Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

Um dos principais objetivos da física é o de conhecer a estrutura do átomos. A partir de 1926 muitas questões a este respeito foram desvendadas com o surgimento da física quântica. Antes de abordar situções em que o potencial seja complicado como o é no átomo, vamos aplicar a equação de Schrödinger a situações mais simples. Vamos iniciar hoje com o estudo do **elétron confinado em um poço de potencial infinito**

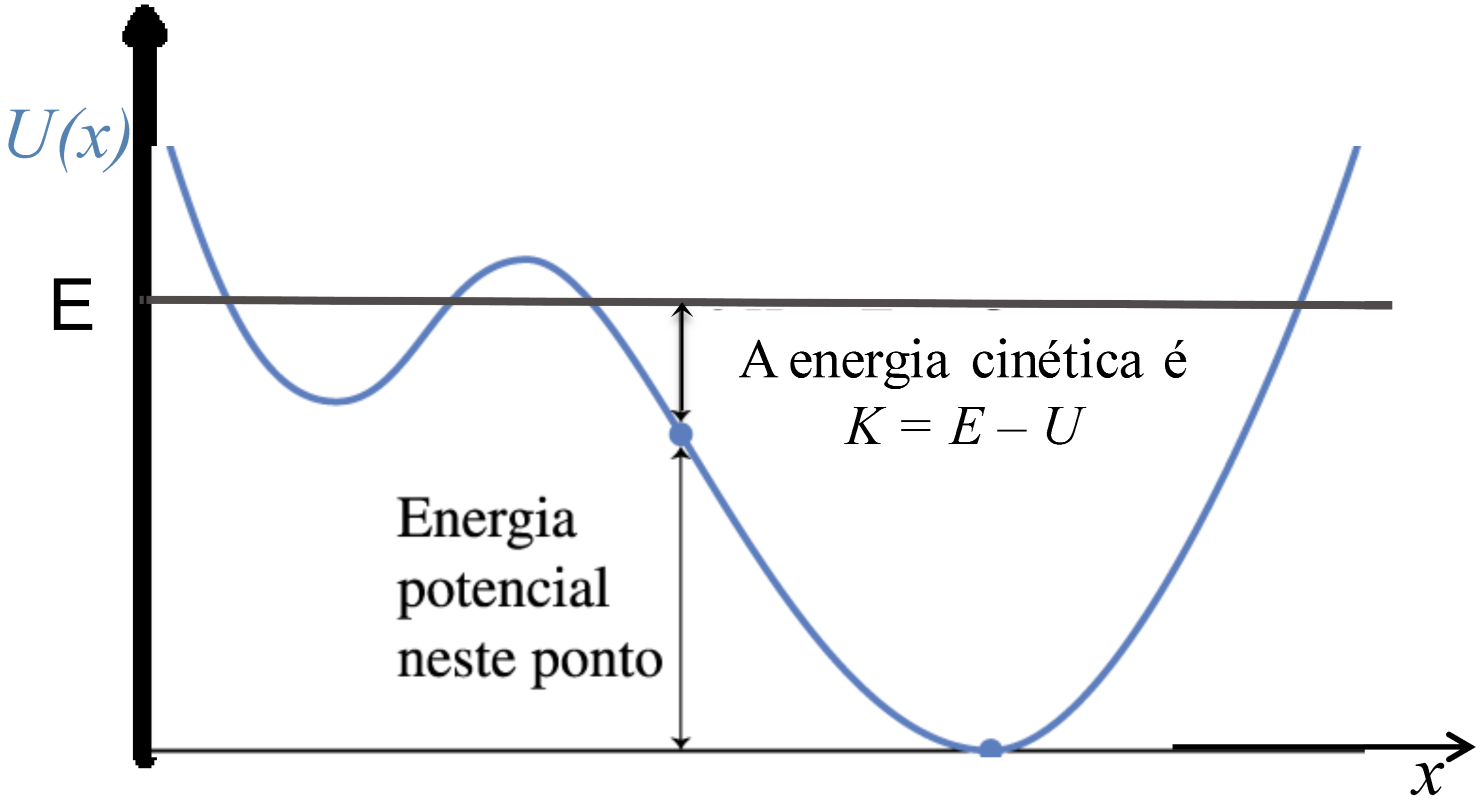
O que se espera, classicamente sobre as possíveis energia que o elétron possa ter dentro deste poço de potencial?

Resposta: Qualquer energia é possível do ponto de vista da física clássica.

Nos próximos slides vamos recordar os possíveis movimentos e transformações de energia em um sistema em que há um potencial aprisionador (ligante)

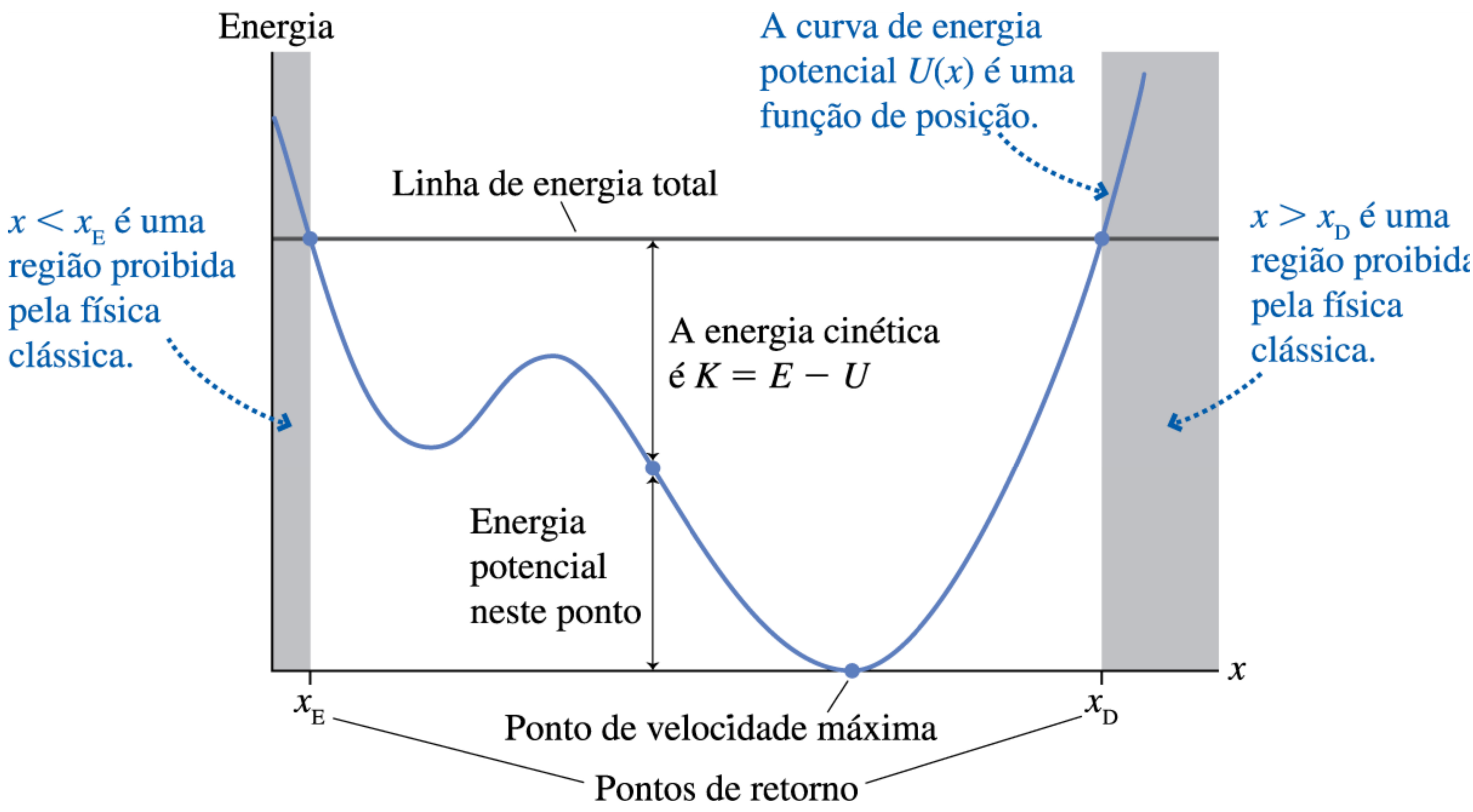
Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

Vamos começar a analisar o caso em que uma partícula tem energia mecânica igual a E e está submetida a um campo com energia potencial potencial $U(x)$

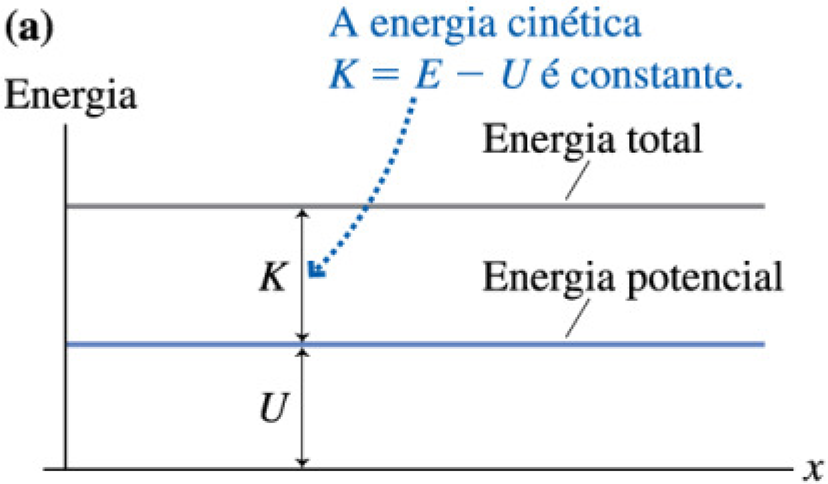


Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

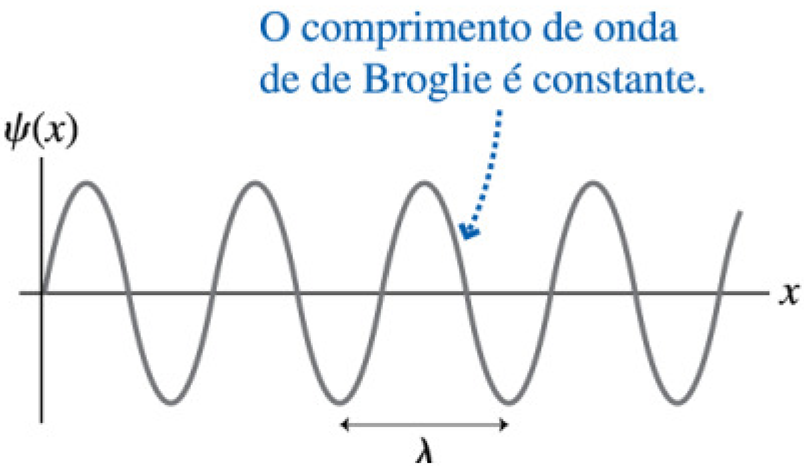
Do ponto de vista clássico podemos prever que x_E e x_D são pontos de retorno. Podemos identificar os pontos de energia cinética máxima e mínima

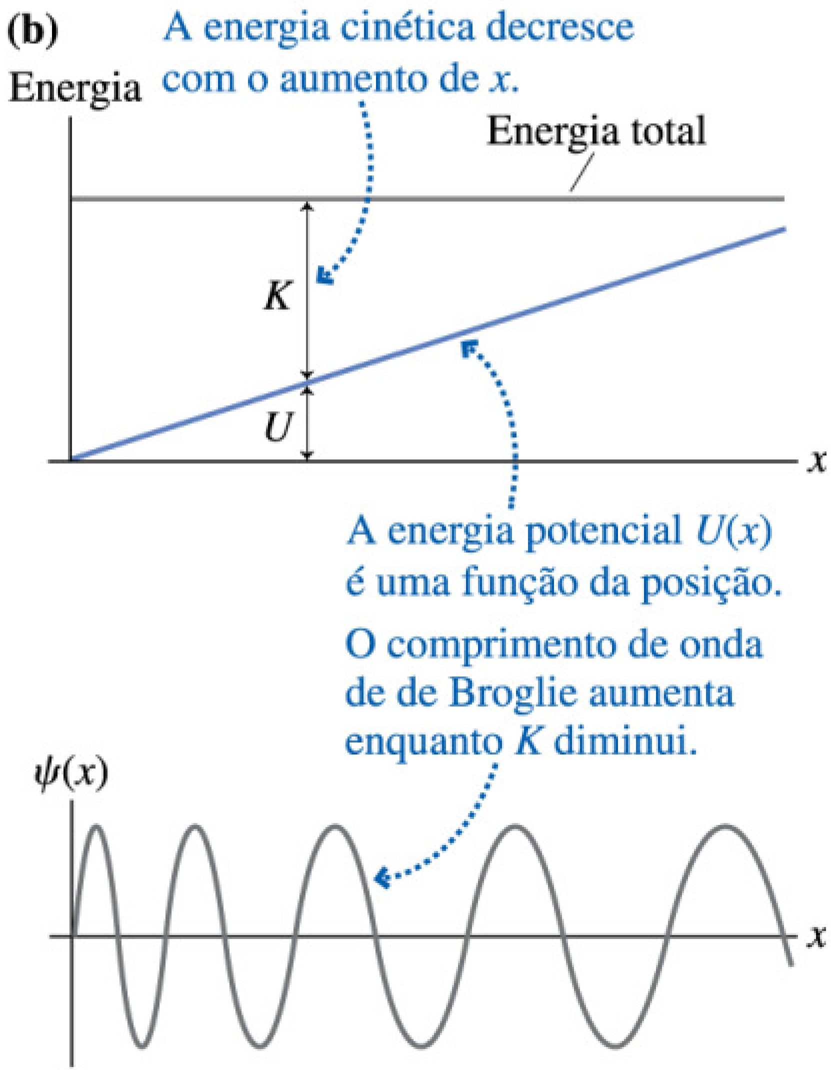


Aula 14 – Mais ondas de Matéria:



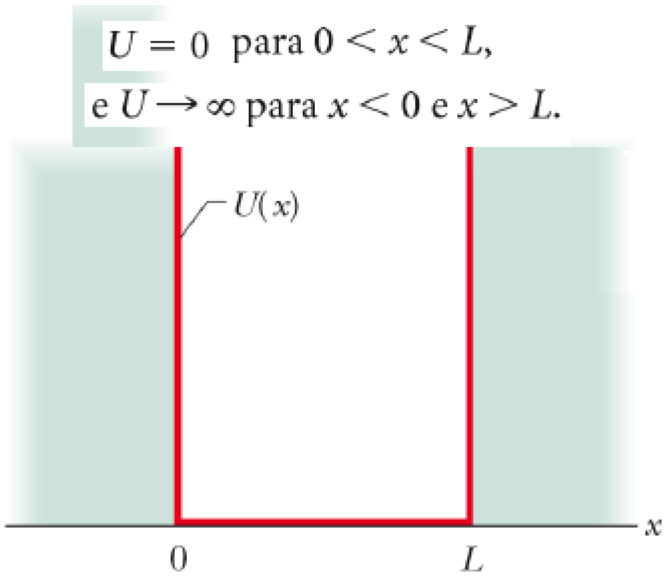
$$k = \frac{2\pi\sqrt{2m(E-U)}}{h}$$





Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

Como foi dito, um dos principais objetivos da física é o de conhecer a estrutura do átomos. Para irmos nesta direção vamos estudar, inicialmente, sistemas onde há aprisionamento como no átomo, contudo considerando potenciais mais simpes de tratar,ou seja, vamos aplicar a equação de Schrödinger a situações mais simples. Vamos iniciar hoje com o estudo do **elétron confinado em um poço de potencial infinito onde a energia U(x)=0 para 0<x<L e infinita fora desta região.**



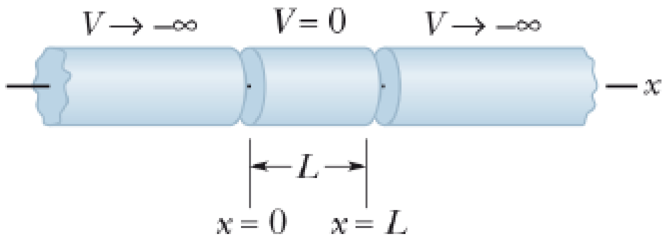
Podemos considerar três regiões, x<0, x> L e 0<x<L. Nas duas primeiras a função de onda deve ser identicamente nula. Porque?

Resp: Porque não existe possibilidade do elétron ser encontrando nesta regiões.

Como vimos, a solução para região 1 pode ser escrita como:

$$\psi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{e} \quad k = \frac{2\pi\sqrt{2mE}}{h}$$

Aula 14 – Mais ondas de Matéria:



Note que nas regiões x>L e x <0 o potencial elétrico é **menos** infinito!

Impondo que a função seja nula em x=0 (para ser contínua nesta interface) teremos que A + B = 0 e portanto:

$$\psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = A\, sen\, kx \qquad (1)$$

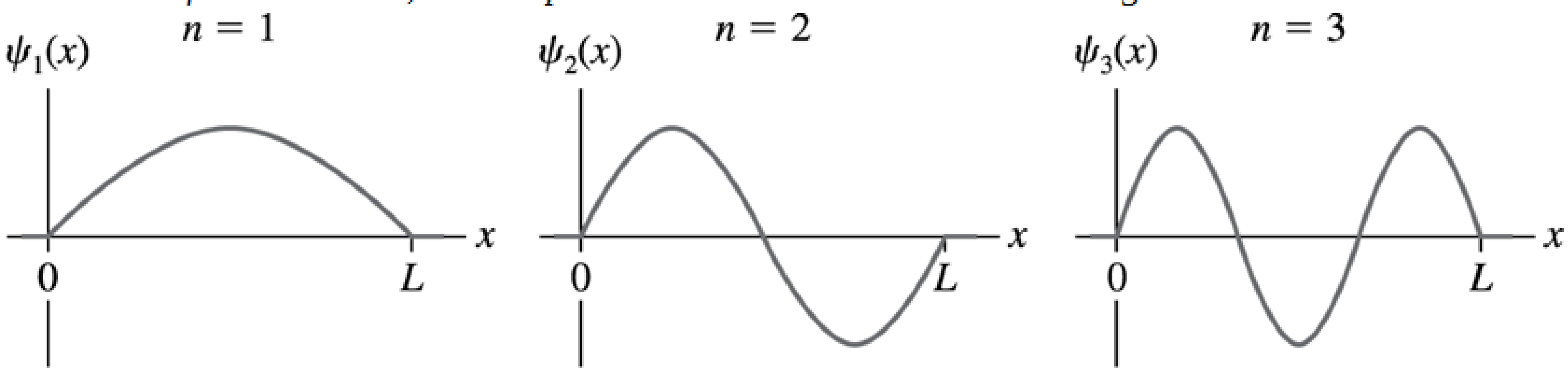
Impondo que a função seja nula em x=L (para ser contínua na nesta interface) teremos:

$$A\, sen\, kL = 0 \Rightarrow k\,L = k_n\,L = n\pi \qquad (2)$$

Quais são os valores possíveis para *n*? Resp. n inteiro positivo (n = 1 ou n=2 ou n= 3 ...)

As tres funções de onda correspondentes aos três primeiros estados de energia:

estado fundamental , *primeiro estado excitado* *e* *segundo estado excitado*



Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

Como o número de onda k ($2\pi/\lambda$) assume valores discretos, quais seriam então os valores possíveis de energia dos elétrons dentro deste poço de potencial infinito?

Como $$k=\frac{2\pi\sqrt{2mE}}{h}\Rightarrow E_n=\frac{h^2k_n^2}{8m\pi^2}=\frac{h^2}{8mL^2}n^2$$

Resumindo, as energias possíveis para os elétrons dentro de um poço de potencial infinito **são discretizadas** e obedecem a:

$$E_n=\frac{h^2}{8mL^2}n^2;\, n=1,2,3,4,\cdots \qquad (3)$$

Teste: a energia para o estado fundamental de um elétron em um poço de potencial infinito vale **4 eV**. Quais são os os valores de energia para os 6 primeiros níveis de energia desde Elétron?

Resposta: 4 eV, 16 eV, 36 eV, 64eV 100eV e 144 eV

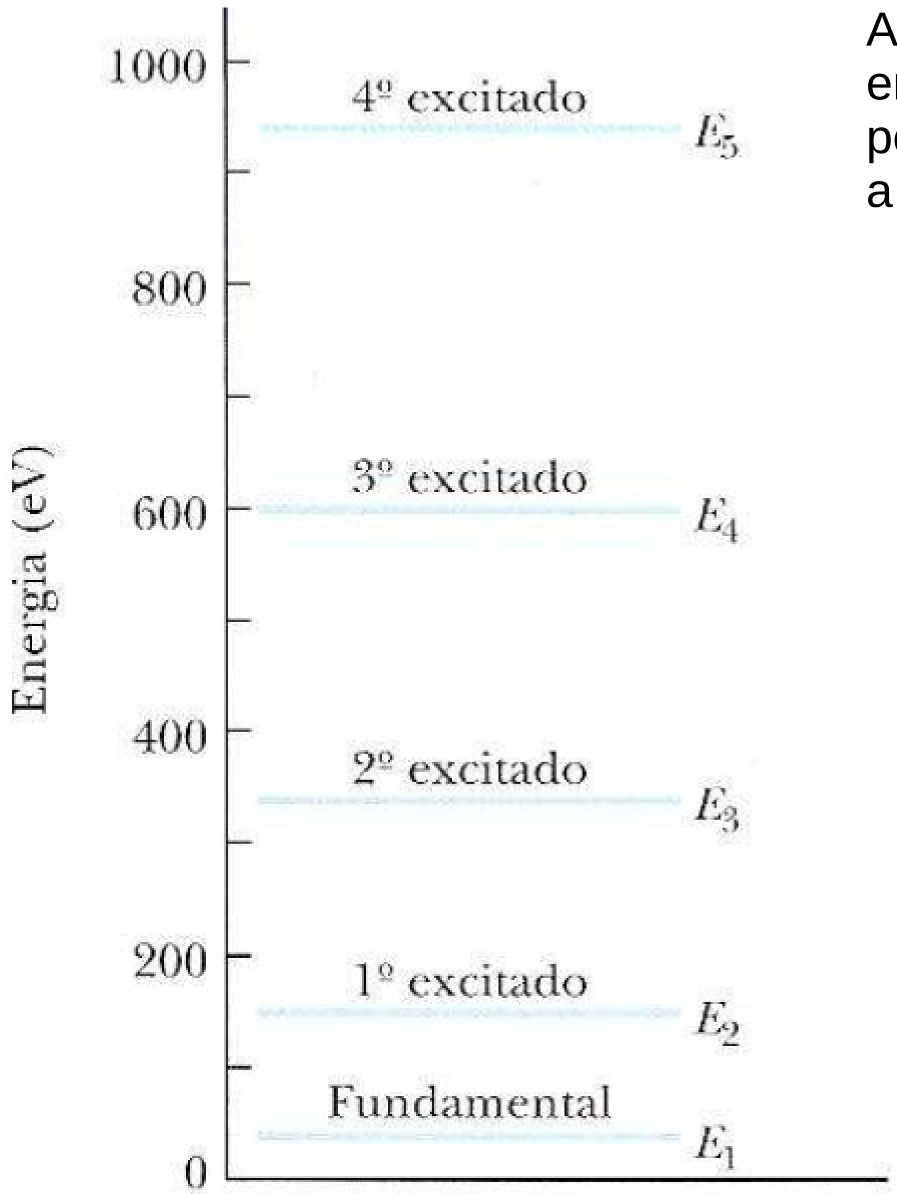
Teste: Quanto vale a largura da barreira para o caso anteriormente citado?

Resposta: $h^2/(8mL^2)$ = 4eV= 6,4 x 10^{-19} J => L^2= $h^2/(8m$ x 4 x6,4 x 10^{-19} J)

L^2= (6,63 x 10-$^{34})^2$/(8 x 9,11 x 10^{-31} x 6,4 x 10^{-19} J) = 0,094 x 10^{-18}

L= 0,31x 10^{-9} m = 0,31 nm

Aula 14 – Mais ondas de Matéria:



A figura ao lado mostra o diagrama de energia para um elétron preso em um poço de potencial infinito de largura igual a 100 pm.

Deve ser destacado que o estado de menor energia possível não tem energia nula, portanto o elétron não pode estar simplesmente parado dentro do poço, ou seja, sua energia cinética (e ou seu momento linear) não pode ser nula.

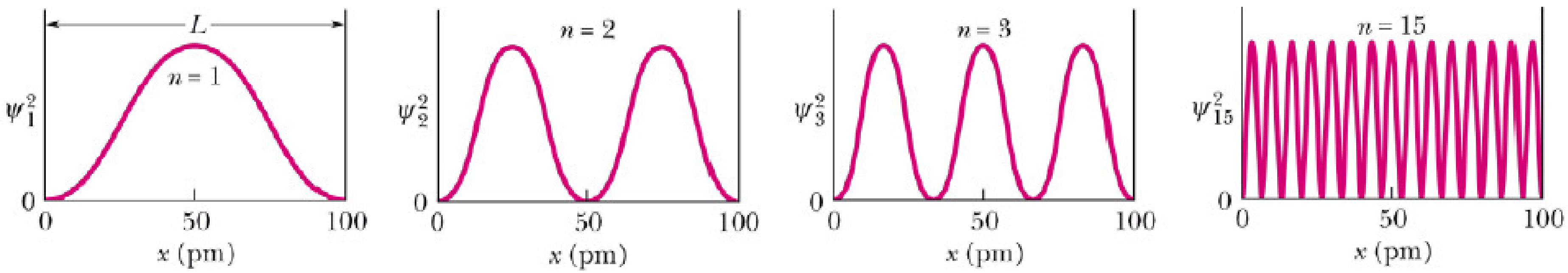
Este é um resultado geral para da Mecânica Quântica: " O de que em sistema onde há uma aprisionamento (confinamento), a não há estados possíveis com energia nula.

Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

A menor energia mencionada no exemplo anterior, correspondente ao estado fundamental, tendo número quântico n=1. Tal energia é chamada de energia de "**Ponto Zero**". Uma conclusão importante da mecânica quântica é que sistemas confinados **não podem ter energia mínima zero**.
Embora já tenha sido mencionado vale a pena perguntar de novo: **"Porque não se pode colocar n= 0 na equação das energias discretas e possíveis para o poço infinito?**

Resp. Porque n=0 não é um número quântico permitido! Observando as equações 1 e 2, vê-se que n=0 faria com que a função de onda fosse identicamente nula, que em outras palavras diz que não pode existir elétron neste poço.

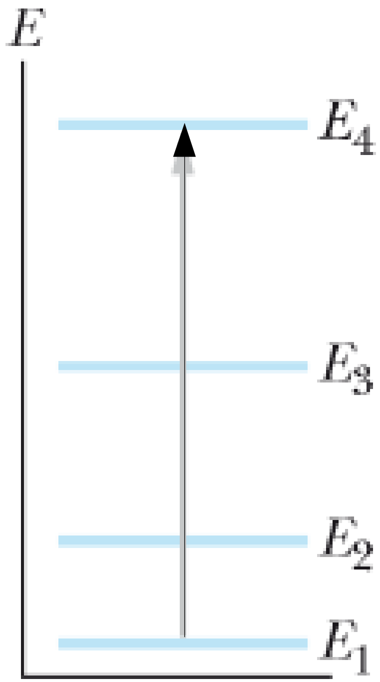
A densidade de probabilidade corresponde ao quadrado do módulo da função de onda. Diferente da partícula livre, a probabilidade de encontrar o elétron em uma dada posição não é igualmente distribuída. A figura abaixo mostra a distribuição de probabilidade correspondente a um poço de potencial infinito de largura igual a 100 nm.



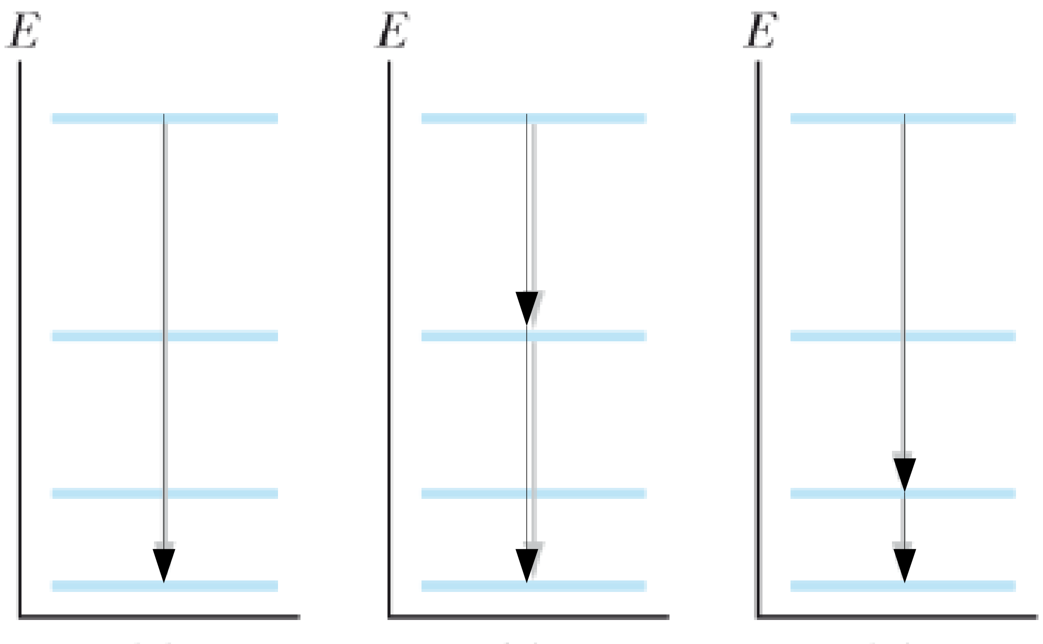
Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

As mudanças entre os possíveis estados de energia se dá mediante a absorção de energia de um fóton ou a sua emissão quando o elétron transita para um estado de energia mais baixa. A diferença de energia entre os estados corresponde a energia do fóton (absorvido ou emitido) hf.

O elétron é excitado para um nível de maior energia.



O elétron pode decair de várias formas (com diferentes probabilidades) para um estado de menor energia.



Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

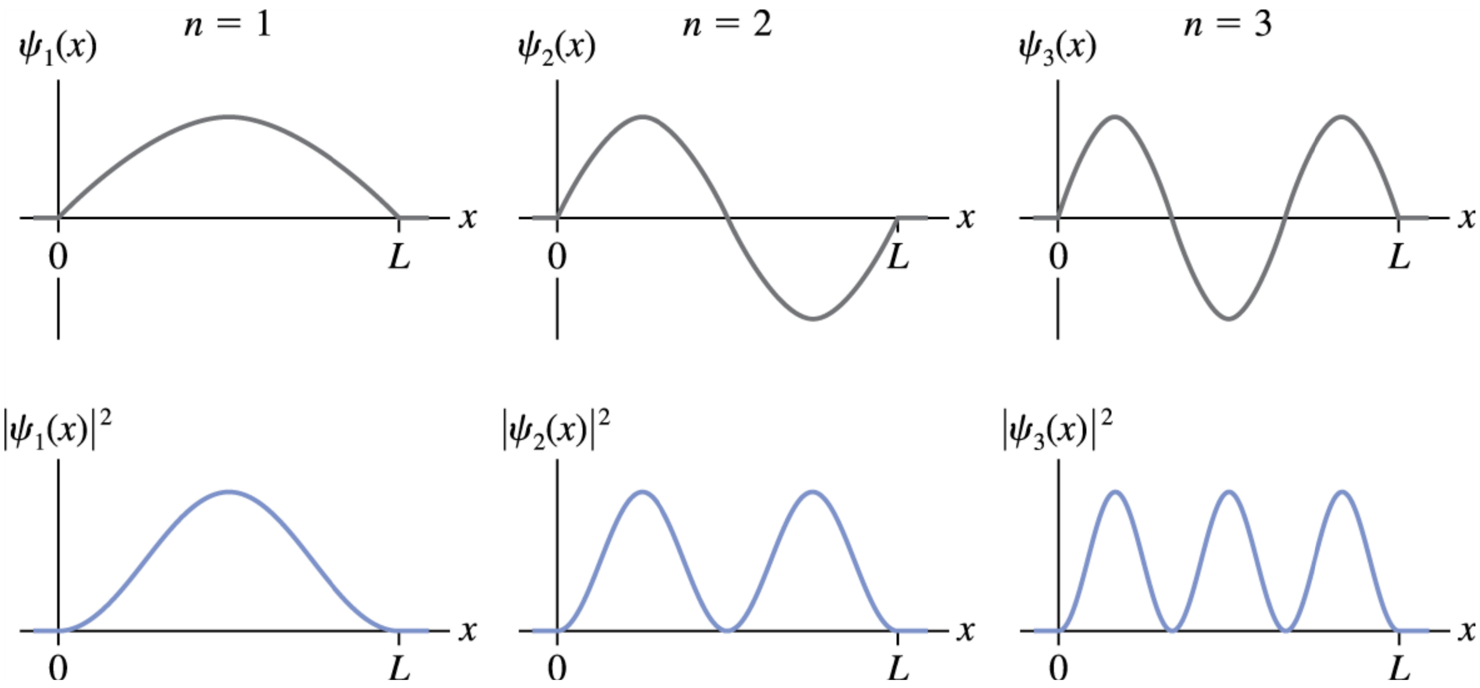
A probabilidade p(x) de que um elétron seja detectado em um ponto x do interior do poço é dado por:

$$p(x) = \psi(x)^2\, dx$$

A densidade de probabilidade para um eléwron confinado em um poço infinito é:

$$\psi_n^2(x) = A^2 \,\mathrm{sen}^2\,(n\pi/L\; x)\;;\; n = 1,2,3...$$

Para calcular a probabilidade de que um elétron seja detectado em uma região do interior do poço, entre os pontos x_1 e x_2, basta integrar $p(x)$ entre os limites da região.



A probabilidade é numericamente igual a área por baixo da curva de densidade de probabilidade. Normalizando a probabilidade para cada estado encontramo que:

$A^2 = 2/L$.

Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

Equação de Normalização de probabilidade: $\int_0^L \psi^2(x)\,dx = 1$

Determine o valor da constante A da *equação* para um poço de potencial infinito que se estende de $x = 0$ a $x = L$.

Da condição de normalização temos: $A^2 \int_0^L \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1.$

Fazendo as substituições de variáveis

$$y = \frac{n\pi}{L}x, \quad \rightarrow \quad dx = \frac{L}{n\pi}dy. \qquad A^2 \frac{L}{n\pi}\int_0^{n\pi} (\operatorname{sen}^2 y)\, dy = 1.$$

$$\int \operatorname{sen}^2 x\, dx = \tfrac{1}{2}x - \tfrac{1}{4}\operatorname{sen} 2x$$

$$\frac{A^2 L}{n\pi}\left[\frac{y}{2} - \frac{\operatorname{sen} 2y}{4}\right]_0^{n\pi} = 1. \qquad \frac{A^2 L}{n\pi}\frac{n\pi}{2} = 1; \qquad A = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

Um elétron se encontra no estado fundamental do poço de potencial infinito unidimensional cuja largura é $L = 100$ pm.

(a) Qual é a probabilidade de que o elétron seja detectado no terço esquerdo do poço (entre $x_1 = 0$ e $x_2 = L/3$)?

Solução:

$$P(x) = \int_0^{L/3} \frac{2}{L} \operatorname{sen}^2\left(\frac{1\,\pi}{L} x\right) dx.$$

Fazendo $y = (\pi/L)x$ *teremos* $dy = (\pi/L)\,dx$ *com limites 0 e* $\pi/3$

$$P(x) = \left(\frac{2}{L}\right)\left(\frac{L}{\pi}\right)\int_0^{\pi/3} (\operatorname{sen}^2 y)\, dy.$$

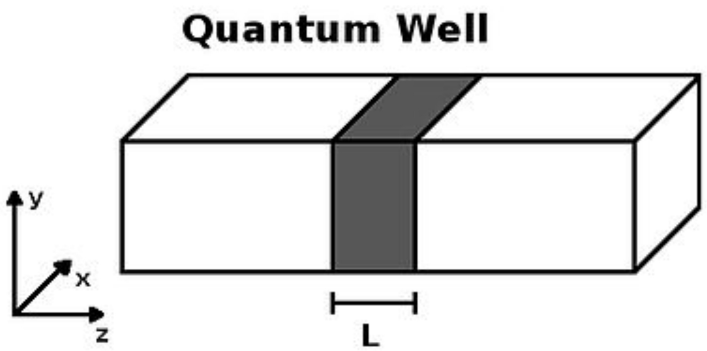
$$\text{probabilidade} = \frac{2}{\pi}\left(\frac{y}{2} - \frac{\operatorname{sen} 2y}{4}\right)_0^{\pi/3} = 0{,}20.$$

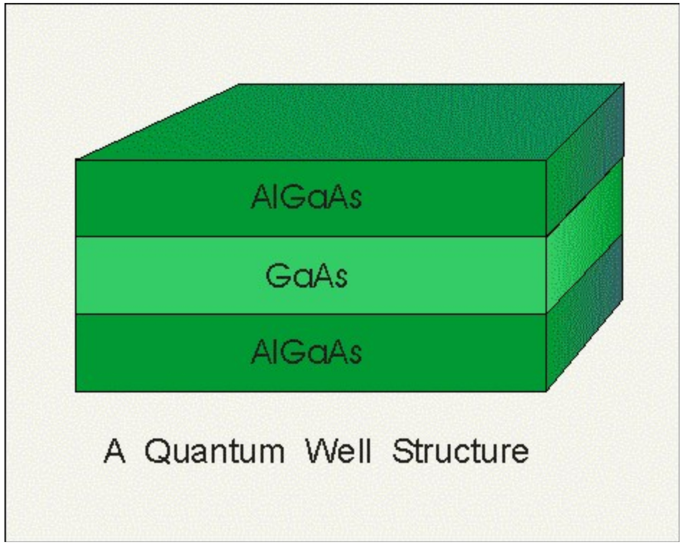
(b) Qual é a probabilidade de que o elétron seja detectado no terço médio do poço (entre $x_1 = L/3$ e $x_2 = 2L/3$)?

Resposta: do resultado do item a fica claro que são 60%!!!!

Aula 14 – Mais ondas de Matéria:

Poço quântico**:** estrutura formada "sanduichando-se" um material entre dois outros (em geral, ambos semicondutores).





Ex: um elétron está contido em um poço quântico 1D com um comprimento L desconhecido. Inicialmente, esperamos o dispositivo emitir toda a sua energia espontaneamente, e depois o iluminamos com radiação de diferentes frequencias. Verificamos que o maior comprimento de onda que ele é capaz de absorver é λ = 1098nm. **Qual é o comprimento do poço?** Dados:

(a) Aprox. 0,1 nm b) Aprox. 1 nm c) Aprox. 10 nm
d) Aprox. 100 nm e) Aprox. 1000 nm