UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Escola de Engenharia de Lorena – EEL

Exemplos de aplicação da equação de Schrödinger

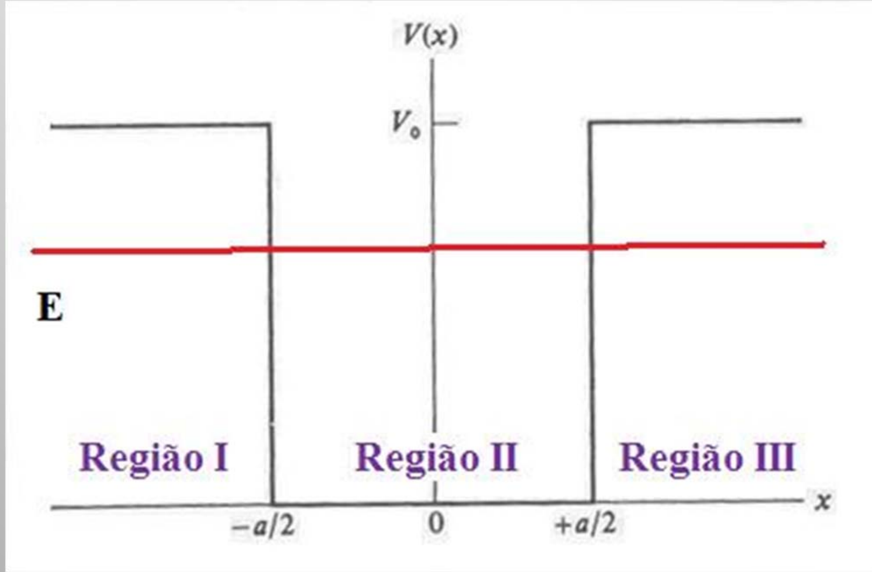
EEL - USP

Msc. Lucas Barboza Sarno da Silva

Sumário

- ✓ Poço de potencial quadrado
- ✓ Potencial degrau

Poço de potencial quadrado



Região I:

Equação de Schrödinger unidimensional e independente do tempo:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi$$

$V_0 > E$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\Psi \qquad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = k_I{}^2 \Psi \qquad \boxed{k_I = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}}$$

Solução geral: $\Psi_I = Ae^{k_I x} + Be^{-k_I x}$

$B = 0$ para que a função não divirja quando $x < -a/2$

$$\boxed{\Psi_I = Ae^{k_I x}} \qquad \text{para} \quad x < -a/2$$

Região III:

Análogo à região I, tem-se que a função de onda é: $\Psi_{III} = Ae^{k_I x} + Be^{-k_I x}$

Porém, neste caso o valor da constante A deve ser necessariamente nulo para que a função não divirja em $x > a/2$

$$\boxed{\Psi_{III} = Be^{-k_I x}}$$

$$\boxed{k_{III} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}}$$

Região II:

O potencial agindo sobre a partícula é nulo $V = 0$.

Equação de Schrödinger: $$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k_{II}{}^2 \Psi$$

$$\boxed{k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Solução geral: $$\boxed{\Psi_{II} = C.sen(k_{II} x)}$$

$$\frac{d\Psi_{II}}{dx} = -Ck_{II} \cos(k_{II} x)$$

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} = -Ck_{II}{}^2 sen(k_{II} x)$$

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} = -k^2 \Psi$$

$$sen(kx) = 0 \longrightarrow k\left(\pm a/_2\right) = n\pi$$

onde, n = 0,1,2,3,4,... (número inteiro)

$$k_n = \pm \frac{2n\pi}{a}$$

$$k_n = \pm \frac{2n\pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$$

$$\sqrt{2mE_n} = \frac{2n\pi\hbar}{a}$$

$$2mE_n = \frac{4n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

$$E_n = \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{a^2m}$$

$$\boxed{E_n = \frac{2\pi^2\hbar^2}{a^2m}n^2}$$

Condições de contorno:

$\Psi_I = \Psi_{II}$ em $x = -a/_2$

$\Psi_{II} = \Psi_{III}$ em $x = a/_2$

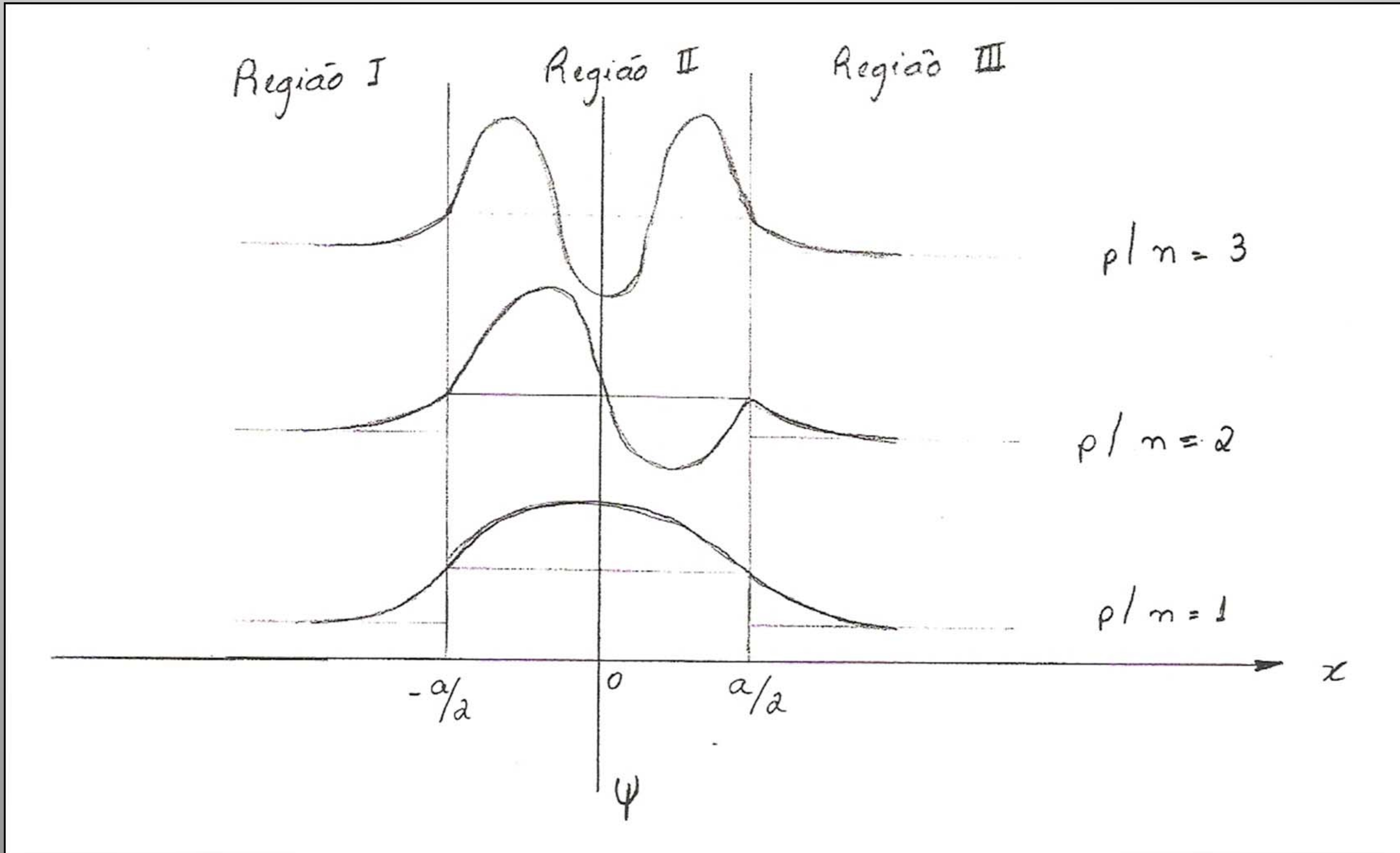
$\dfrac{d\Psi_I}{dx} = \dfrac{d\Psi_{II}}{dx}$ em $x = -a/_2$

$\dfrac{d\Psi_{II}}{dx} = \dfrac{d\Psi_{III}}{dx}$ em $x = a/_2$

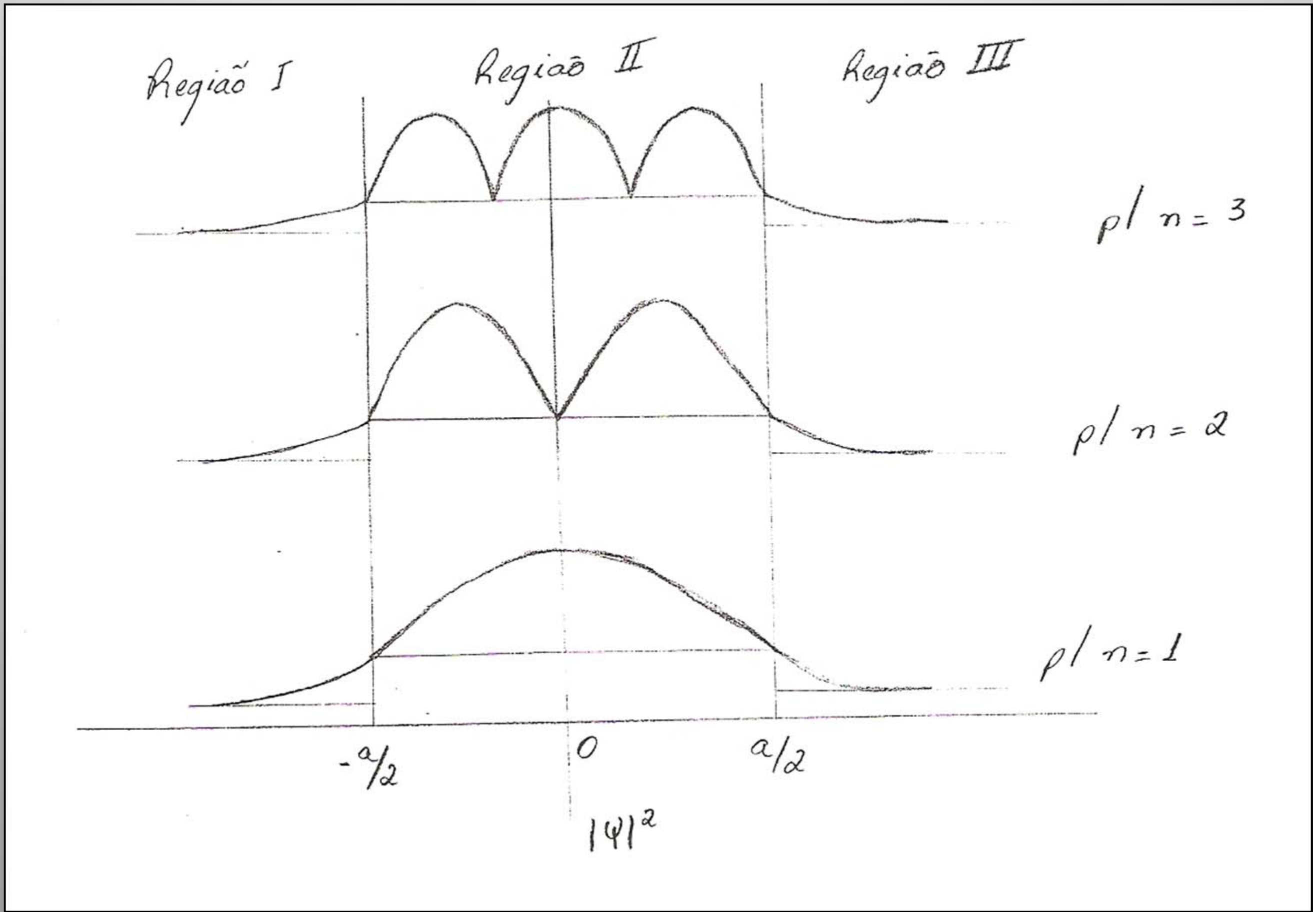
A auto-função associada aos auto-valores, para cada região, serão:

$$\begin{cases} \Psi_I = Ae^{k_I x} = Ae^{\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x} & \longrightarrow \quad p/\, x < -a/2 \\ \Psi_{II} = C.sen(k_{II}x) = C.sen\left(\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x\right) & \longrightarrow \quad p/ -a/2 < x < +a/2 \\ \Psi_{III} = Be^{-k_I x} = Be^{-\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x} & \longrightarrow \quad p/\, x > +a/2 \end{cases}$$

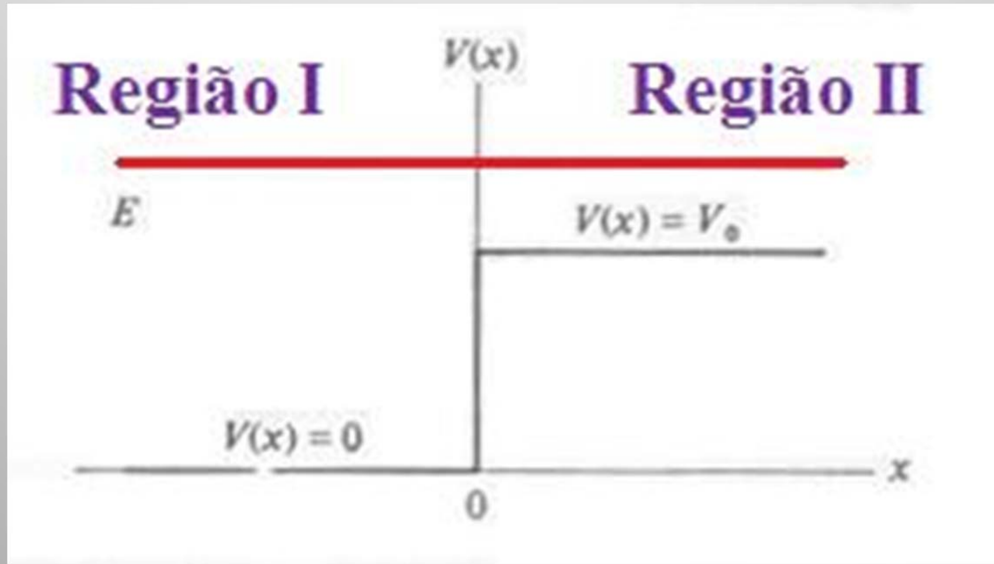
Comportamento dessas funções de ondas:



Densidade de probabilidade: $|\Psi|^2 = \Psi * \Psi$



Potencial degrau



$$E > V_0$$

Região I:

Equação de Schrödinger: $$\frac{\partial^2 \Psi_I}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k_I{}^2 \Psi$$

$$\boxed{k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Solução geral:

$$\boxed{\Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x}}$$

Região II:

Equação de Schrödinger:

$$\frac{\partial^2 \Psi_{II}}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\Psi$$

Solução geral:

$$\boxed{\Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x} + De^{-ik_{II}x}}$$

$$\boxed{k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}}$$

Nesta solução não faz sentido ter o segundo termo na solução geral, pois não há nenhuma oposição à movimentação da partícula, ou seja, ela não será refletida. Isso implica que o valor da constante D será nulo para $x > 0$

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x} = C.\cos(k_{II}x)$$

Condições de contorno:

$$\Psi_I = \Psi_{II} \qquad \frac{d\Psi_I}{dx} = \frac{d\Psi_{II}}{dx} \longrightarrow x = 0$$

$$\begin{cases} \Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x} \end{cases}$$

$$Ae^{ik_{II}x} + Be^{-ik_I x} = Ce^{ik_{II}x}$$

$$Ae^{ik_{II}0} + Be^{-ik_I 0} = Ce^{ik_{II}0}$$

$$\boxed{A + B = C}$$

$$\begin{cases} \Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + Be^{-ik_I x} \\ \Psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II} x} \end{cases}$$

$$\frac{d\Psi_I}{dx} = Aik_I e^{ik_I x} - Bik_I e^{-ik_I x}$$

$$\frac{d\Psi_{II}}{dx} = Cik_{II} e^{ik_{II} x}$$

$$Aik_I e^{ik_I x} - Bik_I e^{-ik_I x} = Cik_{II} e^{ik_{II} x}$$

$$Aik_I e^{ik_I 0} - Bik_I e^{-ik_I 0} = Cik_{II} e^{ik_{II} x}$$

$$Aik_I - Bik_I = Cik_{II}$$

$$k_I(A - B) = Ck_{II}$$

$$k_I(A - B) = k_{II}(A + B)$$

$$k_I A - k_I B = k_{II} A + k_{II} B$$

$$B(k_I + k_{II}) = A(k_I - k_{II})$$

$$\boxed{B = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} A}$$

$$C = A + \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} A$$

$$C = \left(1 + \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}\right) A$$

$$C = \left(\frac{k_I + k_{II} + k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}\right) A$$

$$\boxed{C = \left(\frac{2k_I}{k_I + k_{II}}\right) A}$$

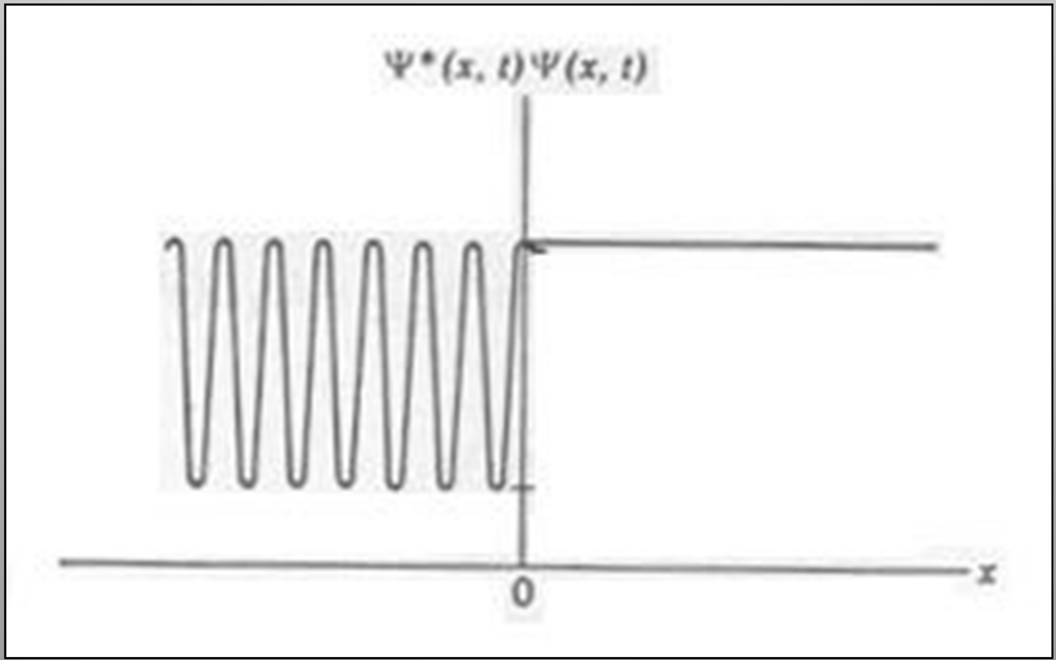
Com isso, as auto-funções associadas aos auto-valores são:

$$
\begin{cases}
\Psi_I(x) = Ae^{ik_I x} + \left(\dfrac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}\right) Ae^{-ik_I x} & \longrightarrow \quad x \leq 0 \\[2ex]
\Psi_{II}(x) = \left(\dfrac{2k_I}{k_I + k_{II}}\right) Ae^{ik_{II} x} & \longrightarrow \quad x \geq 0
\end{cases}
$$

Densidade de probabilidade:

Sabendo que a parte real da função de onda, para $x \geq 0$, se propaga de acordo com a função cosseno $\cos(k_{II} x)$ e que a densidade de probabilidade

$$\Psi_{II} * (x) \Psi_{II} (x) = y * e^{-ik_{II} x} y e^{ik_{II} x} = 1$$



Obrigado