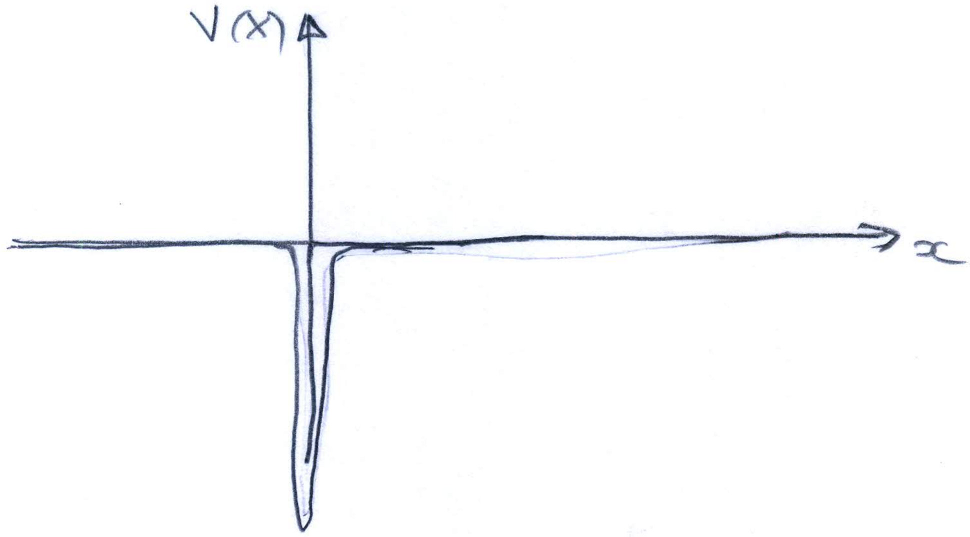
Potencial com a função delta

Consideramos o caso onde

$$V(x) = -\alpha\,\delta(x)\ , \quad \text{com } \alpha > 0$$

$\Rightarrow$



A equação de Schrödinger é

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

Para obter estados ligados precisamos $E < 0$.

Na região $x < 0$:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \quad \Rightarrow \boxed{-\frac{2mE}{\hbar^2} > 0}$$

$$= \gamma^2 \psi$$

$$\Rightarrow \gamma = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\psi(x) = A e^{\gamma x}} \qquad (x<0)$$

Para $x>0$:

$$\boxed{\psi(x) = B e^{-\gamma x}}$$

Para impor as condições de contorno devemos impor que

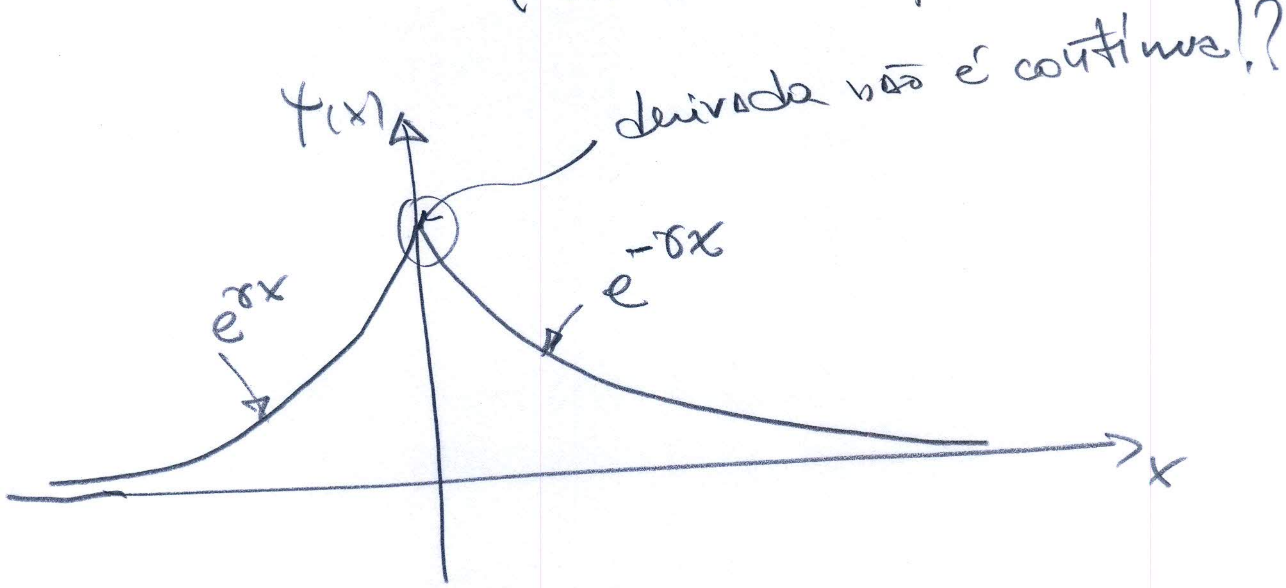
1. $\psi(x)$ é contínua
2. $\frac{d\psi(x)}{dx}$ é contínua exceto nos pontos onde $V(x)$ é ∞!

1. $\psi(x)$ é contínua (em $x=0$)

$$\Rightarrow \quad A = B$$

$$\Rightarrow \quad \psi(x) = \begin{cases} A e^{\gamma x} & \text{para } x<0 \\ A e^{-\gamma x} & \text{para } x>0 \end{cases}$$

$\Rightarrow$



2. Continuidade (ou não) da derivada

Para ver com clareza o que acontece com a derivada consideramos a equação de Schrödinger integrada por um valor infinitesimal aredor da origem:

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

no caso mais geral. Vemos que a continuidade de $\psi(x)$ na origem garante que, no limite $\epsilon\to 0$, o lado direito é zero.

A integral no primeiro termo é a discontinuidade da derivada na origem:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left.\frac{d\psi}{dx}\right)_{\varepsilon}-\left.\frac{d\psi}{dx}\right)_{-\varepsilon}\right]=\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}V(x)\psi(x)\,dx$$

Em geral, se $V(x)$ é finito na origem então a derivada é contínua dado que o lado direito é nulo no limite $\epsilon\to 0$. Mas no nosso caso

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}V(x)\psi(x)\,dx=-\alpha\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\psi(x)\,dx$$

$$=-\alpha\,\psi(0)$$

$$\Rightarrow \quad \Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

<u>Agora, para $x<0$</u>

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=0} = A\gamma$$

<u>Entanto que para $x>0$</u>

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x=0} = -A\gamma$$

$$\Rightarrow \quad -A\gamma - A\gamma = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

ou

$$\cancel{A}\gamma = \frac{m\alpha}{\hbar^2}\cancel{A}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\gamma = \frac{m\alpha}{\hbar^2}}$$

restrição à E!!

mas $\gamma = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow$

Daqui podemos derivar <u>as energias dos estados ligados</u>.

$$\boxed{E = \frac{-\hbar^2\gamma^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}}$$

$$\int |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{0} |A|^2 e^{2\gamma x} + |A|^2 \int_{0}^{\infty} e^{-2\gamma x}$$

$$= 2|A|^2 \int_{0}^{\infty} e^{-2\gamma x} = \frac{|A|^2}{\gamma} = 1$$

$$\Rightarrow \quad A = \sqrt{\gamma} = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}}$$

com $\boxed{E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}}$

$\Rightarrow$ potencial função delta tem UM estado ligado

Espalhamento (potencial de função delta)

Até agora nós concentramos em achar estados ligados

I.e.:

$$E < V(\pm\infty)$$

O que nesse exemplo quer dizer $E < 0$.

Mas o que acontece se $E > 0$?

Agora temos que $-\frac{2mE}{\hbar^2} < 0$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x)$$

com $k^2 > 0$.

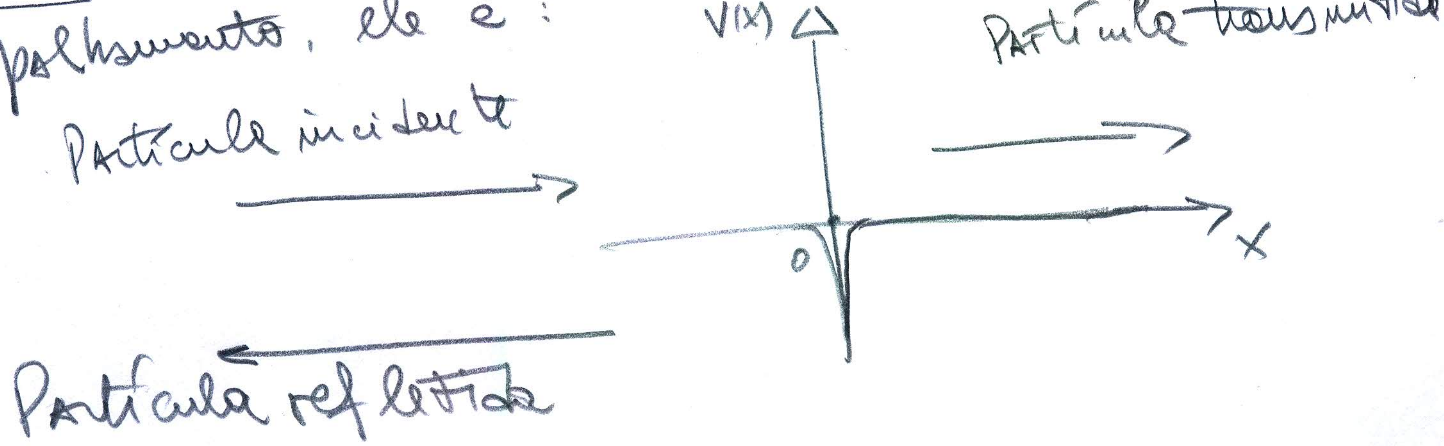
A solução em geral é

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{para } x < 0$$

e similarmente

$$\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad \text{para } x > 0$$

Porém: se estamos interessados num problema de espalhamento, ele é:

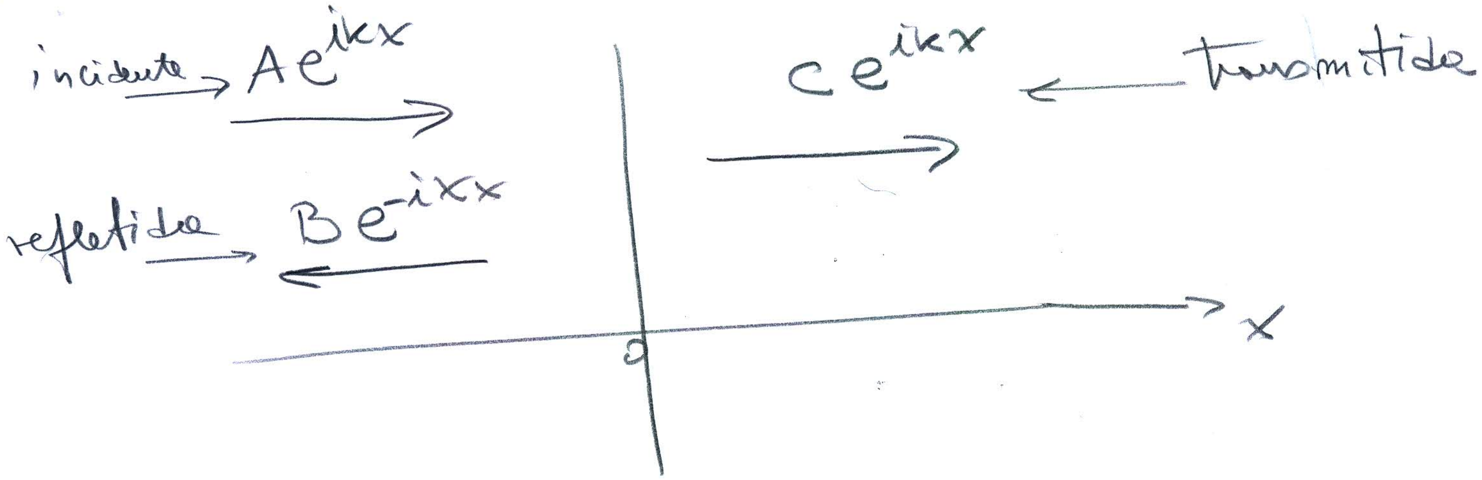


ou

$$\psi_<(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\psi_>(x) = C e^{ikx}$$

i.e.: $D=0$ dado que não tem uma partícula incidente vindo da direita:



Continuidade de $\psi(x)$ em 0

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

Dis-continuidade da derivada em 0

$$\left.\frac{d\psi_<}{dx}\right|_0 = ik(A-B)$$

$$\left.\frac{d\psi_>}{dx}\right|_0 = ikC = ik(A+B)$$

$$\Rightarrow \left.\frac{d\psi_>}{dx}\right|_0 - \left.\frac{d\psi_<}{dx}\right|_0 = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A+B)$$

$$\boxed{ik\,2B = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A+B)}$$

⇒ Queremos expressar C e B em função de A (a amplitude da função de onda incidente).

Para isso definimos

$$\beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$$

$$\Rightarrow \quad iB = -\beta(A+B) \quad \Rightarrow \quad B(i+\beta) = -\beta A$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{B = \frac{i\beta}{1-i\beta}\,A}$$

e

$$C = A + B = A\left[1 + \frac{i\beta}{1-i\beta}\right]$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{C = \frac{1}{1-i\beta}\,A}$$

Definimos

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2}$$ coeficiente de Reflexão

$$T \equiv \frac{|C|^2}{|A|^2}$$ coef. de transmissão

Medem a probabilidade de reflexão e transmissão.

$$\Rightarrow R = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} \quad ; \quad T = \frac{1}{1+\beta^2}$$

e claramente $R + T = 1$ como deve ser para a probabilidade total.