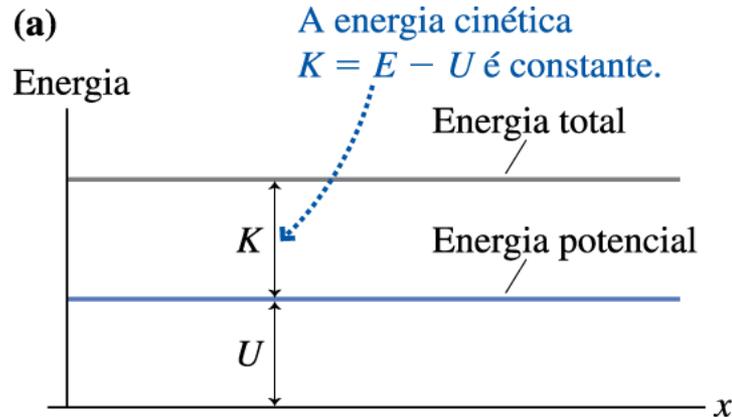


U dependente de x ($U_g = mgx$)

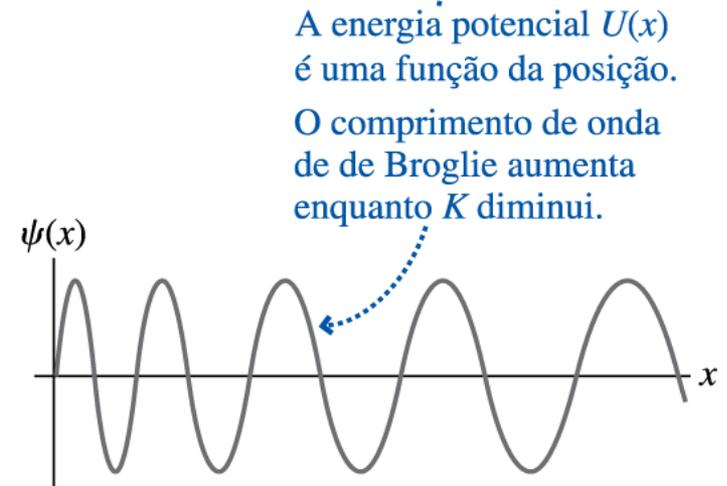
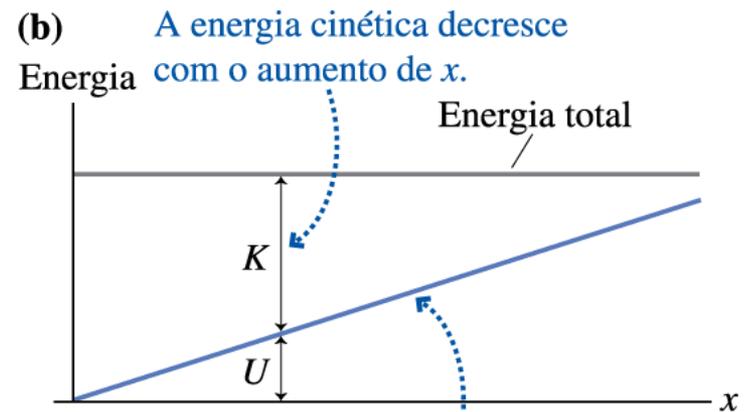


Energia cinética e comprimento de onda

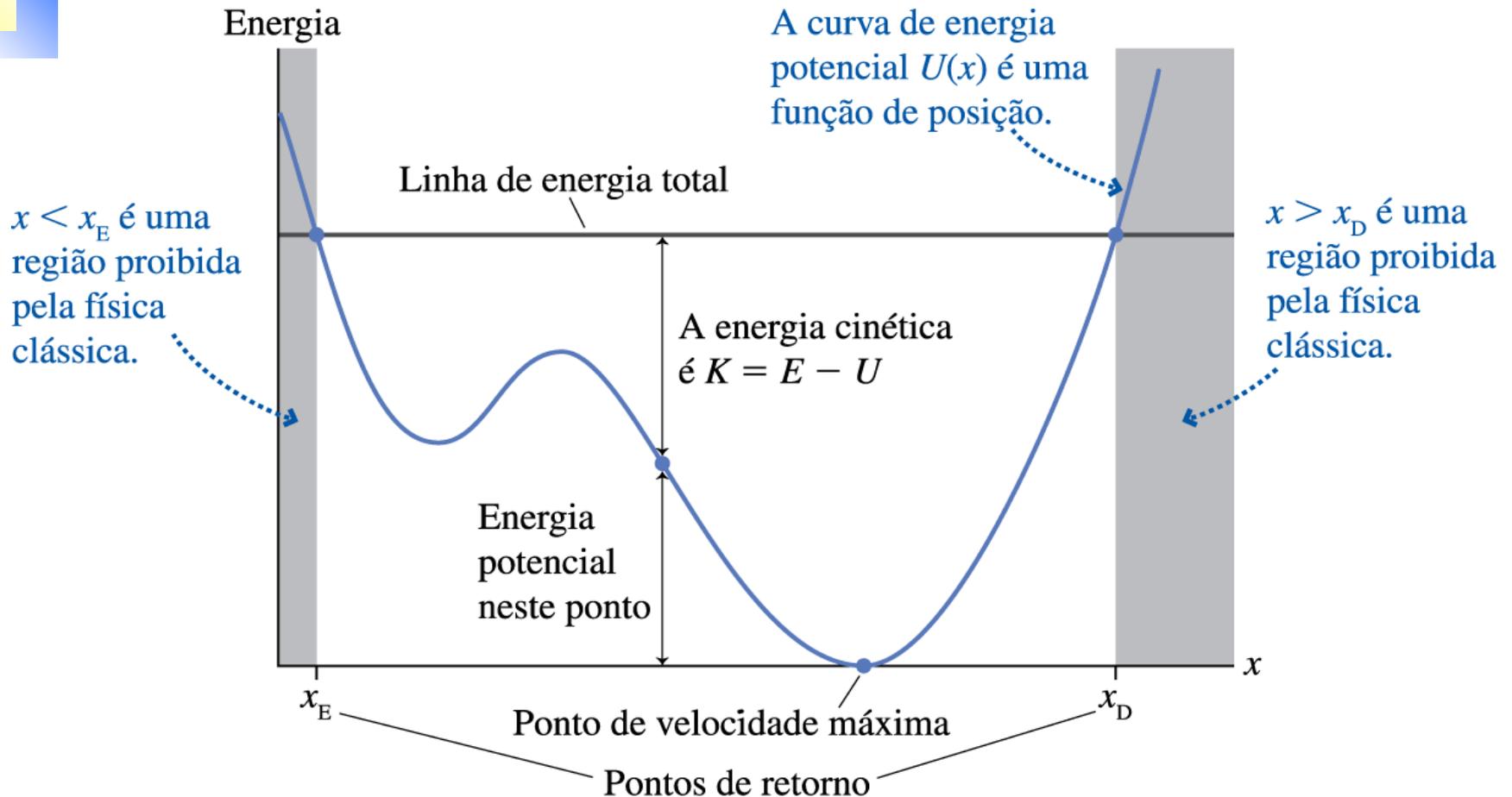
U constante



U dependente de x ($U_g = mgx$)



Recordando: diagramas de energia potencial



Em física clássica: podemos também usar forças, via $F(x) = -dU(x)/dx$

Em MQ: **Não falaremos mais em forças, já que partículas não têm posição bem-definida!**

Resolvendo a Equação de Schrödinger

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

- Eq. diferencial linear, 2ª ordem
- Para cada valor de E há em princípio 2 soluções independentes $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$; Solução geral da forma

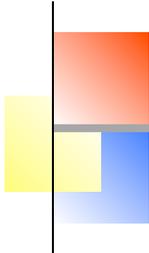
$$\psi(x) = A\psi_1(x) + B\psi_2(x)$$

- Para ser uma solução **física**, $\psi(x)$ deve satisfazer ainda **condições de contorno**:

1. É uma função contínua \longrightarrow $d\psi(x)/dx$ também contínua exceto em pontos x onde $U(x) \rightarrow \infty$

2. Normalizada: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \longrightarrow \psi(x) \rightarrow 0$ para $x \rightarrow \pm\infty$

Em geral **só haverá soluções físicas para certos valores discretos de E**



Resolvendo a Equação de Schrödinger

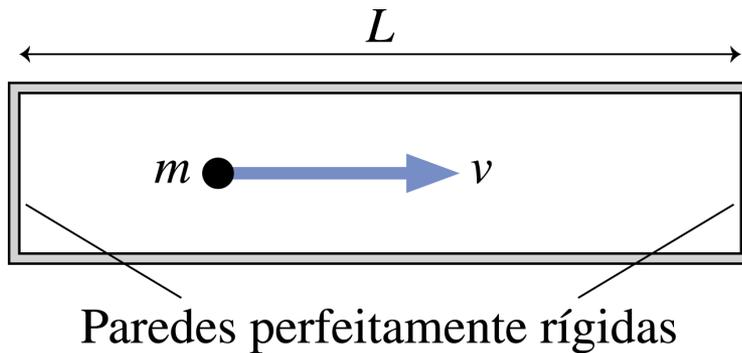
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi(x)$$

Estratégia geral para analisar uma situação física usando esta equação

1. Proponha/chute uma curva $U(x)$ que sirva de **modelo** para essa situação física.
2. Encontre a solução geral para a equação de Schrödinger
3. Imponha as condições de contorno apropriadas, e descubra para quais valores de E existe uma solução que as obedece. Esses serão os níveis de energia permitidos para o sistema! As funções de onda correspondentes são chamadas **estados estacionários**
4. Estude as propriedades dos estados estacionários, notando por exemplo onde há mais probabilidade de encontrar a partícula, como seu comprimento de onda se comporta, etc.

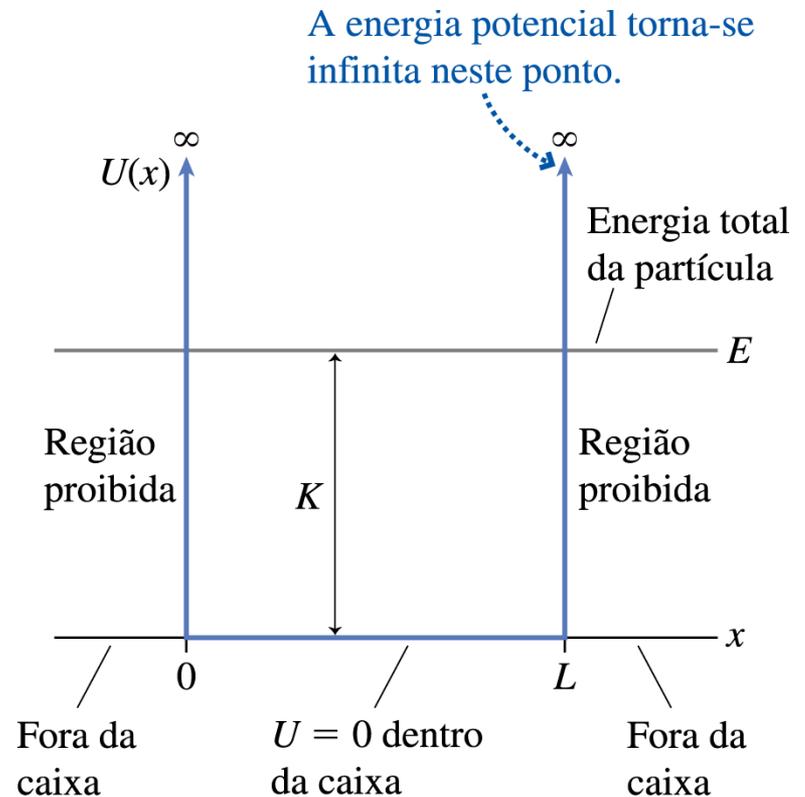
Exemplo: partícula em uma caixa rígida

Situação física (idealizada)



Detalhes da solução – vide quadro/ livro-texto

Modelo



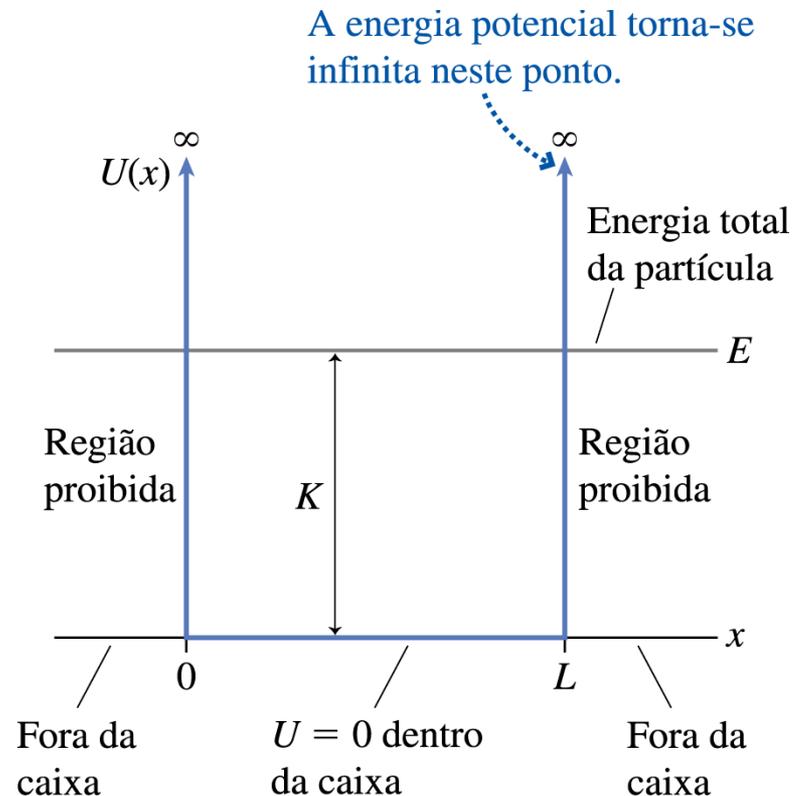
Exemplo: partícula em uma caixa rígida

Modelo

P: qual a solução geral da Eq. de Schrodinger nesse caso ?

- a) $A \sin(kx)$
- b) $A \sin(kx) + B \cos(kx)$
- c) $A \exp(kx)$
- d) $A \exp(kx) + B \exp(-kx)$

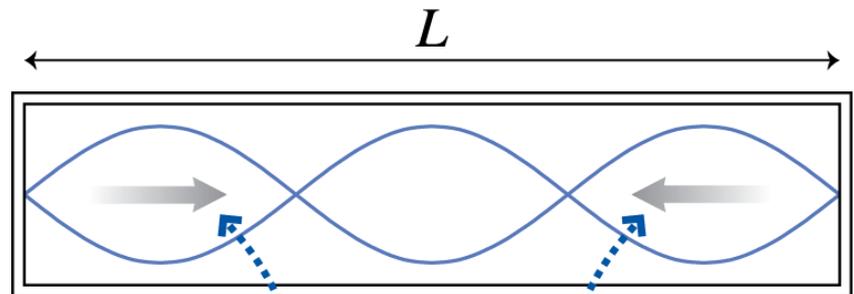
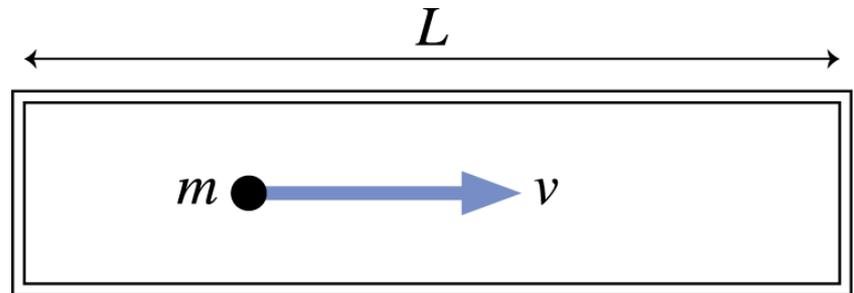
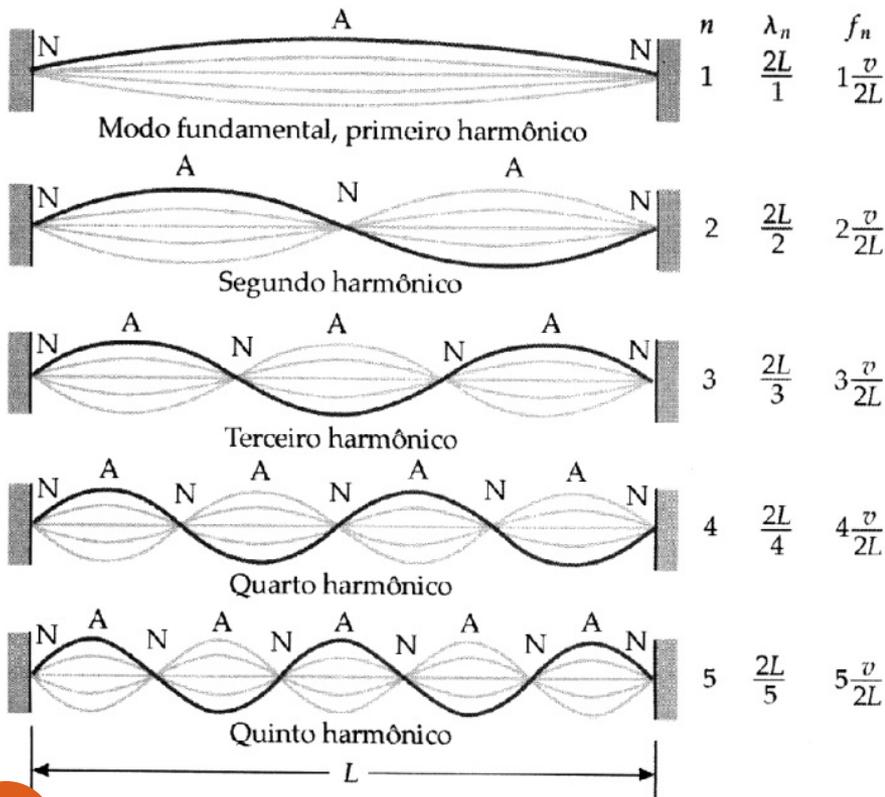
onde $k = (2mK)^{1/2}/\hbar$



Relembrando... do cap 39

Partícula em uma caixa

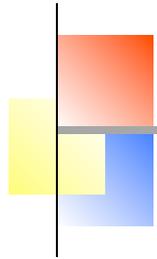
Ressonância e onda estacionária:



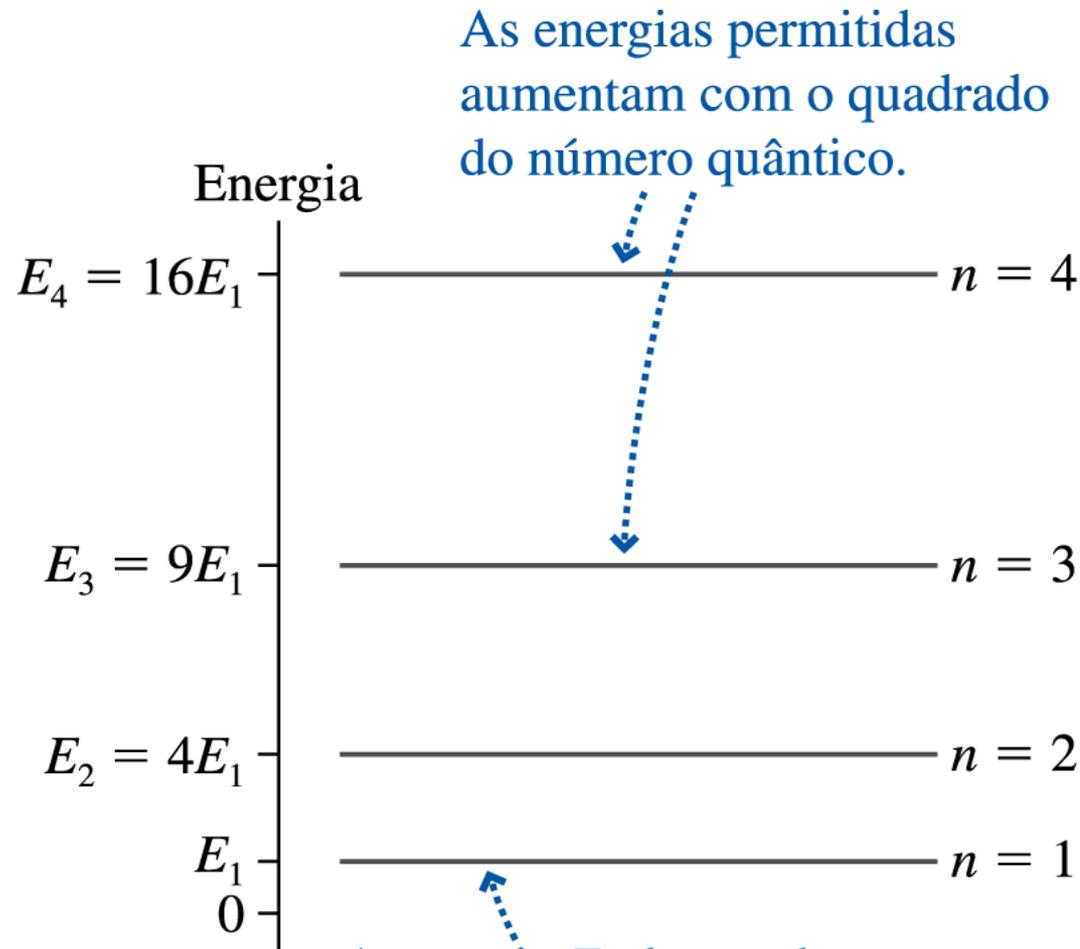
Ondas de matéria se deslocam em ambos os sentidos.

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

Níveis de energia para partícula em uma caixa rígida



$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$



As energias permitidas aumentam com o quadrado do número quântico.

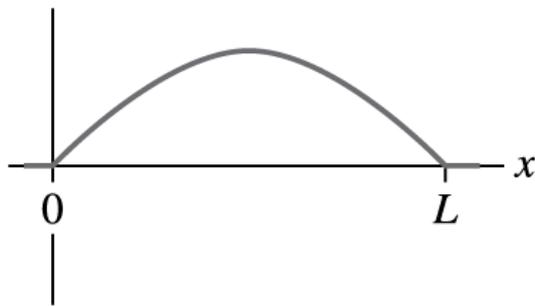
A energia E_1 do estado fundamental é maior do que 0.

necessário para $\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar$!

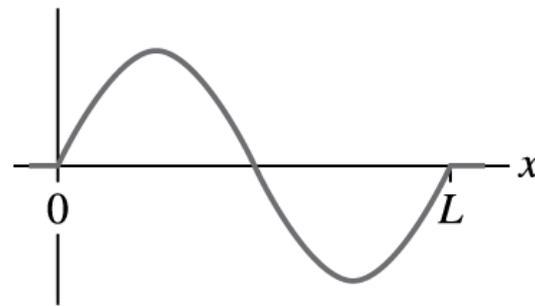
Caixa rígida: Funções de Onda e $P(x)$ para estados estacionários

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

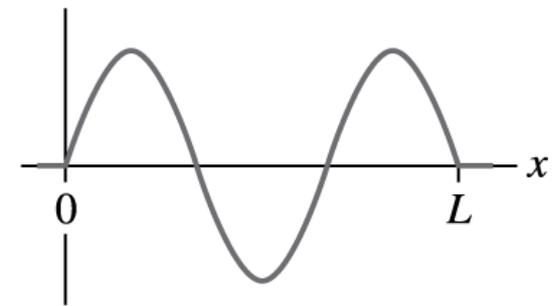
$\psi_1(x)$ $n = 1$



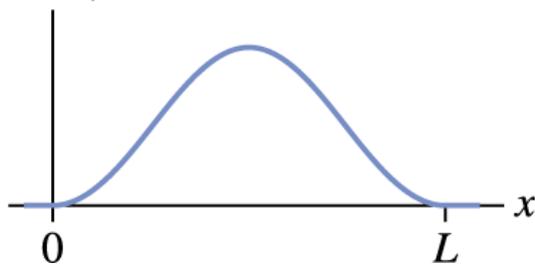
$\psi_2(x)$ $n = 2$



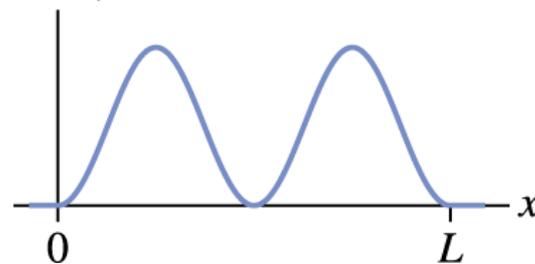
$\psi_3(x)$ $n = 3$



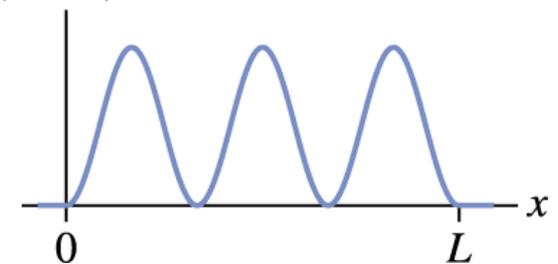
$|\psi_1(x)|^2$



$|\psi_2(x)|^2$



$|\psi_3(x)|^2$

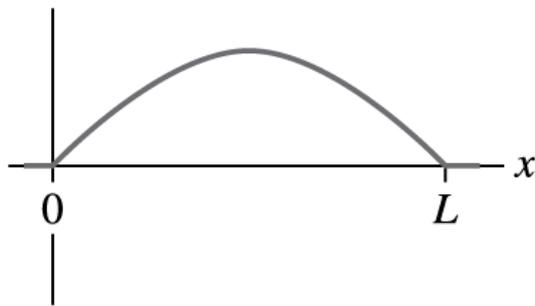


$$P_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L} \operatorname{sen}^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

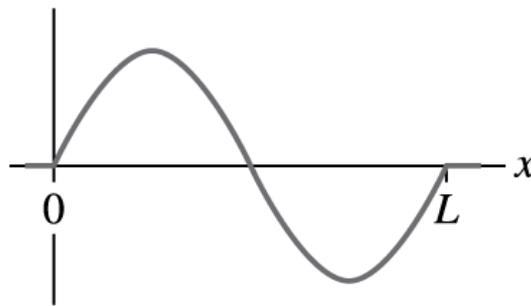
Caixa rígida: Funções de Onda e $P(x)$ para estados estacionários

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

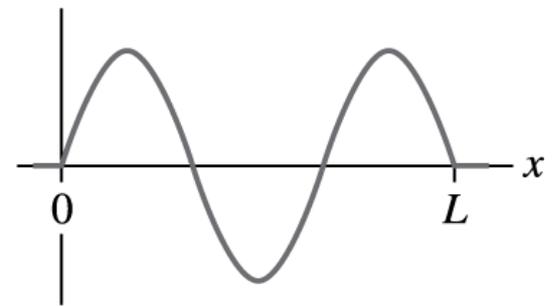
$\psi_1(x)$ $n = 1$



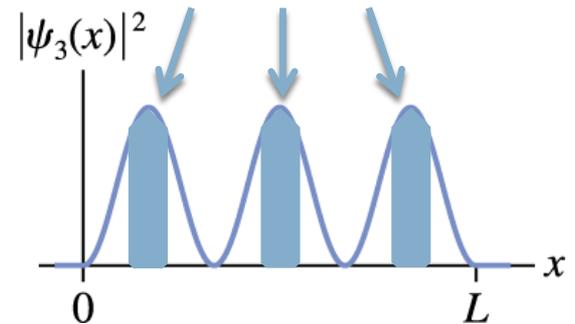
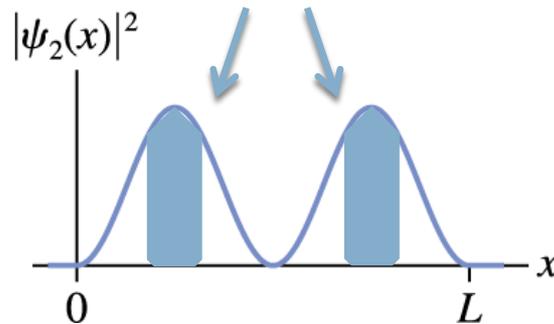
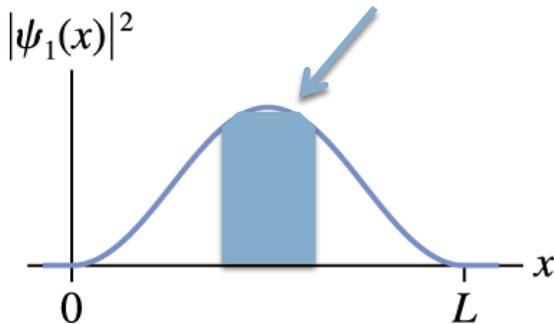
$\psi_2(x)$ $n = 2$



$\psi_3(x)$ $n = 3$

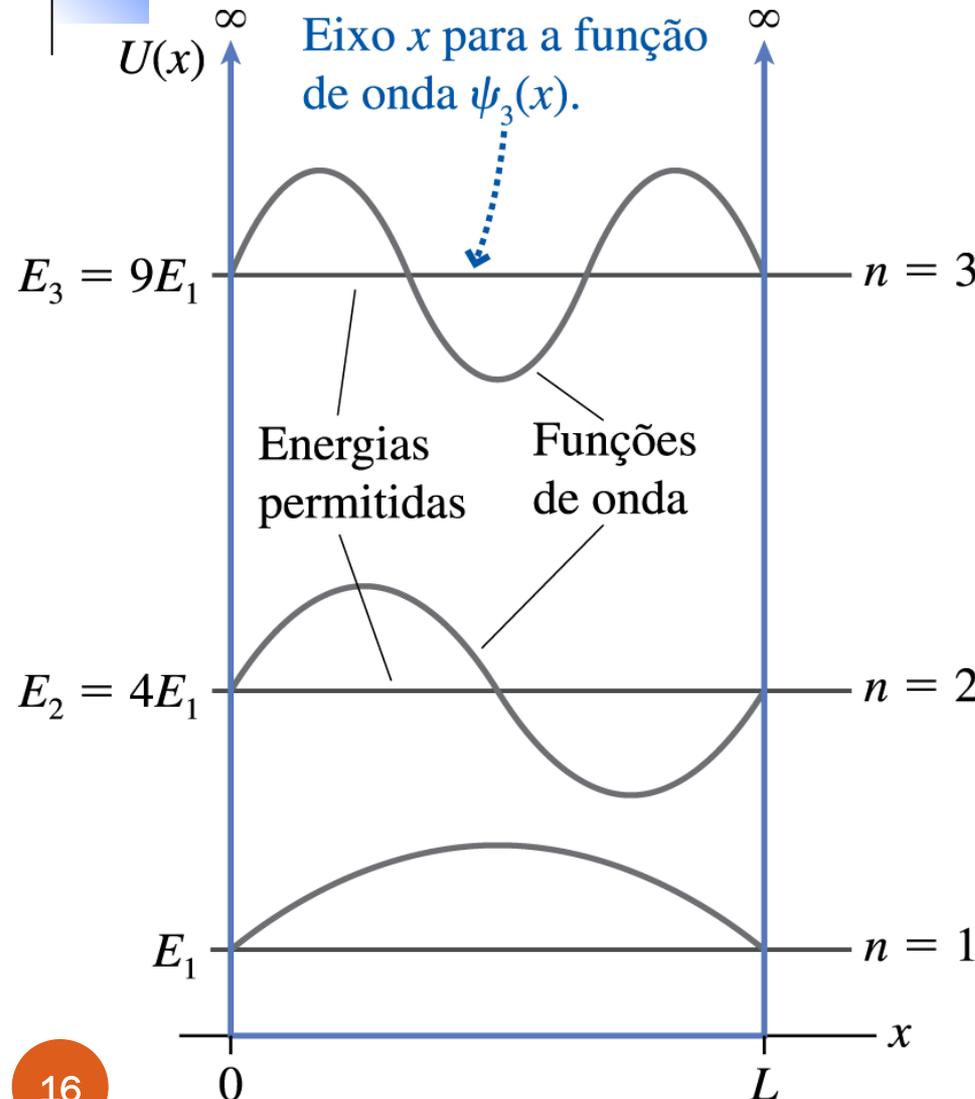


Regiões com maior probabilidade de encontrarmos a partícula



$$P_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L} \operatorname{sen}^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

Funções de Onda e Energias do poço infinito: diagrama compacto



Mesmo eixo x para níveis de energia e funções de onda.

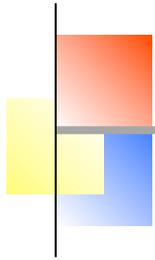
Eixo y tem dupla função:

- para os níveis, representa valores de energia;
- para as funções de onda representa amplitude.

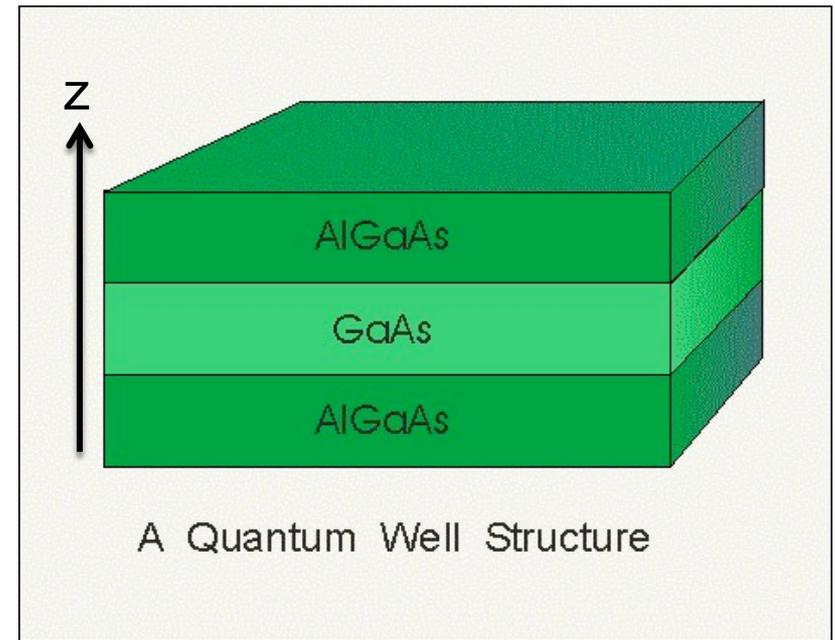
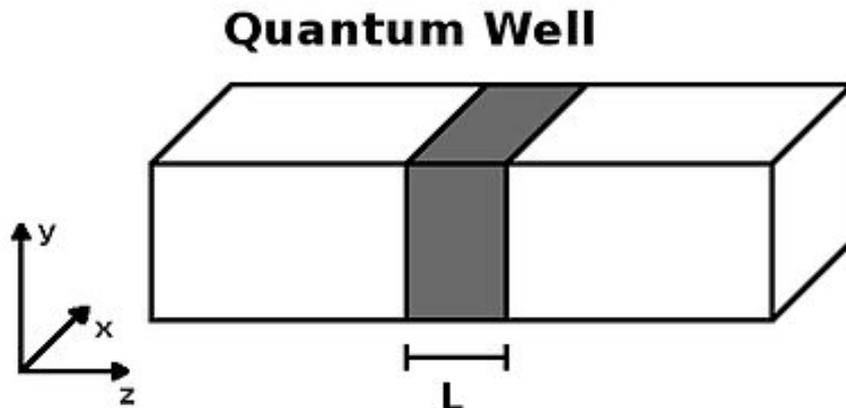
Ainda, cada função de onda ψ_n está representada como se o zero do 'seu' eixo y estiver na altura da energia E_n correspondente

Note que: $\psi_n(x)$ possui **(n-1) nós** (zeros), excluídos os extremos, e **n antinodos** (máximos e mínimos)

Realização física (aproximada): poço quântico



Poço quântico: estrutura formado 'sandwichando' um material entre dois outros (em geral ambos semicondutores), tais que elétrons necessitem de um grande energia para passar do material do meio para o das bordas



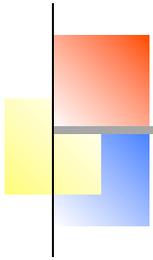
Exemplo: estimando o tamanho de um 'poço quântico'

Exercício: um elétron está contido em um poço quântico 1D com um comprimento L desconhecido. Inicialmente, esperamos o dispositivo emitir espontaneamente toda a sua energia, e depois o iluminamos com radiação de diferentes frequências. Verificamos que os maiores comprimentos de onda que ele é capaz de absorver são $\lambda_a = 411\text{nm}$ e $\lambda_b = 1098\text{nm}$. Qual é o comprimento do poço?

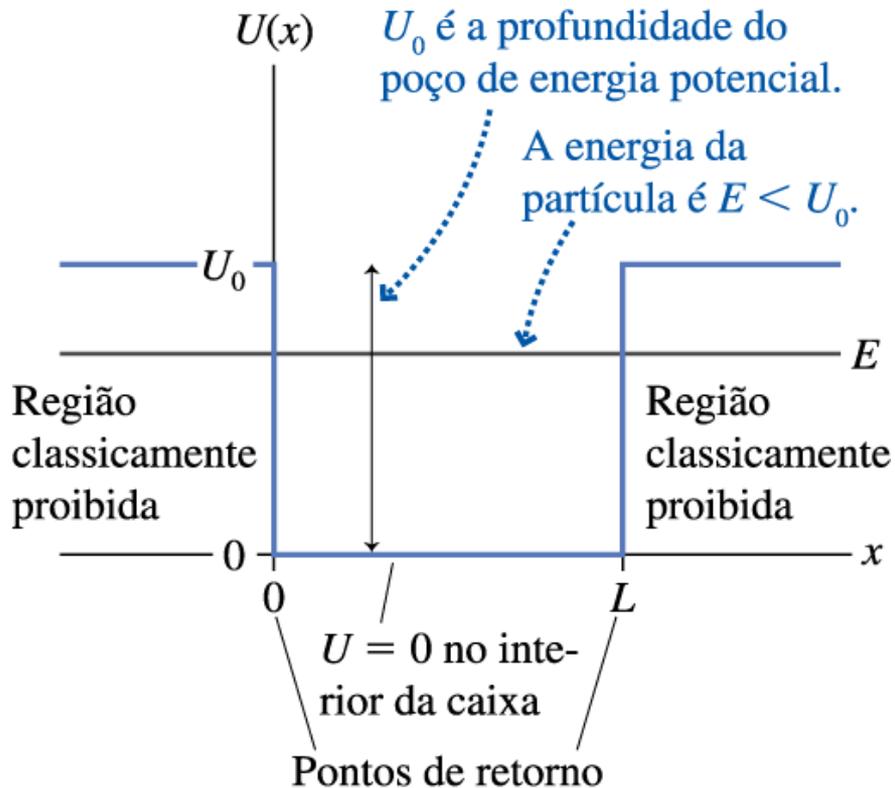
$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad \begin{array}{l} h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ N.m} \\ m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \end{array}$$

R: $L \sim 1 \text{ nm!}$

Poço de Potencial Finito



(a) $U = 0$ no interior do poço



ex: bom modelo para um elétron num fio!

ar **fio** ar

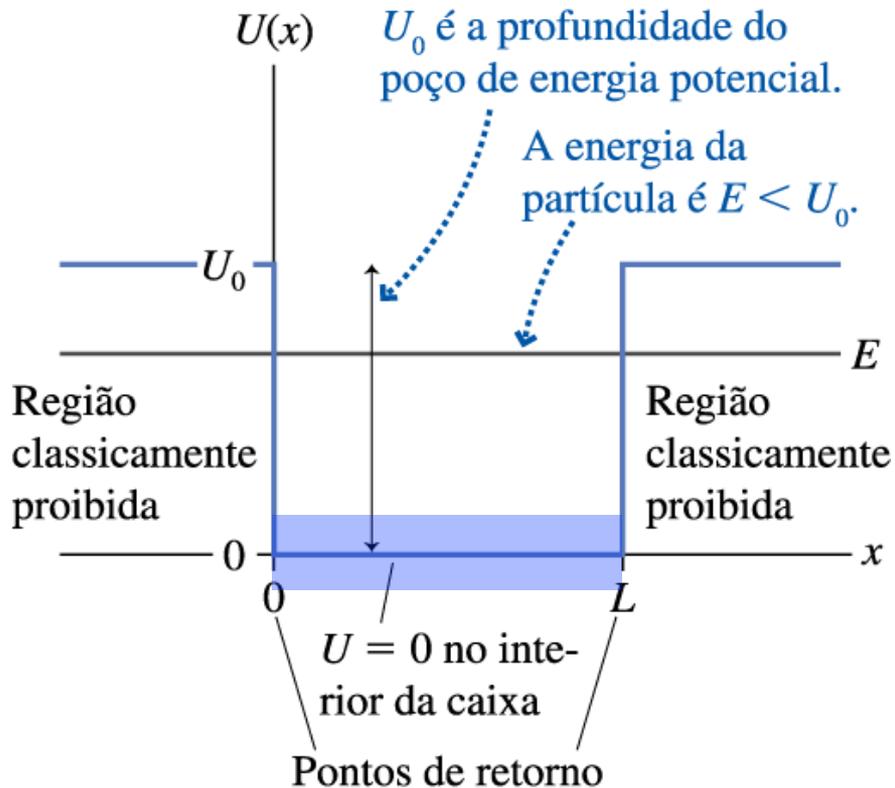
$U_0 - E_1 \leftrightarrow$ 'função trabalho' !

Pró: modelo mais realista que o poço infinito qdo a partícula tem energia que não é desprezível comparada à da 'barreira'

Contra: modelo mais difícil de resolver matematicamente.

Poço de Potencial Finito

(a) $U = 0$ no interior do poço



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

Solução geral no **interior** do poço:
igual à do poço infinito!

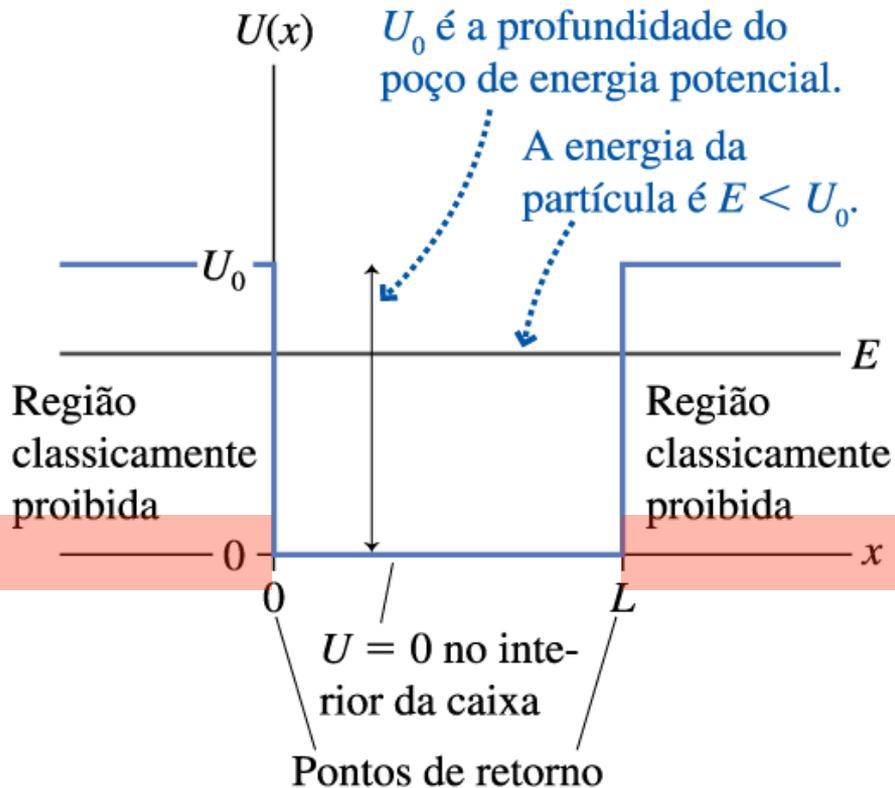
$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$$

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

Porém... condições de contorno diferentes!

Poço de Potencial Finito

(a) $U = 0$ no interior do poço



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

Solução geral no **exterior** do poço (região classicamente proibida):

$$\psi(x) = C \exp(x/\eta) + D \exp(-x/\eta)$$

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

Impondo a condição de contorno:

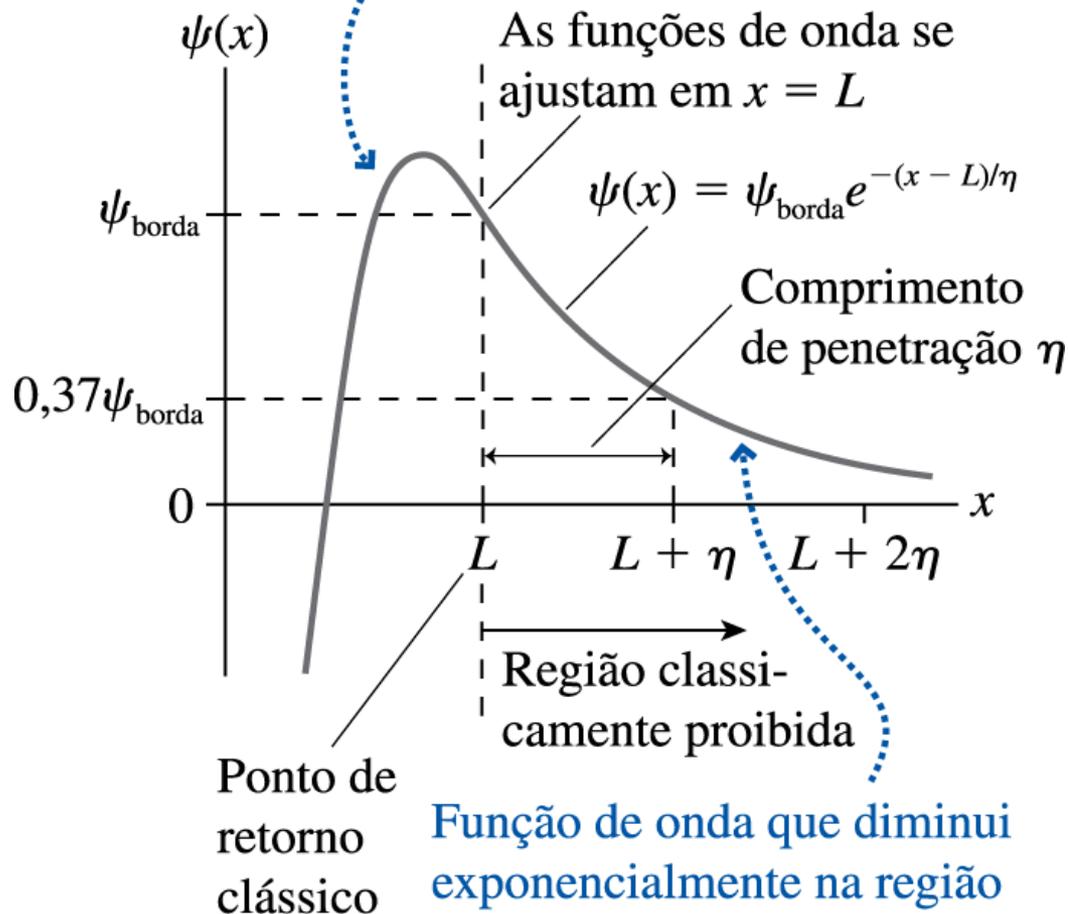
$$\psi(x) \rightarrow 0 \text{ para } x \rightarrow \pm\infty$$

$$\psi(x \geq L) = \psi(L) \exp\left[-\left(\frac{x-L}{\eta}\right)\right]$$

$$\psi(x \leq 0) = \psi(0) \exp\left[\frac{x}{\eta}\right]$$

Funções de Onda na região classicamente proibida

A função de onda é oscilatória dentro do poço de potencial

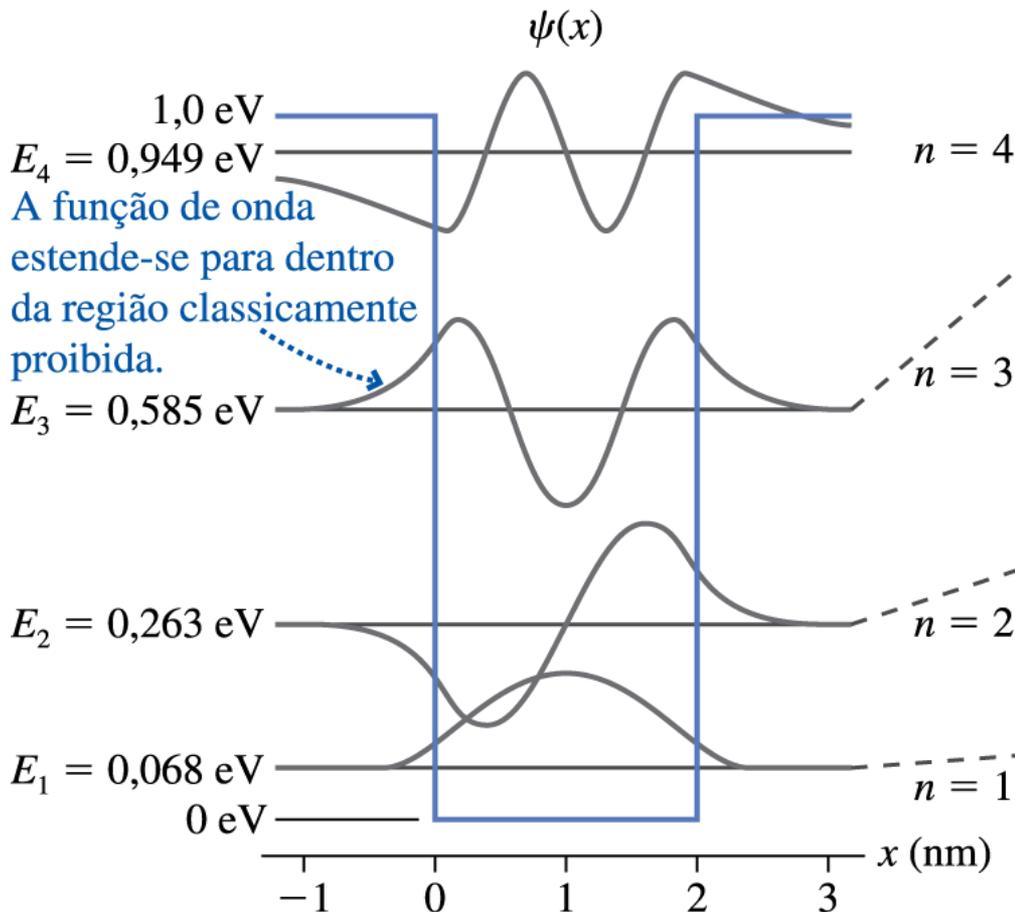


1) o comprimento de penetração η depende do inverso de $E - U_0$, ou seja, quanto menor for essa diferença, maior será a penetração na região classicamente proibida.

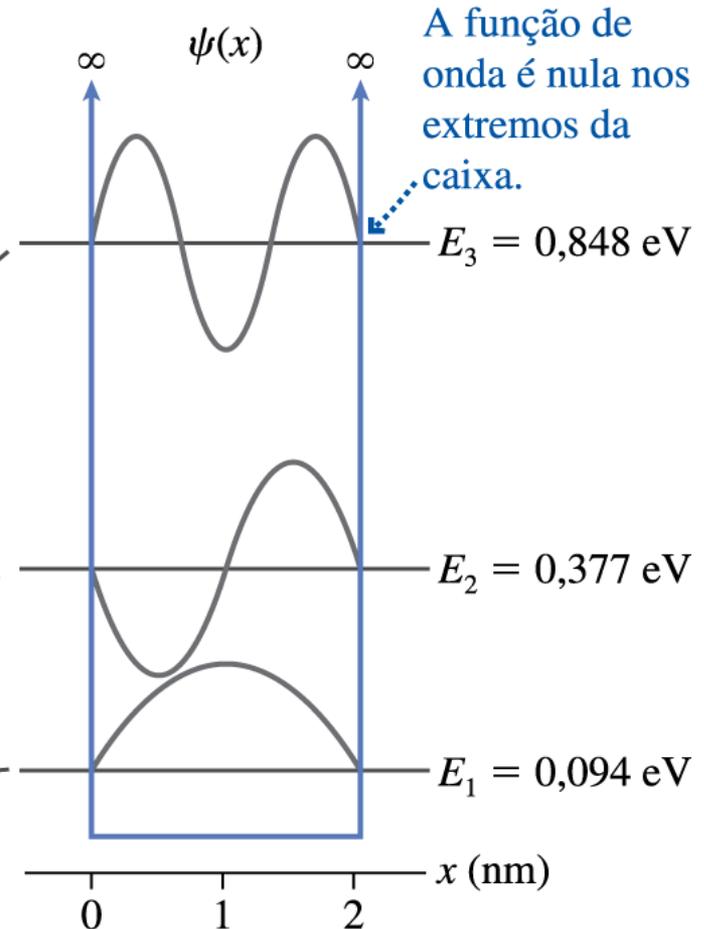
2) Da mesma forma, η depende do inverso da massa, ou seja quanto mais leve a partícula, maior será a penetração na região classicamente proibida.

Comparando soluções dos poços de potencial Finito e Infinito de mesma largura

(a) Poço de potencial finito

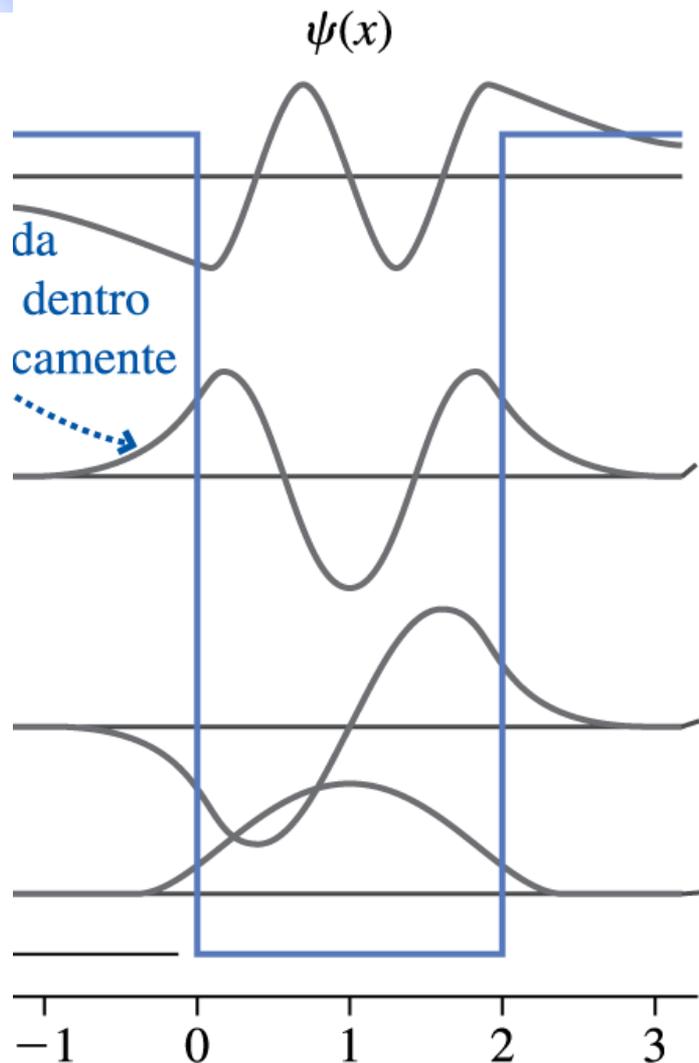


(b) Partícula em uma caixa rígida

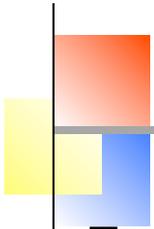


Para o mesmo n , poço finito tem oscilações mais 'largas'
→ λ maior → p menor → K menor → E menor!

Funções de onda do Poço de Potencial Finito



- 1) A energia é quantizada.
- 2) Existe apenas um número finito de estados ligados.
- 3) Funções de onda são qualitativamente semelhantes àsquelas da partícula em uma caixa rígida.
- 4) Porém, aqui elas se estendem para as regiões classicamente proibidas.
- 5) Energia do nível n do poço finito é sempre inferior à do nível n do poço infinito

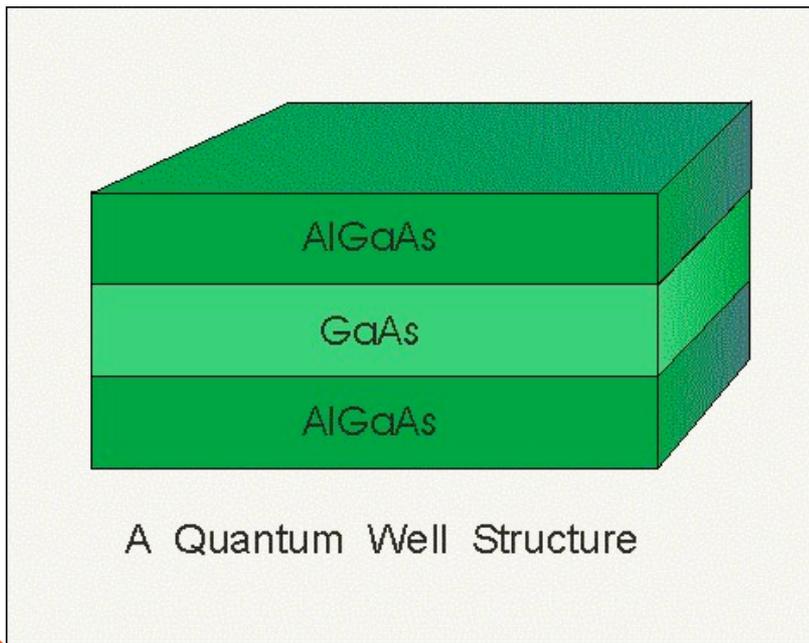


Funções de onda do Poço de Potencial Finito

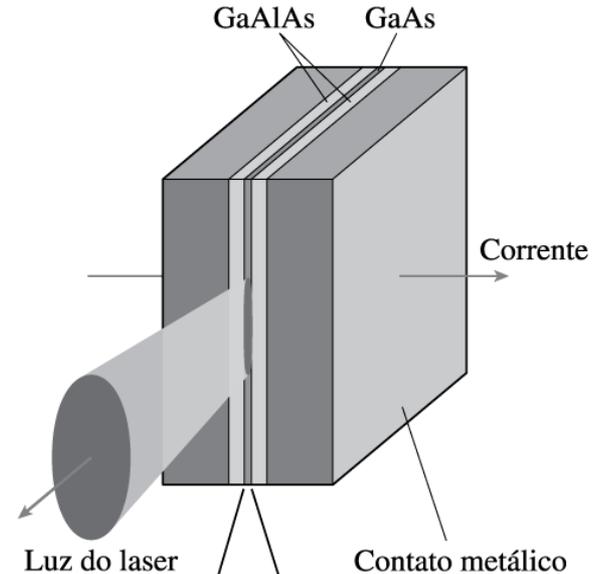
Ex. 41.7 - Um elétron encontra-se confinado em uma região de largura 2,0 nm e com profundidade de potencial igual a 1,0 eV. Qual é o comprimento de onda de penetração na região classicamente proibida para um elétron nos estados $n = 1$ e $n = 4$?

Poço de Potencial Finito - Aplicações

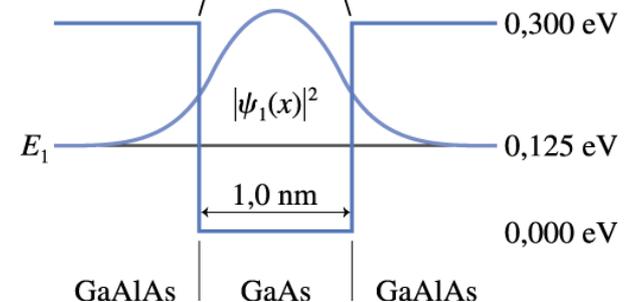
Física de materiais: modelo um pouco melhor para um poço quântico



(a) Laser de poço quântico

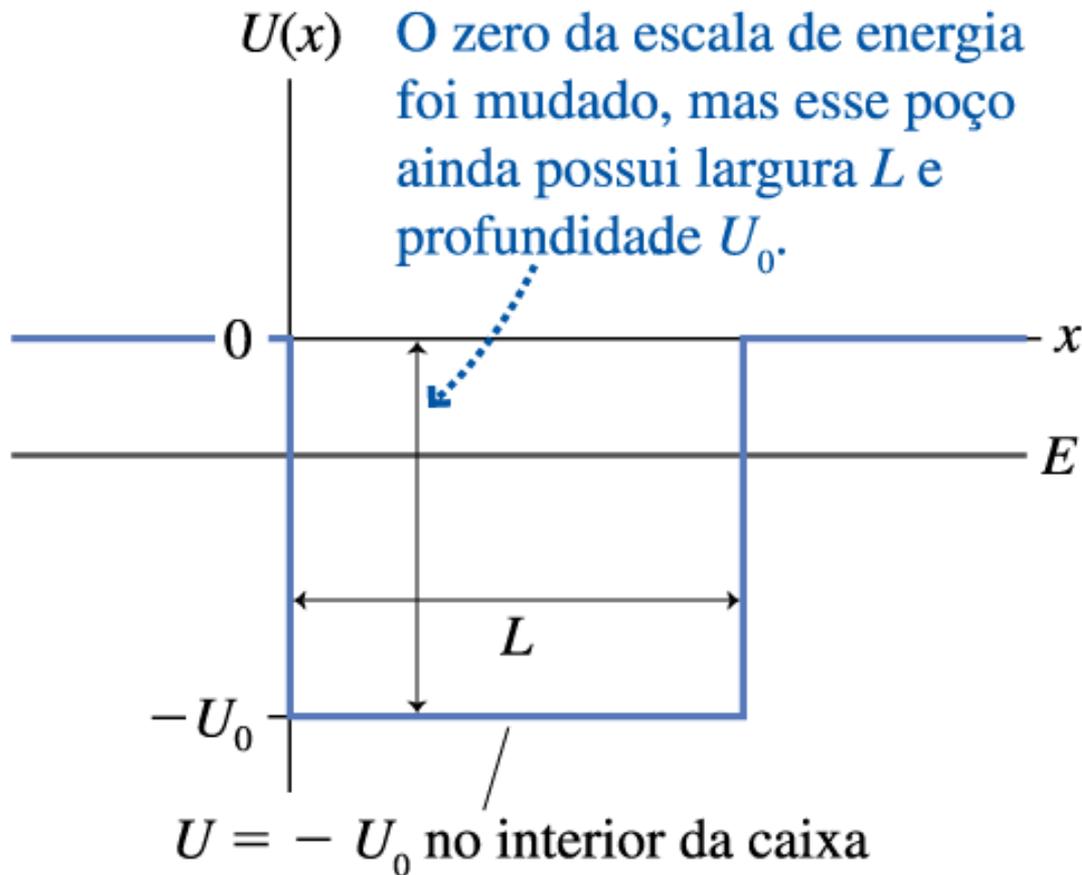


(b)



Poço de Potencial Finito – descrição alternativa

(b) $U = 0$ no exterior do poço



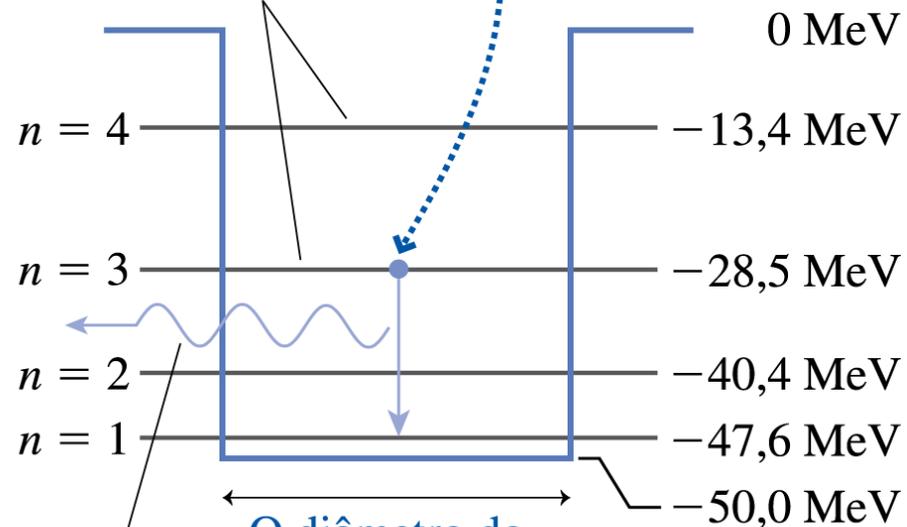
Poço de Potencial Finito - Aplicações

Física Nuclear – modelo simples para potencial sentido pelo nêutron num núcleo

Devido ao pequeno tamanho do núcleo, (representado aqui pela largura do poço), as energias das transições nucleares são $\sim 10^6$ maiores que as das transições eletrônicas!

Um decaimento radioativo deixou o nêutron em um estado excitado $n = 3$. O nêutron salta para o estado fundamental $n = 1$, emitindo um fóton de raio gama.

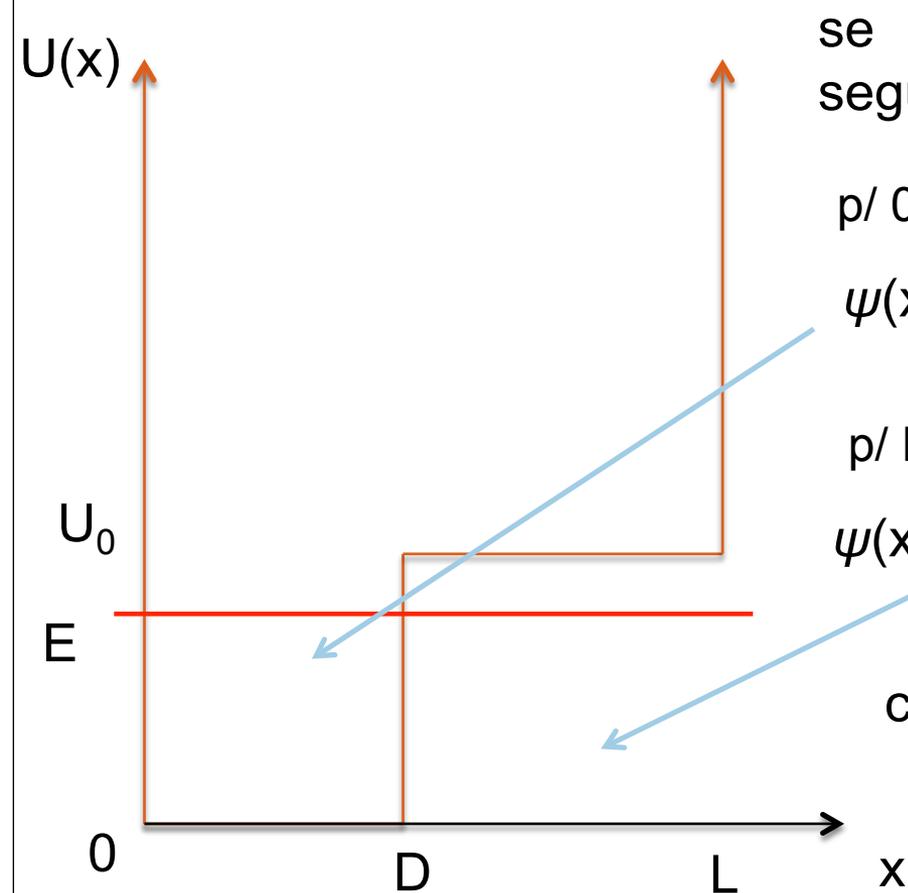
Níveis de energia para um nêutron em um núcleo



Emissão de raio gama

Poços de potencial gerais: análise qualitativa das funções de onda de estados ligados

Exemplo: poço infinito com 'degrau'



se $E < U_0$, a eq. de Schrödinger tem a seguinte solução geral:

p/ $0 \leq x \leq D$:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx), \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

p/ $D \leq x \leq L$:

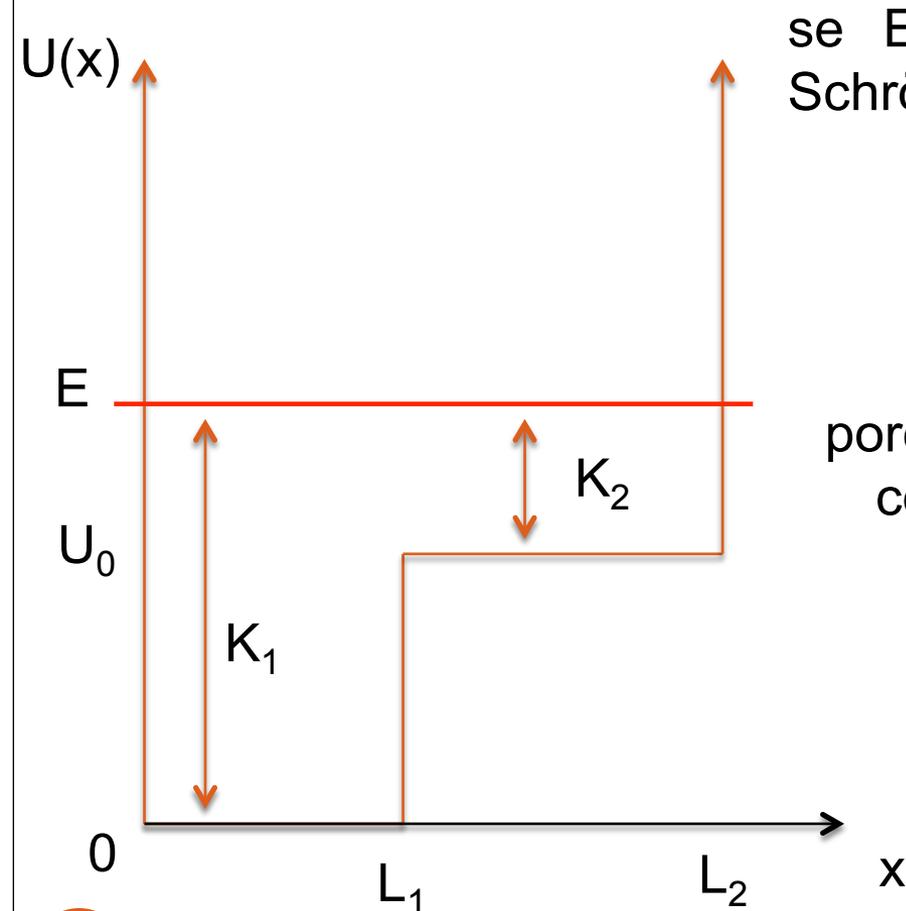
$$\psi(x) = C\exp(x/\eta) + D\exp(-x/\eta), \quad \eta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

condições de contorno: $\psi(0) = \psi(L) = 0$

e tb ψ e ψ' contínuos em $x = D$

Poços de potencial gerais: análise qualitativa das funções de onda de estados ligados

Exemplo: poço infinito com 'degrau'



se $E > U_0$, a solução geral da eq. de Schrödinger tem a forma

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx),$$

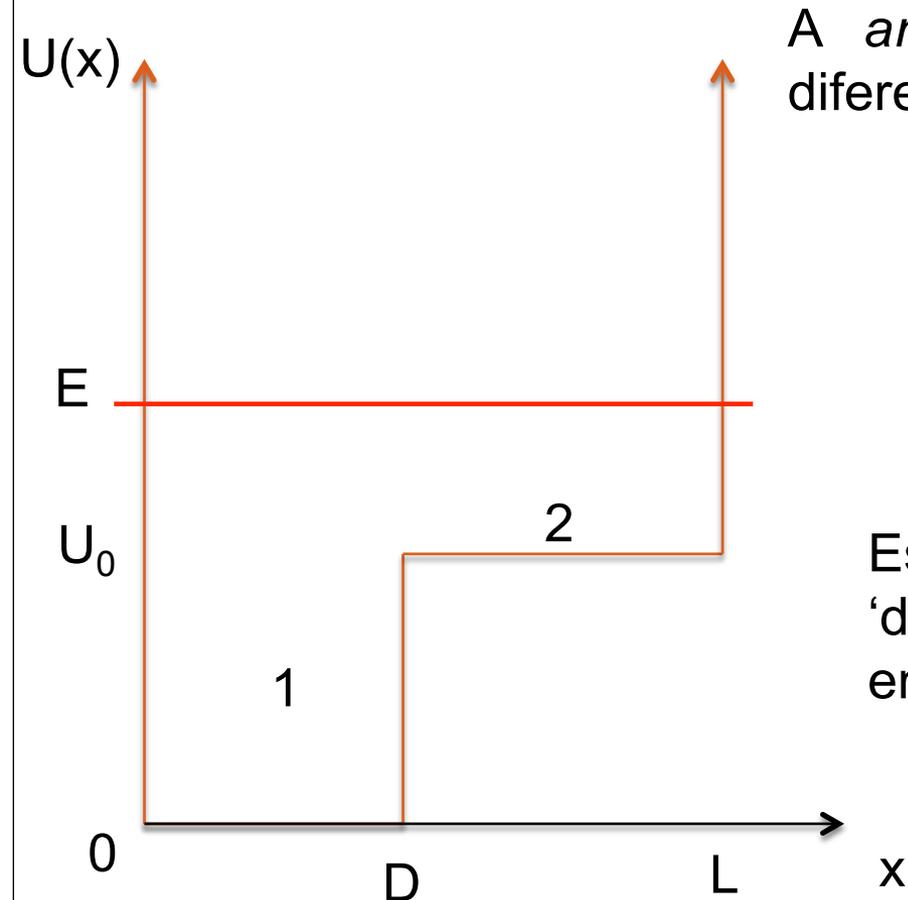
porém
com

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ para } 0 \leq x \leq D \\ k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}, \text{ para } D \leq x \leq L \end{array} \right.$$

O número de onda é *menor* (i.e., o comprimento de onda é *maior*) no lado onde a energia cinética $K(x) = E - U(x)$ é menor

Poços de potencial gerais: análise qualitativa das funções de onda de estados ligados

Exemplo: poço infinito com 'degrau'



A *amplitude* das oscilações também é diferente nas duas regiões. Reescrevendo

$$\psi(x) = C \cos(kx + \varphi)$$



$$\psi^2(x) + (\psi'(x))^2 / k^2 = C^2$$

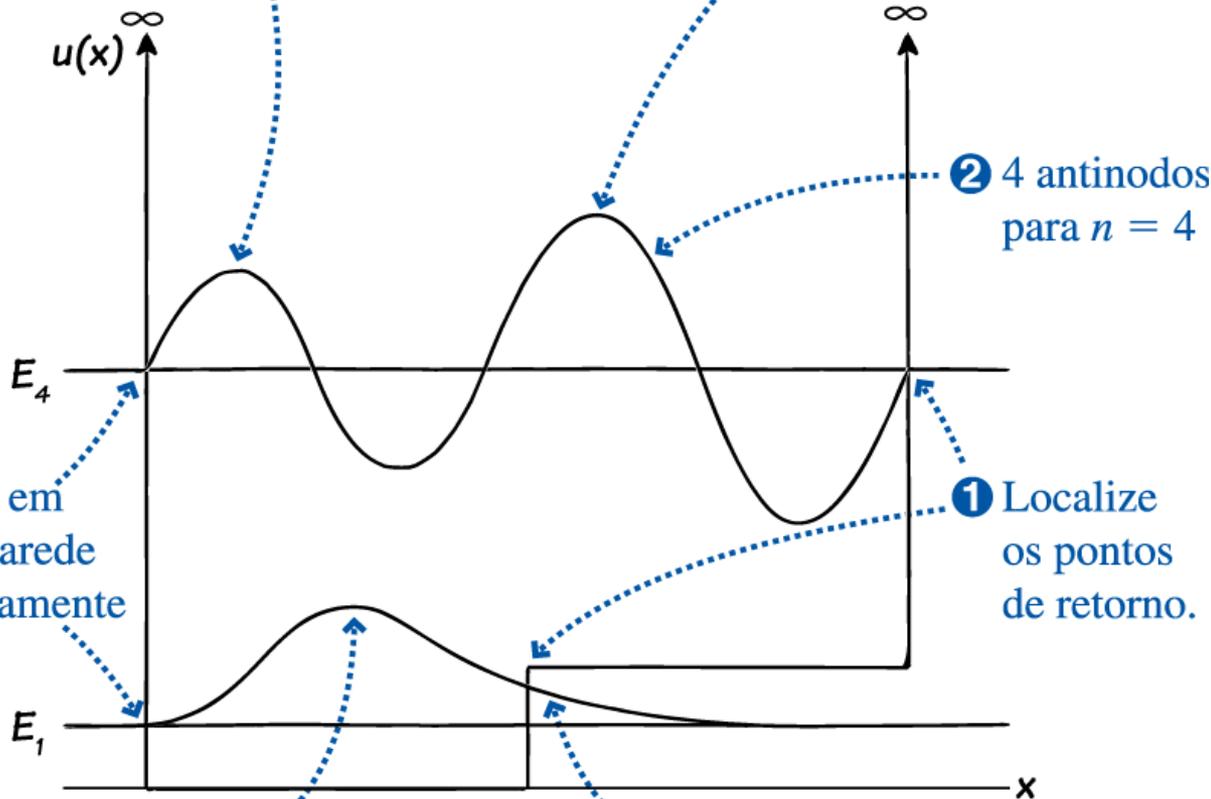
Essa expressão vale dos 2 lados do 'degrau'. Mas como ψ e ψ' são contínuos em $x = D$, e $1/k_1 < 1/k_2$, segue que

$$C_1 < C_2$$

Poços de potencial gerais: análise qualitativa das funções de onda de estados ligados

③ Comprimentos de onda menores e amplitudes menores onde K for maior.

③ Comprimentos de onda maiores e amplitudes maiores onde K for menor.



④ $\psi = 0$ em uma parede infinitamente alta.

② 4 antinodos para $n = 4$

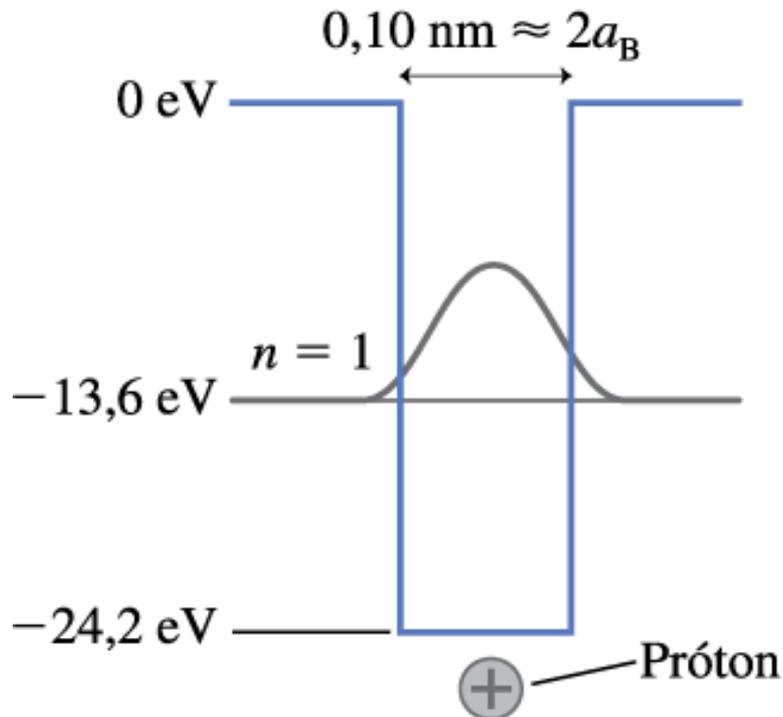
① Localize os pontos de retorno.

② 1 antinodo para $n = 1$

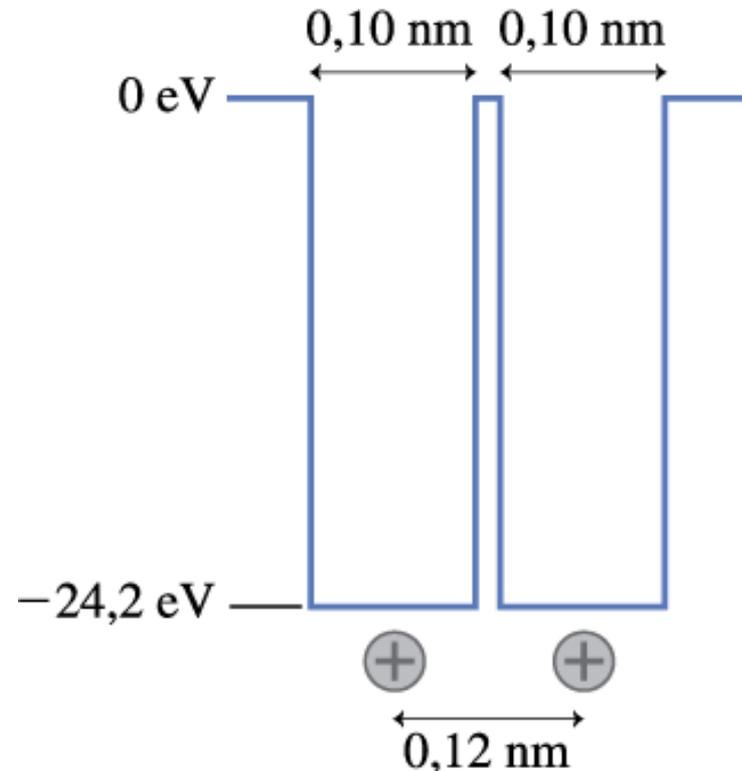
⑤ Decaimento exponencial no interior da região classicamente proibida.

Ligação química covalente

(a) Modelo unidimensional simples de um átomo de hidrogênio

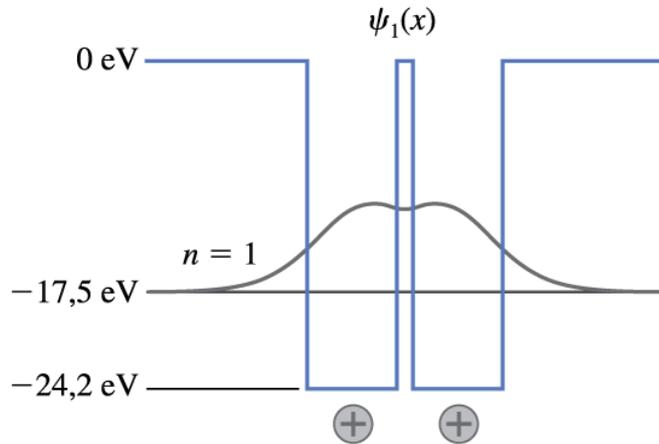


(b) Modelo da molécula de H_2^+ considerada como um elétron ligado a dois prótons separados por $0,12 \text{ nm}$

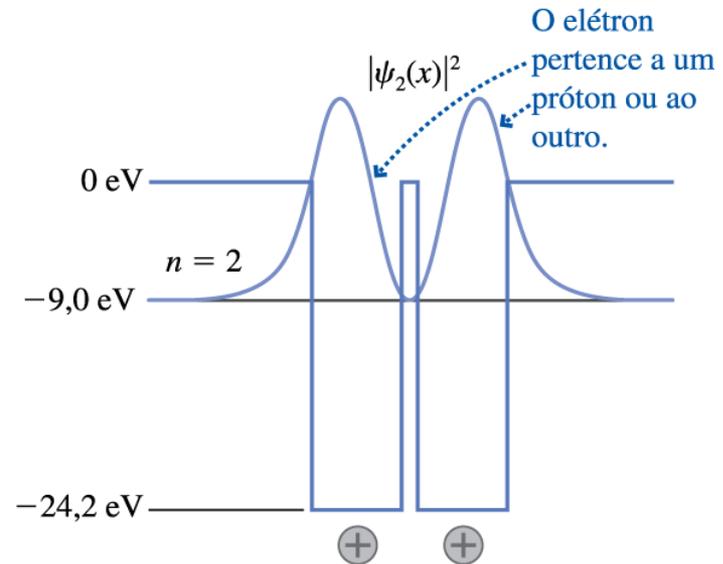
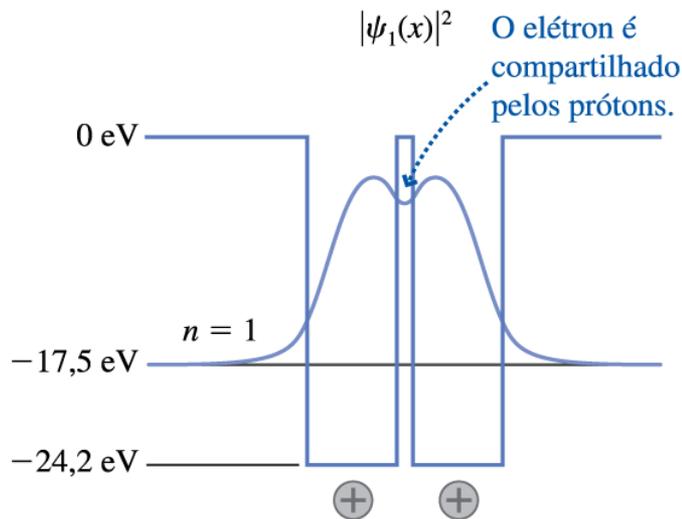
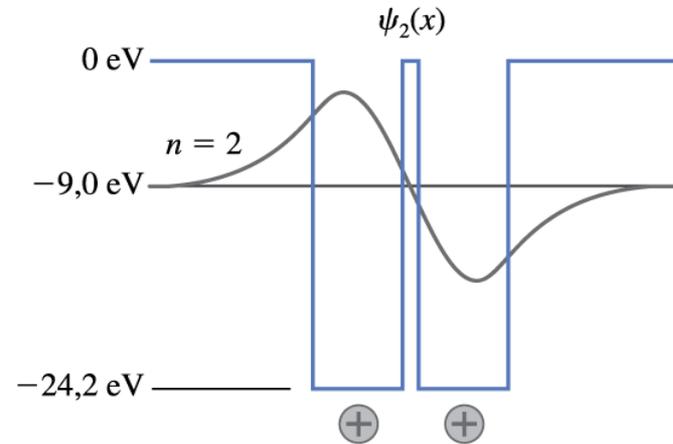


Ligação química covalente

(a) Orbital ligante



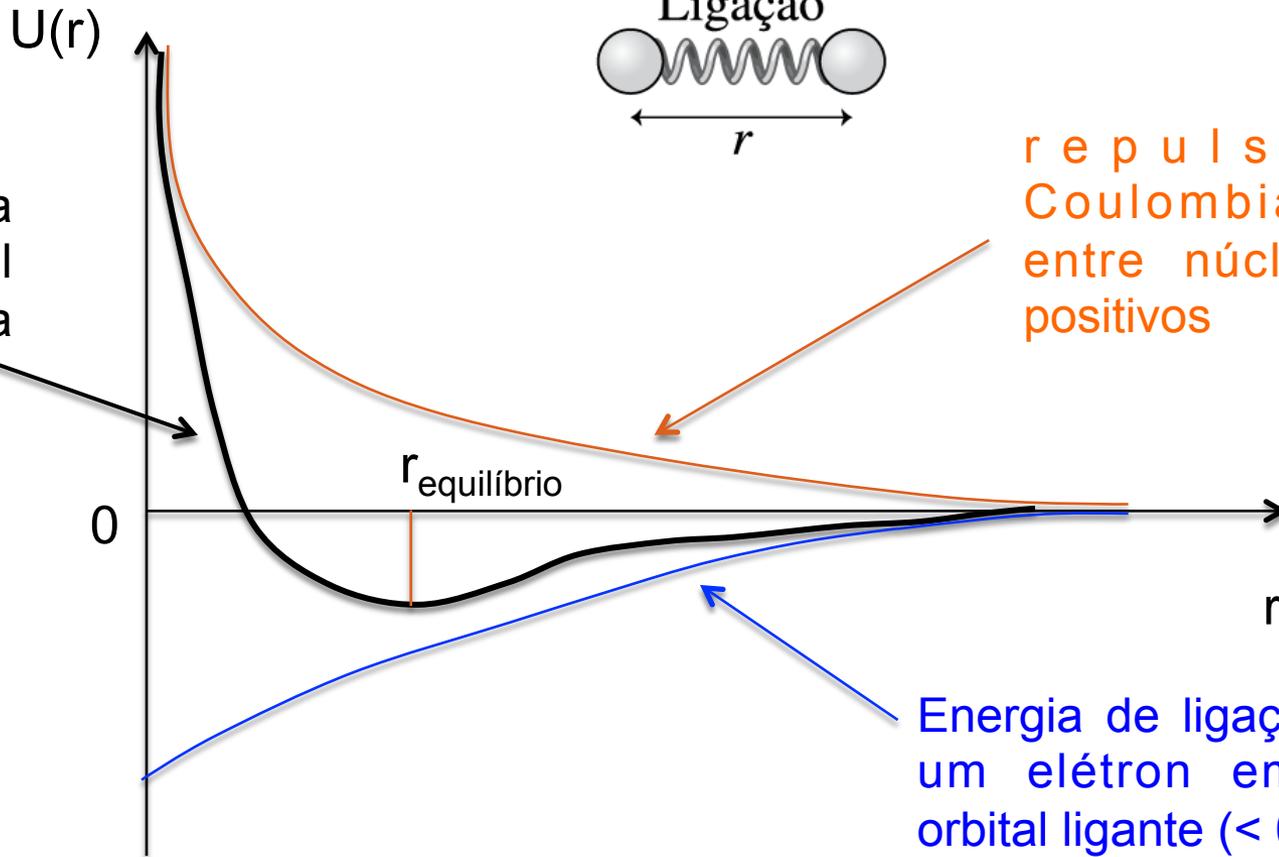
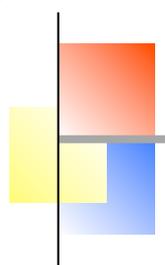
(b) Orbital antiligante



Energia **diminui** com a distância entre os núcleos

Energia **aumenta** com a distância entre os núcleos

Ligação química covalente



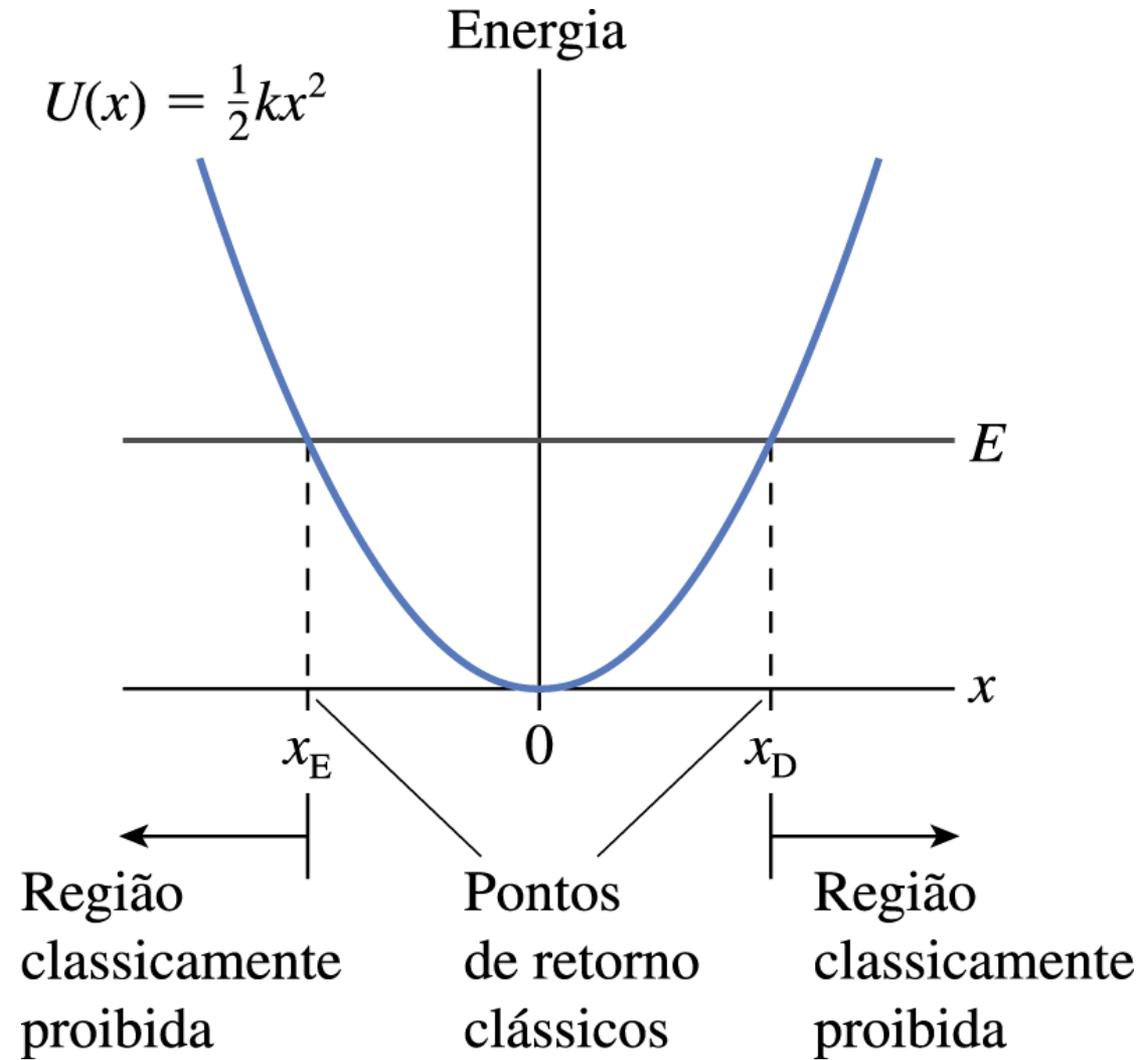
Energia potencial total da molécula

repulsão Coulombiana entre núcleos positivos

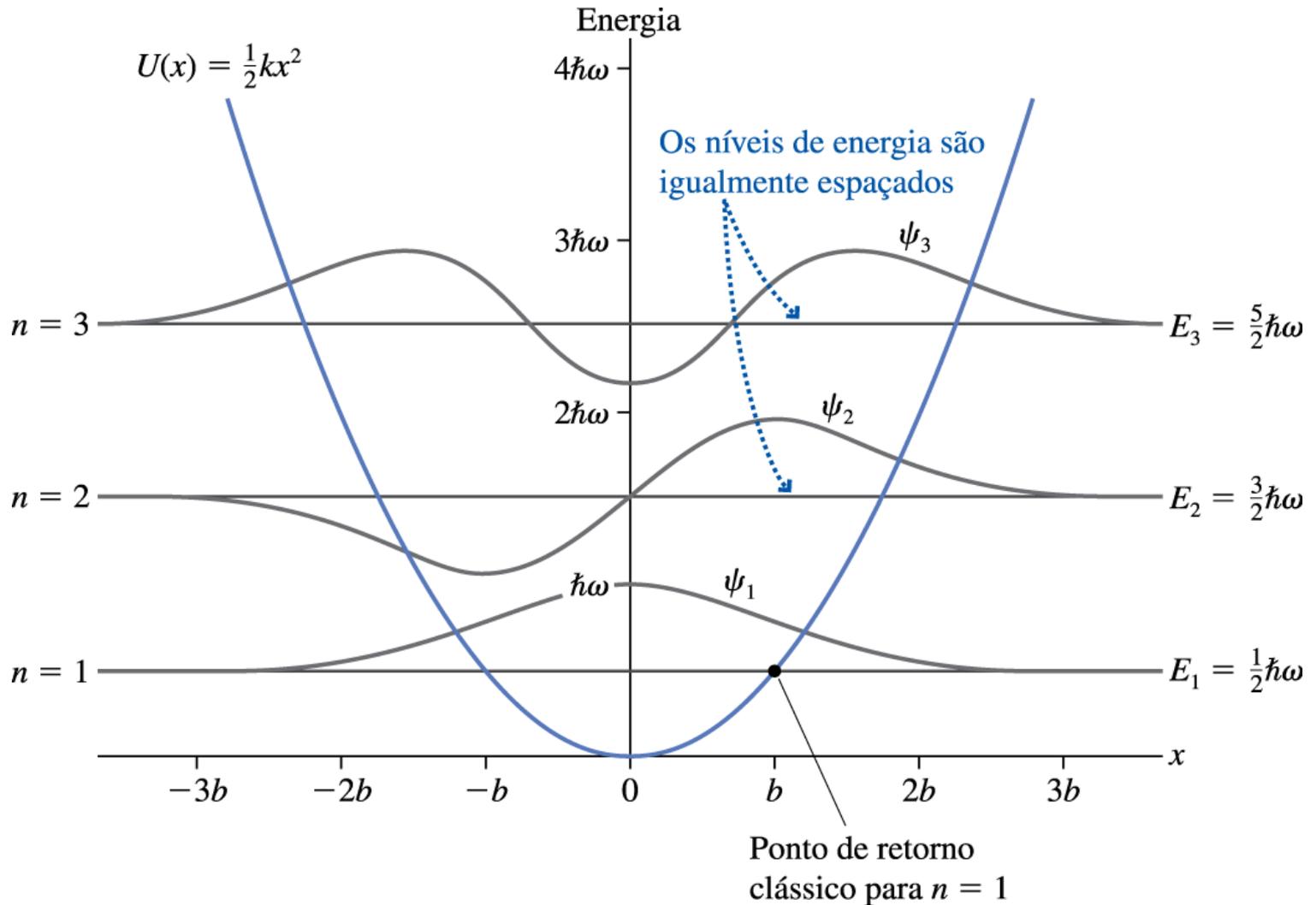
Energia de ligação de um elétron em um orbital ligante (< 0)

tipicamente $r_{\text{equilíbrio}} \sim 10^{-1} \text{ nm a } 1 \text{ nm}$ (dimensões atômicas)

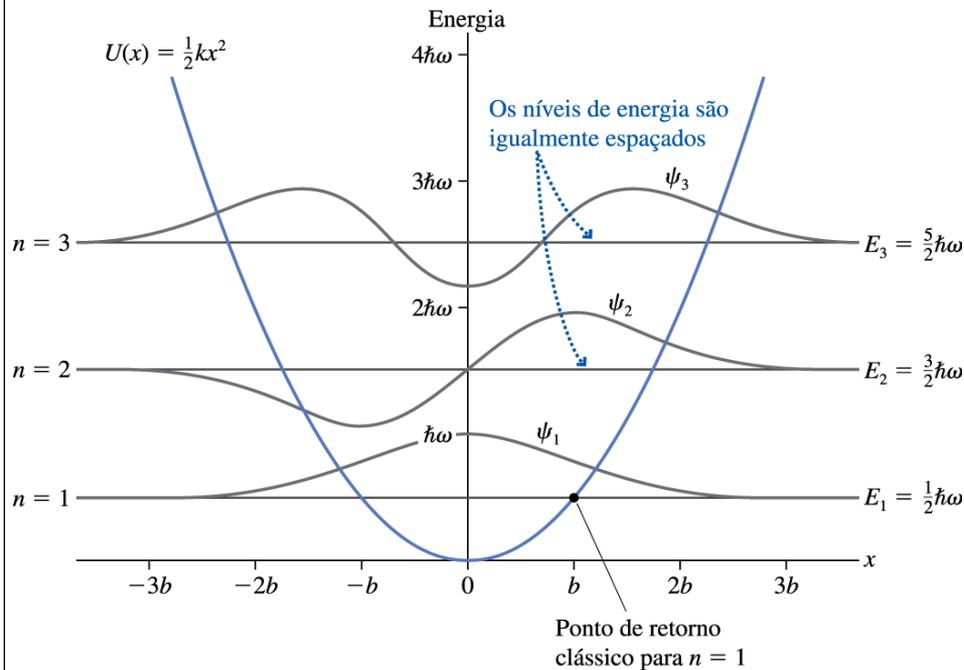
Oscilador Harmônico Clássico



Oscilador Harmônico Quântico



Oscilador Harmônico Quântico



Eq. Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{1}{2}kx^2 \right] \psi(x)$$

Primeiras soluções

$$\psi_1(x) = A_1 e^{-x^2/2b^2}$$

$$\psi_2(x) = A_2 \frac{x}{b} e^{-x^2/2b^2} \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

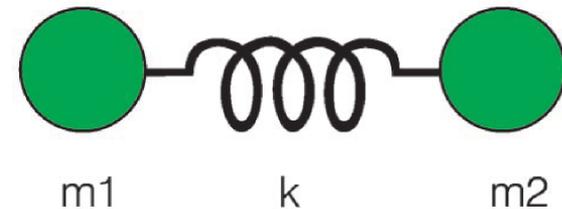
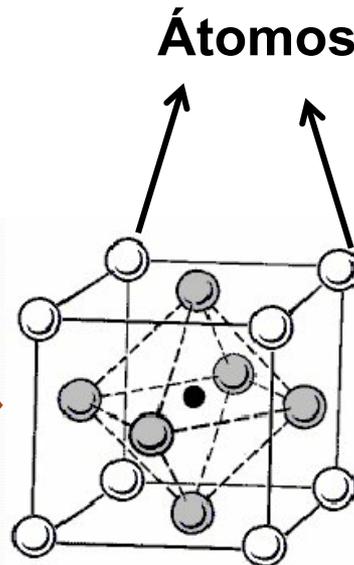
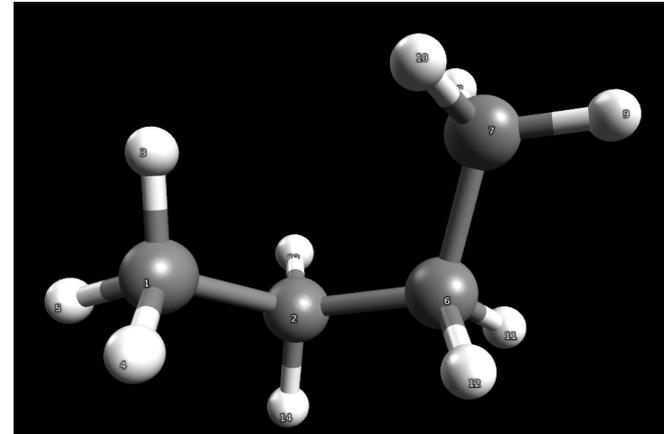
$$\psi_3(x) = A_3 \left(1 - \frac{2x^2}{b^2} \right) e^{-x^2/2b^2}$$

Energias: $E_n = (n-\frac{1}{2}) \hbar\omega$

Espaçamento uniforme:

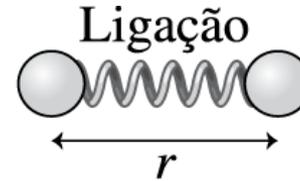
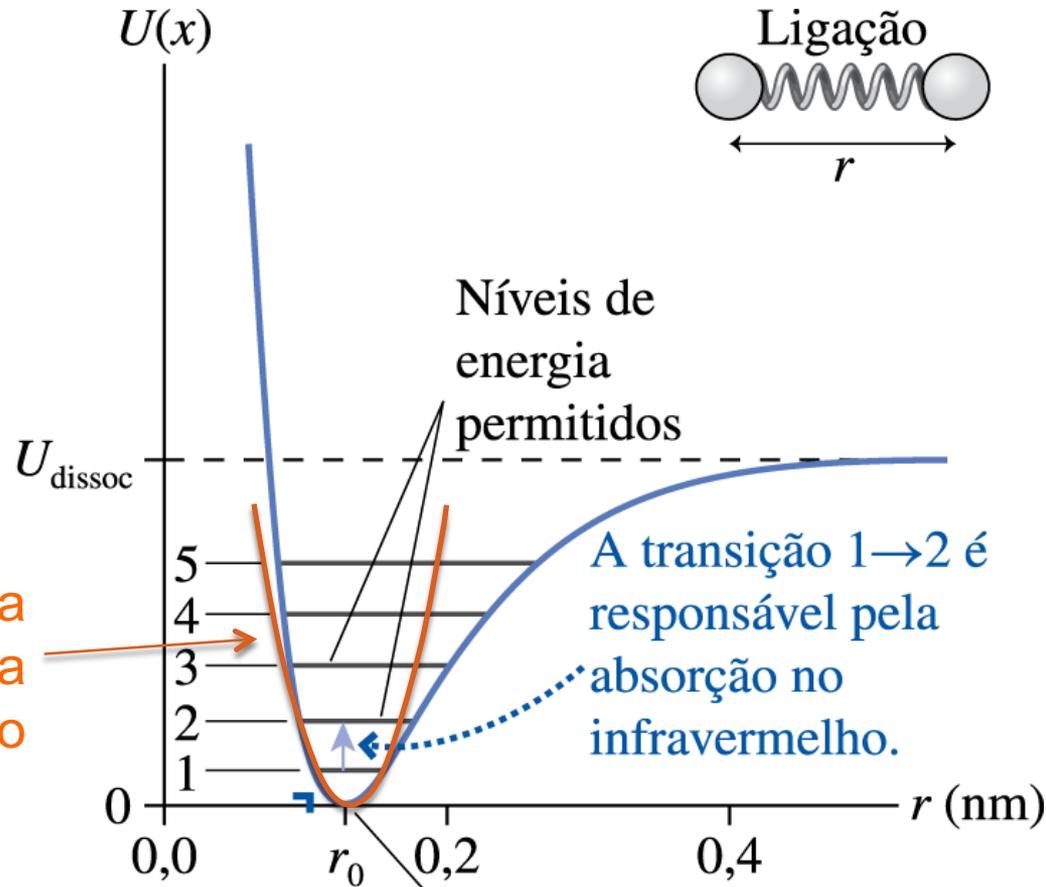
$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

Oscilador harmônico quântico



Aplicação : vibrações moleculares

parábola aproximada próximo do mínimo

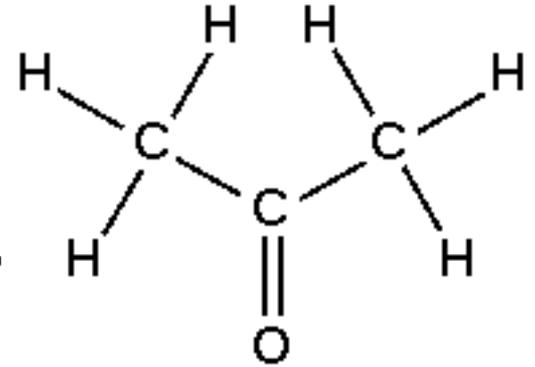
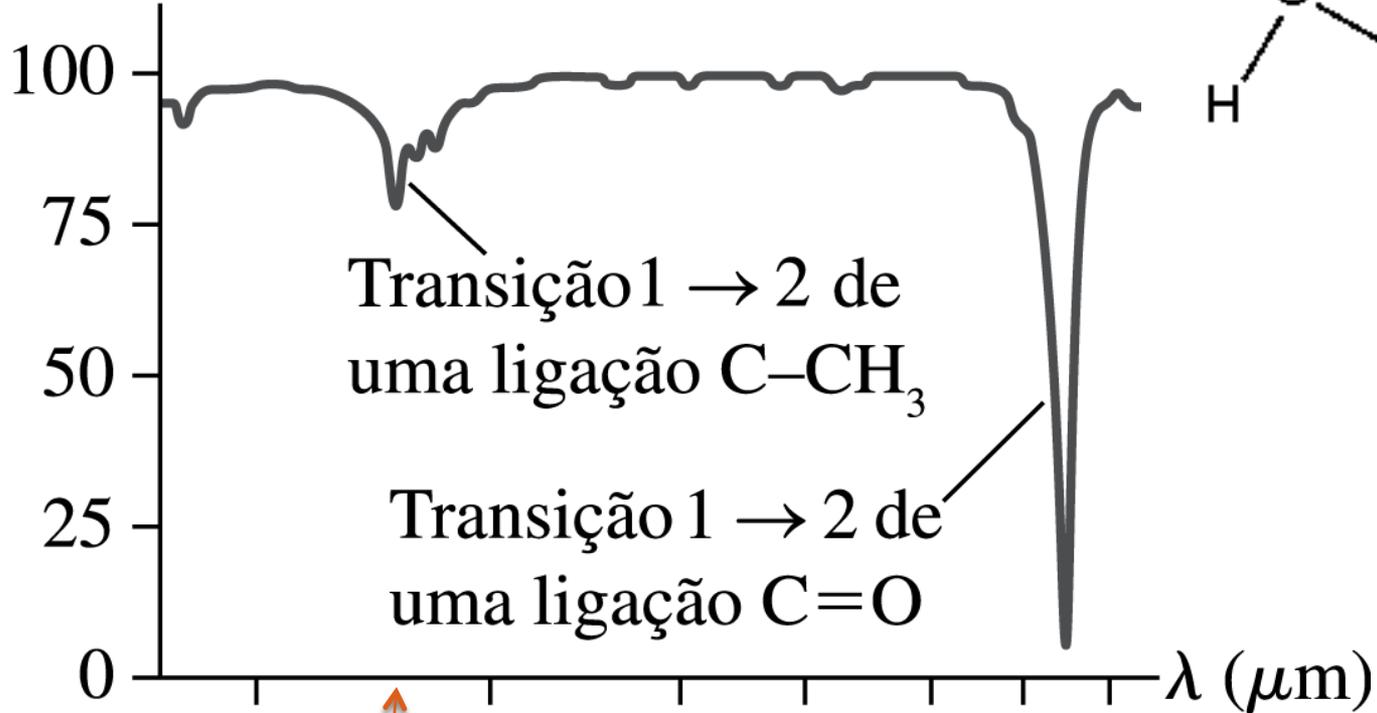


A parte mais funda do poço de potencial é quase uma parabólica.

Separação de equilíbrio

Exemplo : absorção por acetona [$(\text{CH}_3)_2\text{CO}$]

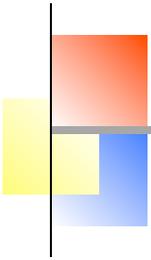
Transmissão (%)



$E \sim 0,37 \text{ eV}$

$E \sim 0,21 \text{ eV}$

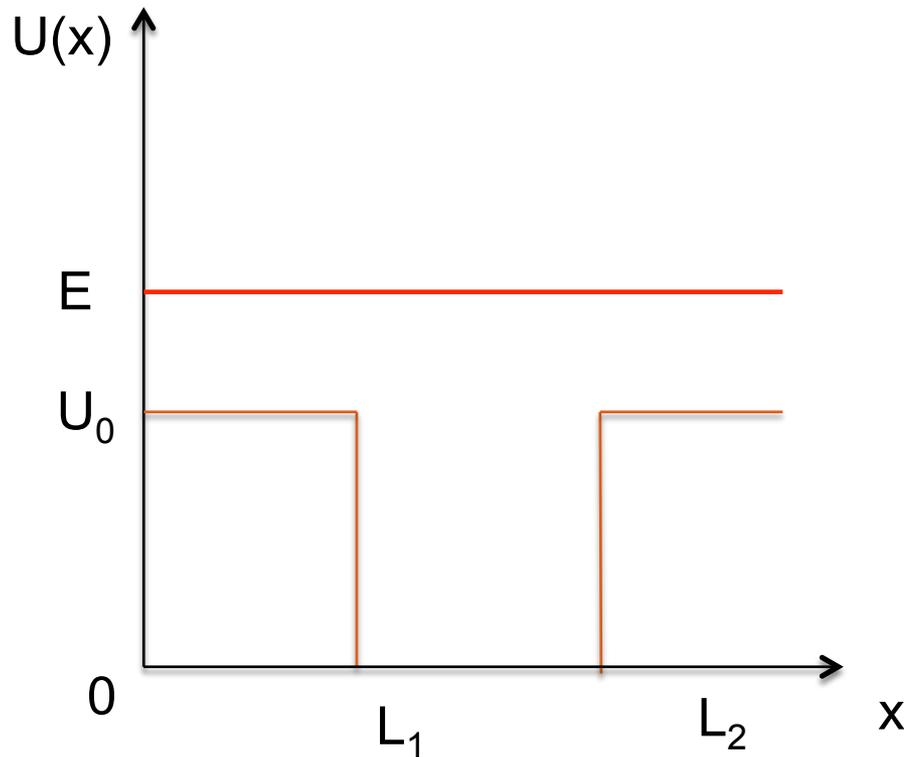
Poço de Potencial Finito



ex: elétron incidente num fio
vindo do ar

ar **fio** ar

$U_0 - E_1 \leftrightarrow$ 'função trabalho' !

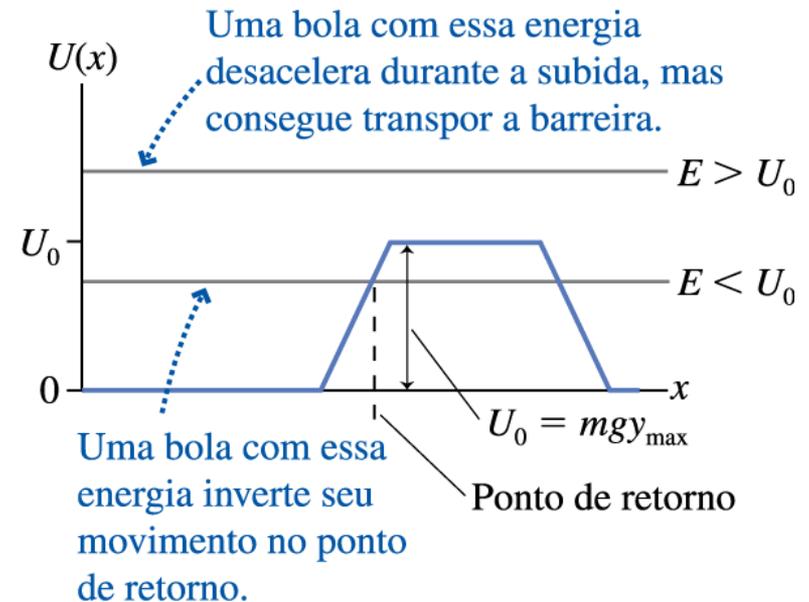


Barreira de energia: partícula clássica

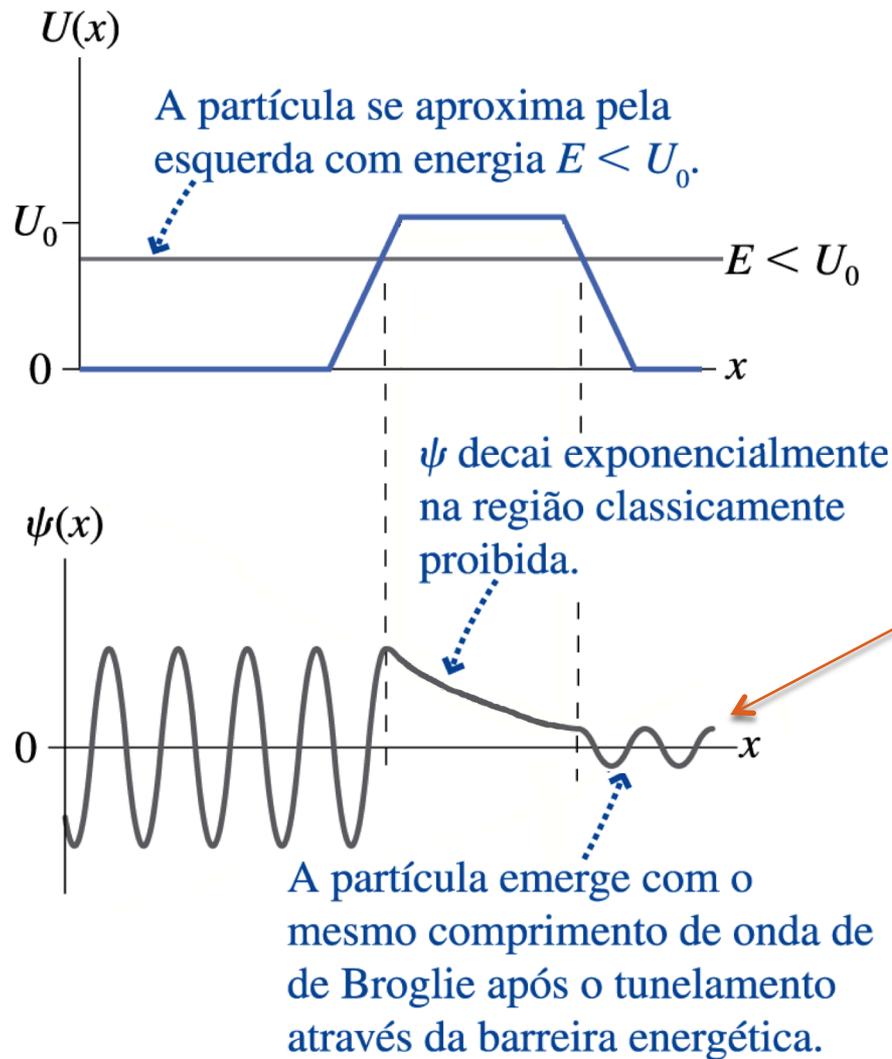
(a)



(b)



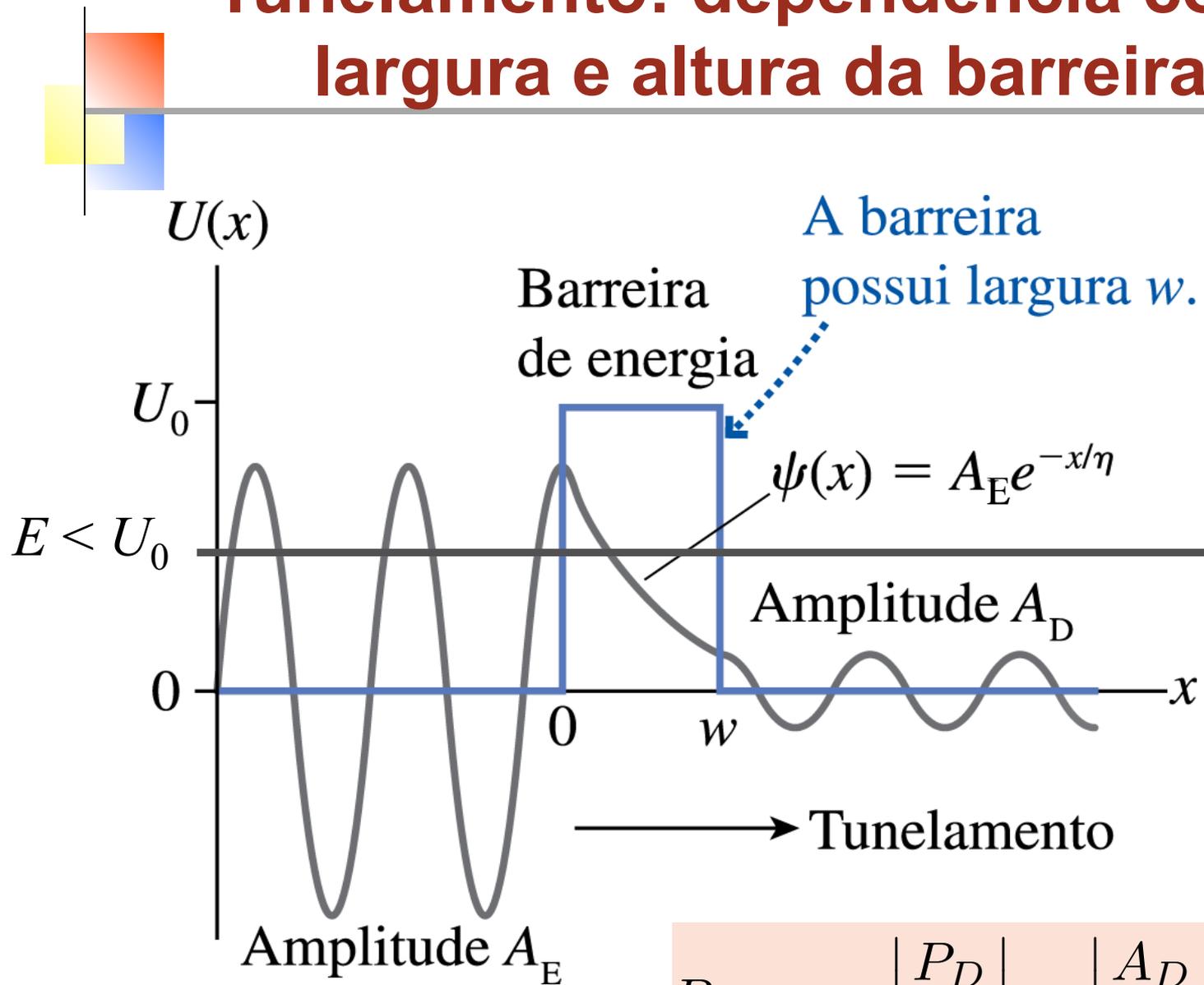
Barreira de energia: partícula quântica



Partícula tem probabilidade de aparecer do outro lado da barreira!

Tunelamento

Tunelamento: dependência com largura e altura da barreira



$$P_{tunnel} = \left| \frac{P_D}{P_E} \right| = \left| \frac{A_D}{A_E} \right|^2 = e^{-2w/\eta}$$

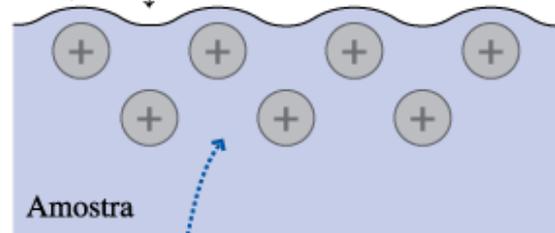
STM – Scanning tunneling microscope

Microscópio de tunelamento

4. Uma imagem mostra a corrente em função da posição da ponta da sonda, revelando o perfil da superfície.

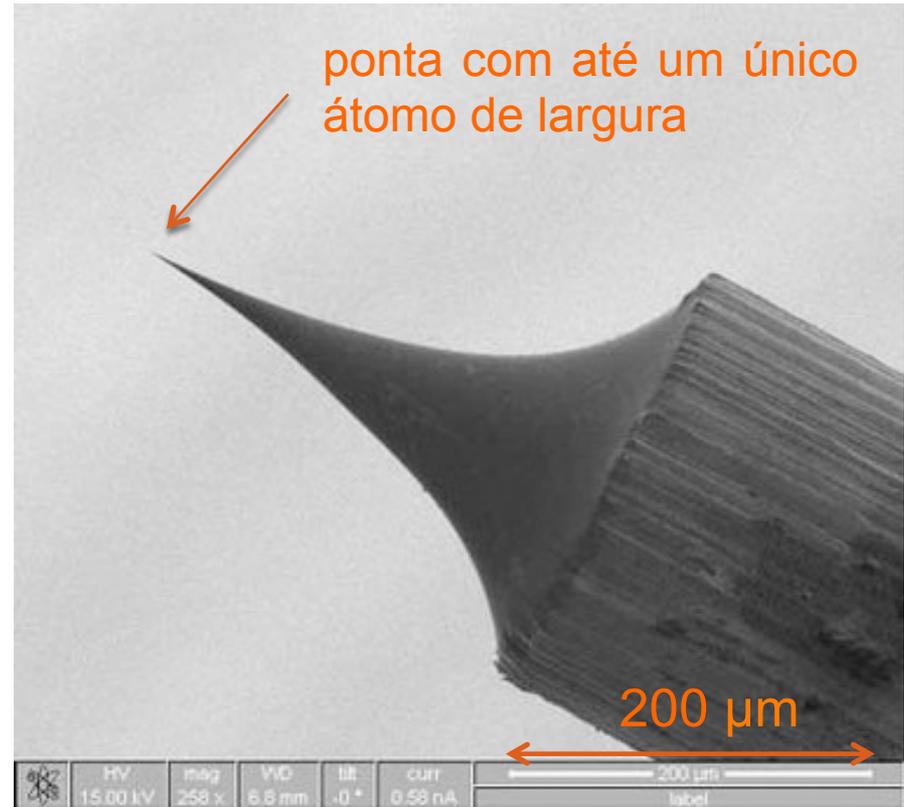
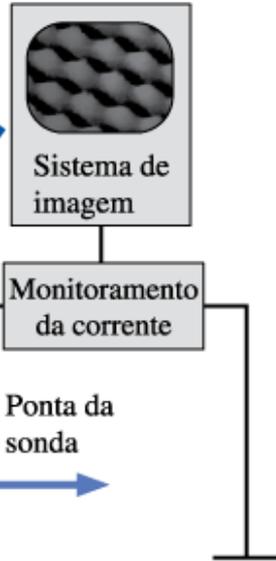
3. A corrente é monitorada à medida que a sonda é movimentada para a frente e para trás, varrendo toda a amostra.

Camada de ar $\approx 0,5$ nm



1. A amostra pode ser considerada como um conjunto de caroços iônicos positivos imersos em um “mar” de elétrons.

2. Uma pequena voltagem positiva faz os elétrons tunelarem através da fina camada de ar entre a ponta da sonda e a amostra.

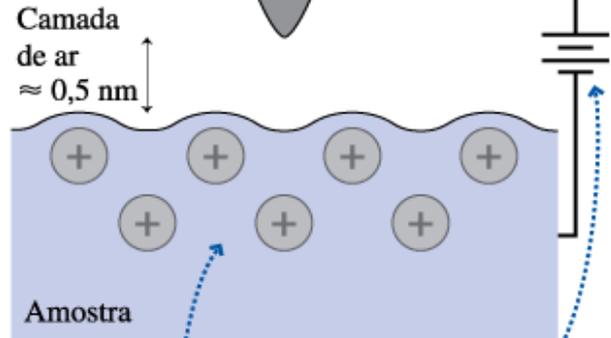


STM – Scanning tunneling microscope

Microscópio de tunelamento

4. Uma imagem mostra a corrente em função da posição da ponta da sonda, revelando o perfil da superfície.

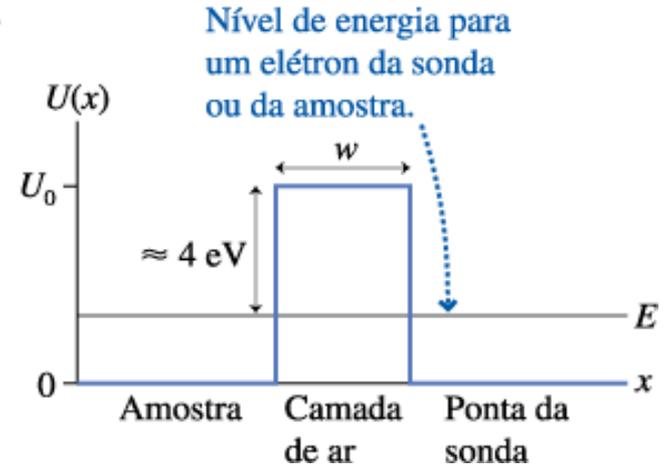
3. A corrente é monitorada à medida que a sonda é movimentada para a frente e para trás, varrendo toda a amostra.



1. A amostra pode ser considerada como um conjunto de caroços iônicos positivos imersos em um “mar” de elétrons.

2. Uma pequena voltagem positiva faz os elétrons tunelarem através da fina camada de ar entre a ponta da sonda e a amostra.

(b)



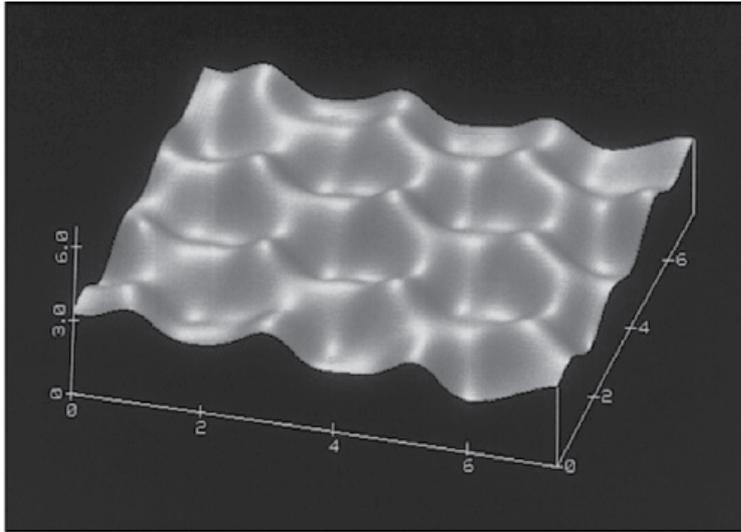
Como $P_{tunnel} \sim e^{-2w/\eta}$, uma pequena mudança em w se reflete em uma grande mudança na corrente de tunelamento.

Exercício: no exemplo acima, em quantas vezes P_{tunnel} aumenta quando a ponta da sonda passa sobre um átomo de espessura $\sim 0,1\text{nm}$ (reduzindo w de $0,5\text{nm}$ para $0,4\text{nm}$)?

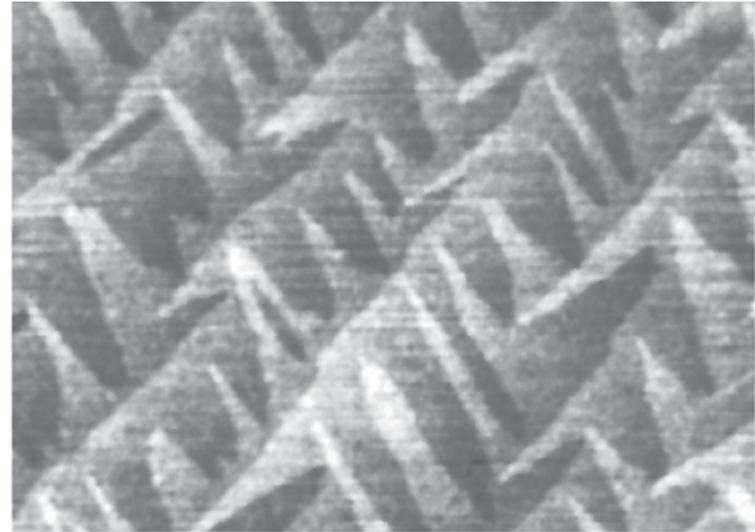
R: cerca de $e^2 \sim 7,3$ vezes

STM – *Scanning tunneling microscope*

Microscópio de tunelamento



Átomos de carbono na
superfície do grafite



A superfície do silício

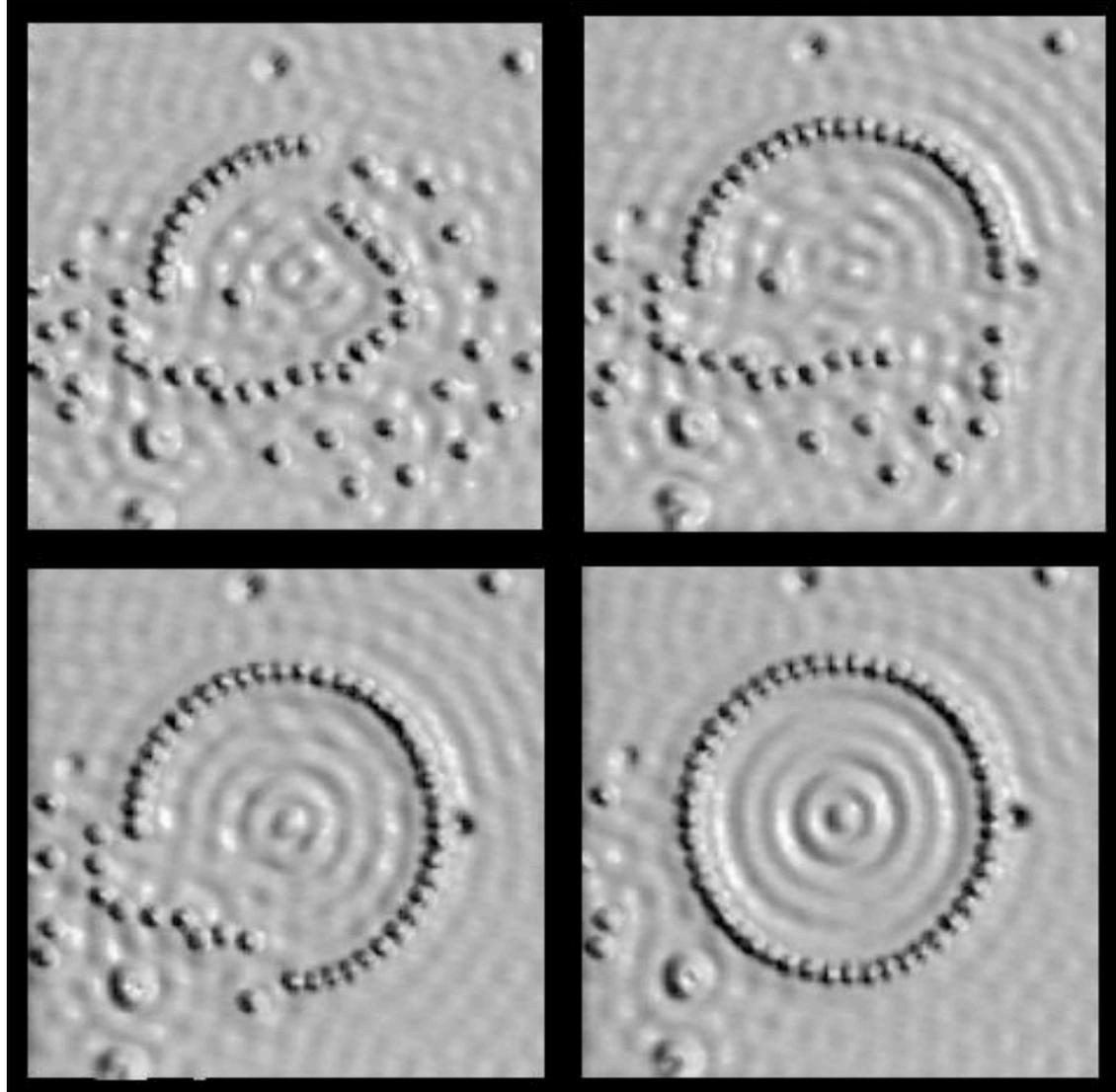
STM – *Scanning tunneling microscope*

Microscópio de tunelamento

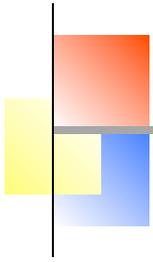
A ponta do STM também pode ser usada para mover átomos ‘soltos’ na superfície. Vemos aqui a montagem de um círculo formado por átomos de ferro em uma superfície de cobre.

Essa estrutura é chamada de ‘curral quântico’, pois os elétrons na superfície do cobre ficam presos no seu interior como animais em um curral.

Observe a onda estacionária circular formada por esses elétrons! (A corrente de tunelamento é maior nas regiões com mais probabilidade de encontrar um elétron).

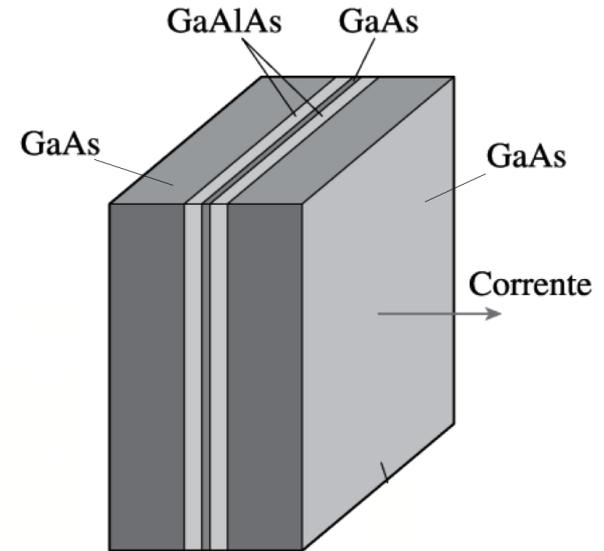
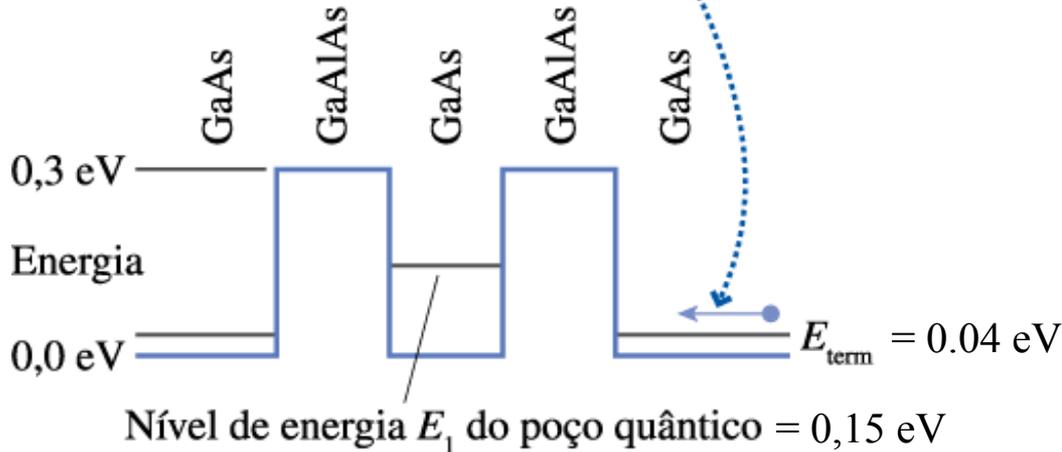


Diodo Túnel Ressonante



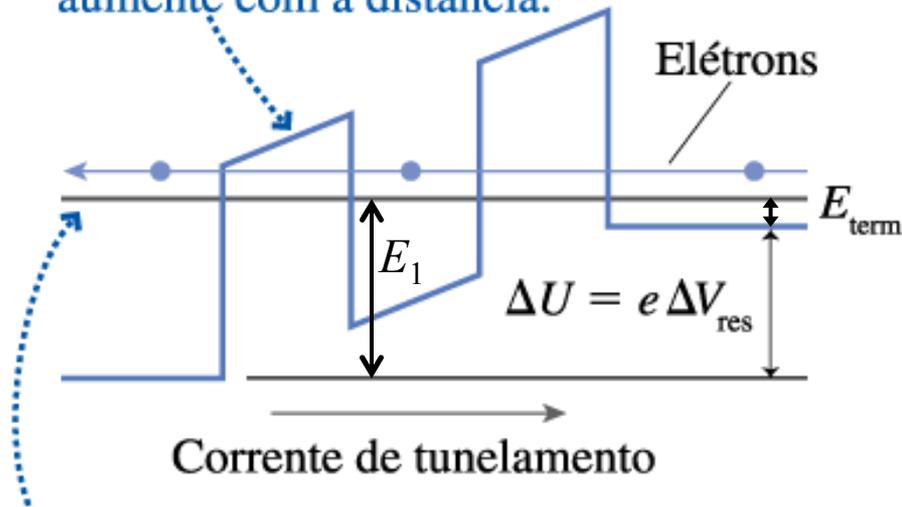
(a)

Elétrons aproximam-se pelo exterior com energia térmica $E_{term} \sim 3/2 k_B T = 0.04 \text{ eV}$ a $T = 300\text{K}$

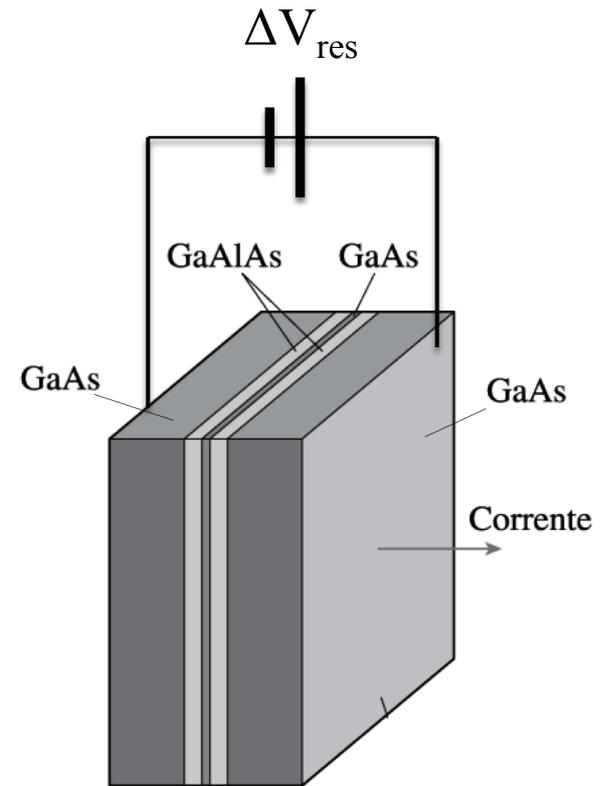


Diodo Túnel Ressonante

(b) Uma diferença de potencial faz com que a energia potencial aumente com a distância.

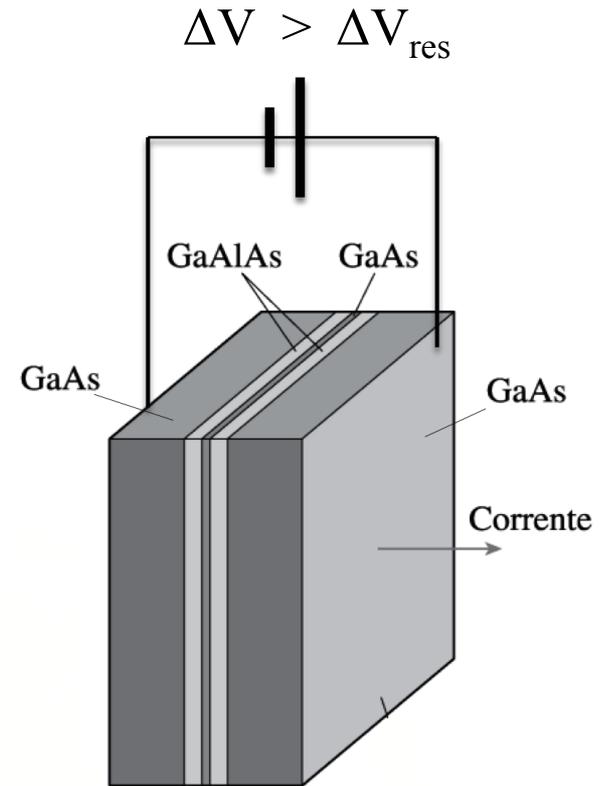
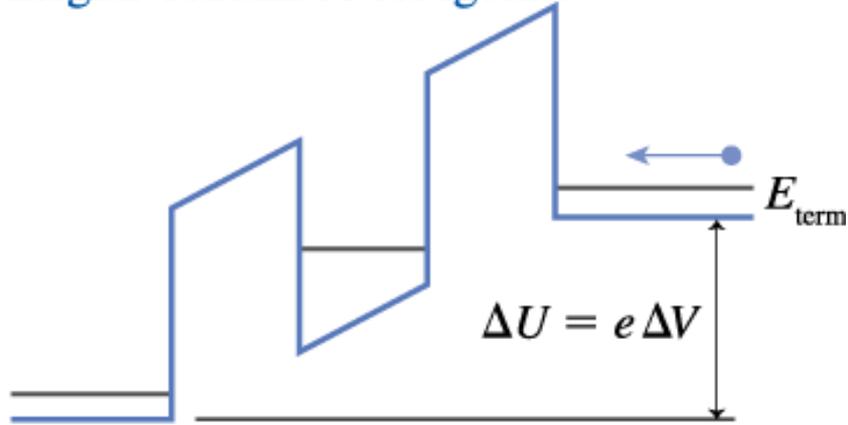


Quando $\Delta U = E_1 - E_{term}$, a energia do nível no interior do poço quântico se iguala à energia dos elétrons incidentes, o que permite que eles tunelem – isto é um efeito de **ressonância**

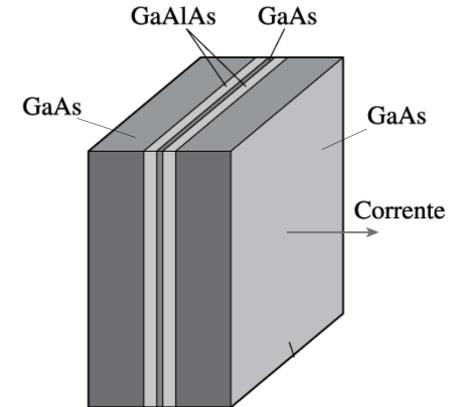
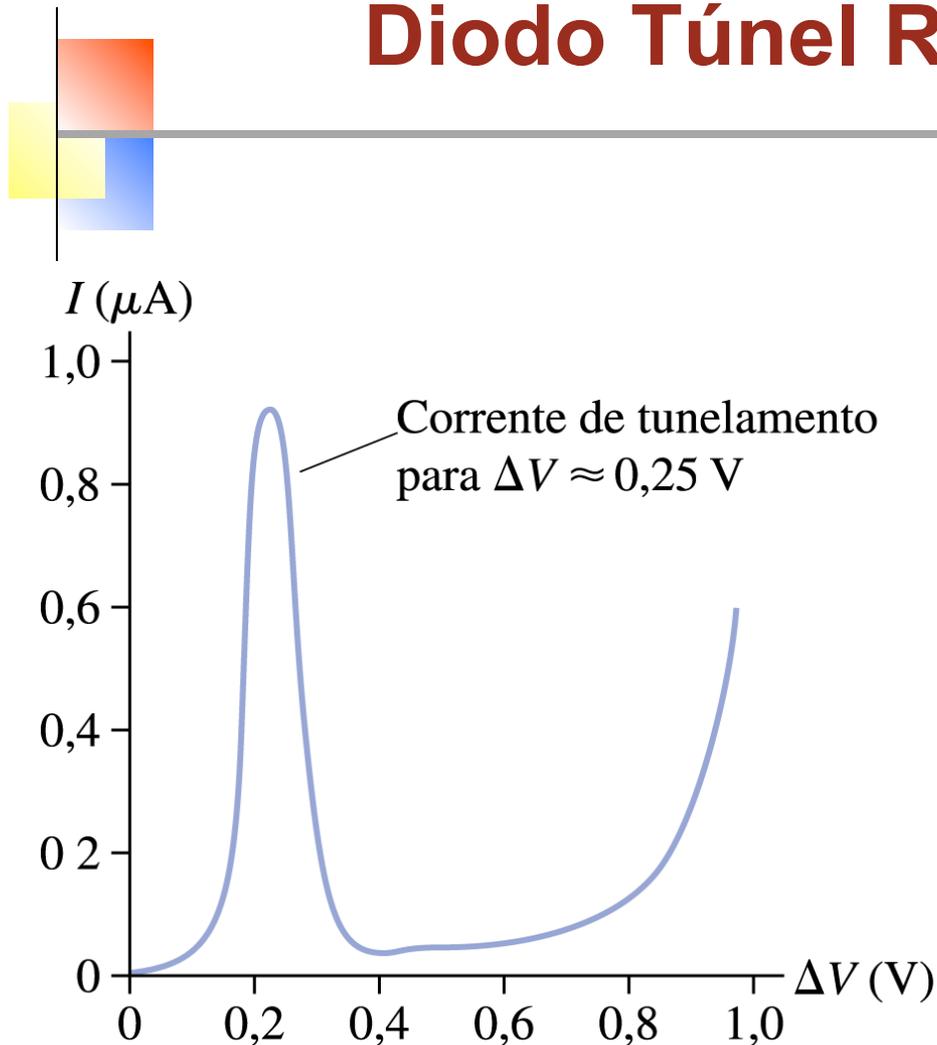


Diodo Túnel Ressonante

(c) O tunelamento pára quando as energias deixam de ser iguais.



Diodo Túnel Ressonante



Dados experimentais de uma estrutura com uma camada de 4nm de GaAs entre duas barreiras de 10 nm de GaAlAs

Há uma faixa estreita de voltagens próximas a 0,25V onde a corrente aumenta em 10 vezes.

Aplicação: Circuitos digitais de computadores