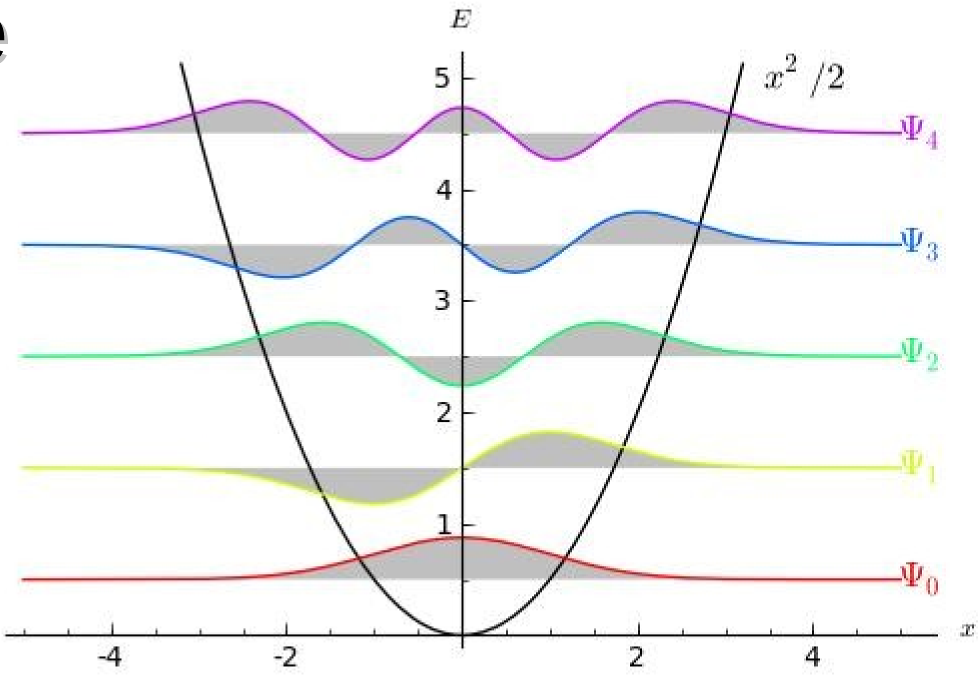
# Mecânica Quântica

## Aula 10: A Equação de Schrödinger Independente do Tempo
## O potencial Nulo e o Potencial Degrau

Universidade Federal do ABC

Pieter Westera
pieter.westera@ufabc.edu.br




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

# A Equação de Schrödinger

Erwin Schrödinger

Lembrete da última aula:

A Equação de Schrödinger

$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 + V(x, t)\cdot\Psi(x, t) = i\hbar \cdot \partial\Psi(x, t)/\partial t$

(Esta versão não usaremos muito)

Usaremos mais esta:

A Equação de Schrödinger independente do tempo

$-\hbar^2/2m \cdot d^2\psi(x)/dx^2 + V(x)\cdot\psi(x) = E\cdot\psi(x)$

Ou simplesmente

$H_{op}\psi(x) = E\cdot\psi(x)$

(Às vezes escrita de maneira mais simples ainda como $H\psi = E\psi$)

Vale para situações com potenciais independentes do tempo.
Neste caso, a função de onda completa é $\varphi(t)\cdot\psi(x) = e^{-iEt/\hbar}\cdot\psi(x)$

# Condições, que uma função de onda tem que satisfazer

- $\psi(x)$ tem que satisfazer a Equação de Schrödinger

- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser contínuas
  (exceção: pode ter quinas em posições de transição
  para regiões com potenciais infinitos)

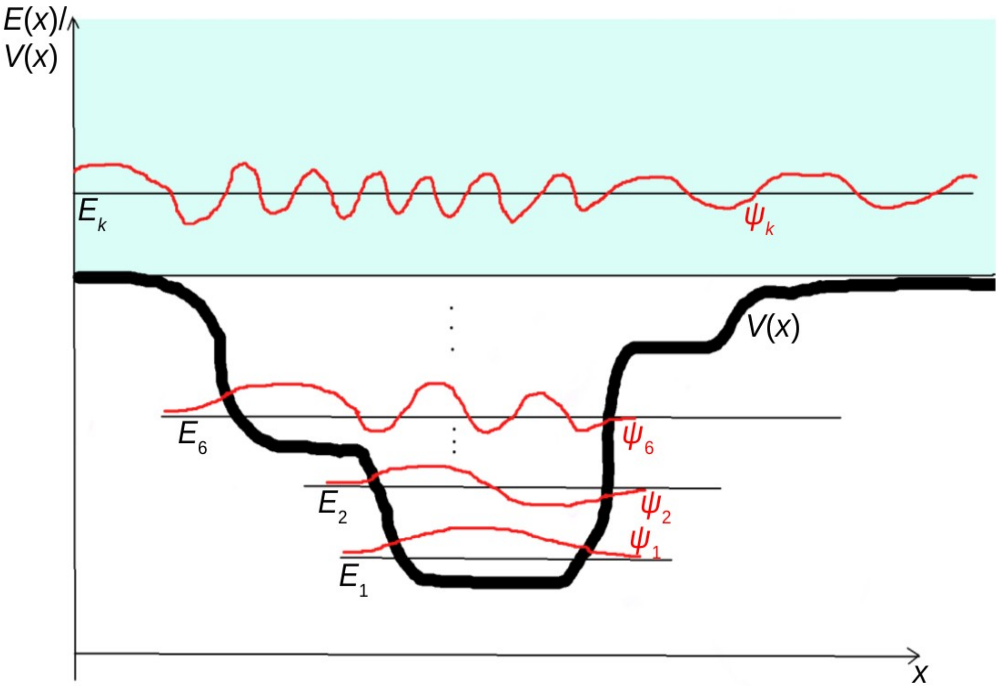
- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser finitas

- $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ têm que ser unívocas

- condição de normalização: $\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \psi(x) dx = 1$

# “Receita de Bolo”

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



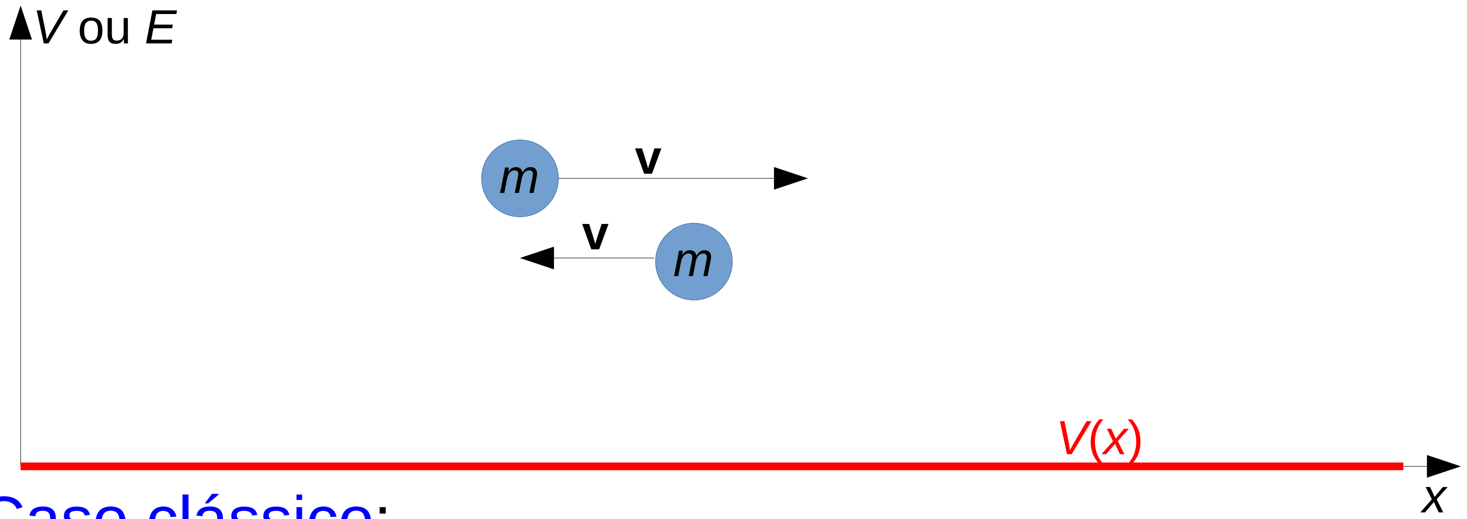

Para $E > V(-\infty)$ e/ou $E > V(+\infty)$:
estado “livre”,
espectro contínuo de energias

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

Para $E < V_{min}$ não há solução

# A Partícula Livre (Potencial Nulo)

$V(x) = 0$



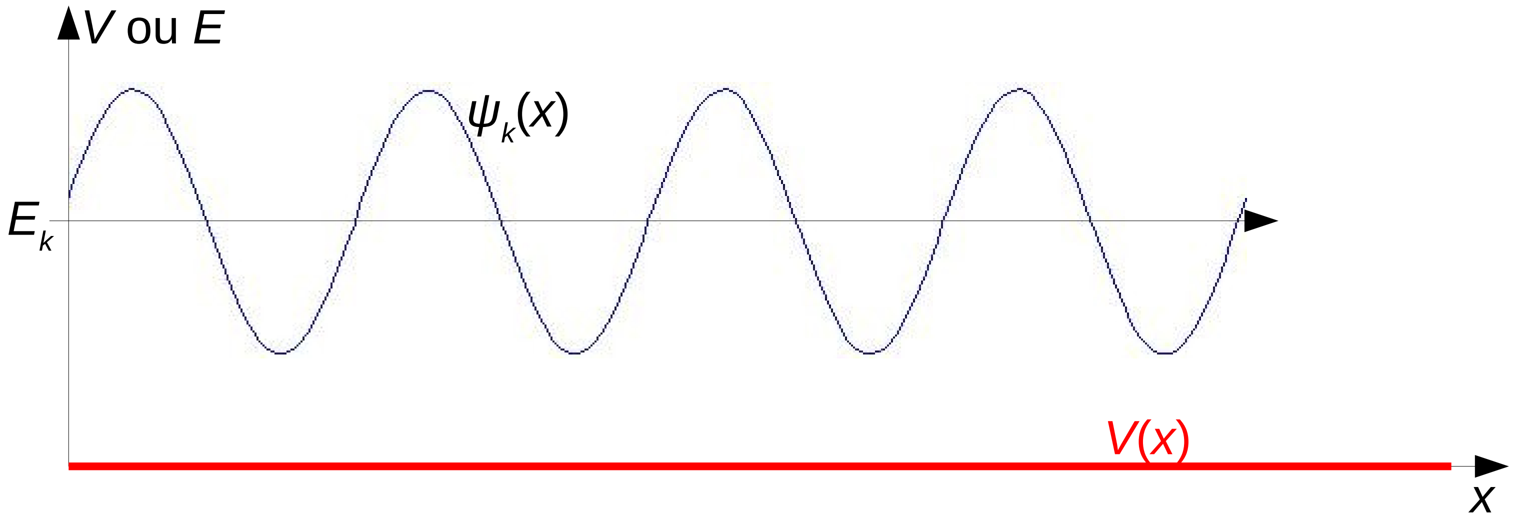

Caso clássico:

$E > 0$: Uma partícula se movimentando com velocidade constante pra direita ou esquerda ($v = \pm\sqrt{2E/m}$)

$E < 0$: Não existe

# A Partícula Livre

Caso quântico




Equação de Schrödinger dependente do tempo p. $E > 0$:

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 = i\hbar \cdot \partial\Psi(x, t)/\partial t$$

solução: $\Psi(x, t) = C \cdot e^{i(\pm kx - \omega t)}$, já que

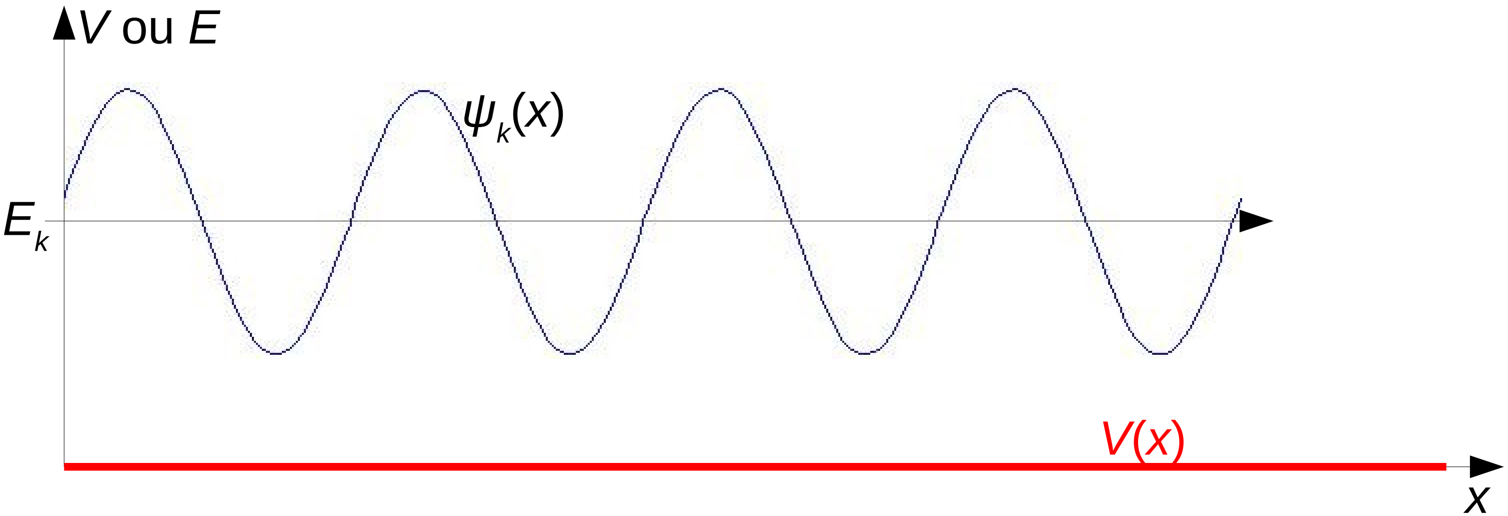
$\partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 = C \cdot i^2 k^2 \cdot e^{i(\pm kx - \omega t)} = -k^2 \cdot \Psi(x, t)$, e

$\partial\Psi(x, t)/\partial t = C \cdot (-i\omega) \cdot e^{i(\pm kx - \omega t)} = -i\omega \cdot \Psi(x, t)$

=> E.d.S.: $\hbar^2 k^2/2m \cdot \Psi(x, t) = \hbar\omega \cdot \Psi(x, t)$

# A Partícula Livre

Caso quântico



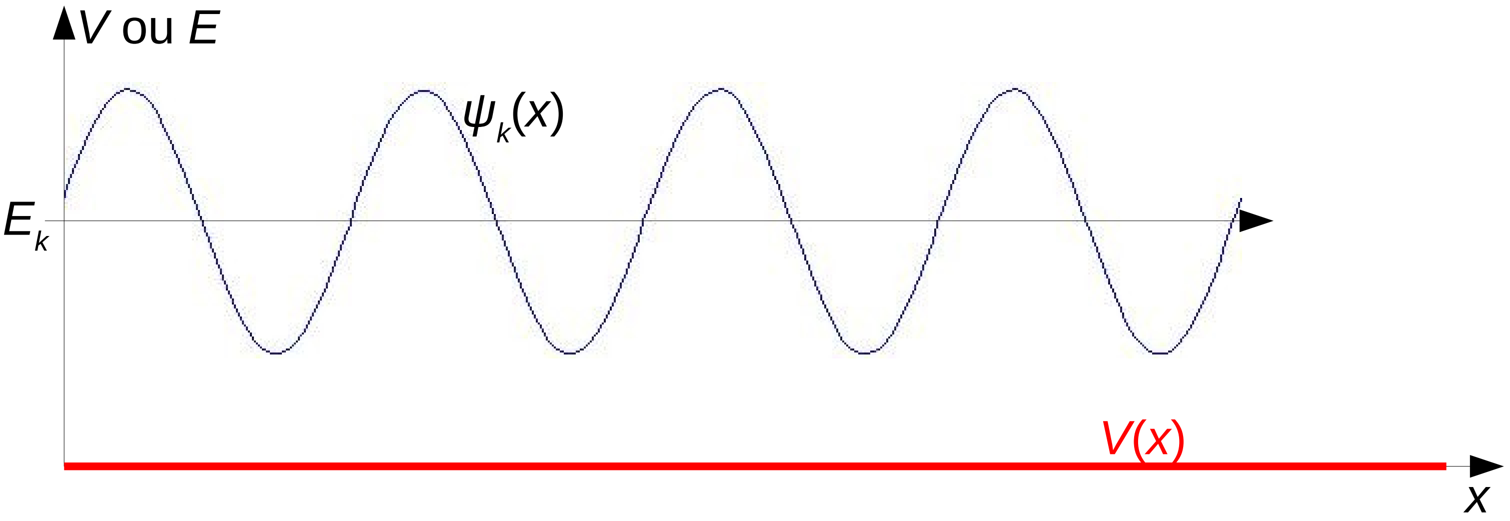

Equação de Schrödinger dependente do tempo p. $E > 0$:

$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\Psi(x, t)/\partial x^2 = i\hbar \cdot \partial\Psi(x, t)/\partial t$

solução: $\Psi(x) = C\cdot e^{i(\pm kx - \omega t)} = e^{-i\omega t}\cdot C\cdot e^{\pm ikx} = \varphi(t)\cdot\psi(x)$, onde
$\varphi(t) = e^{-i\omega t} = e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow E = \hbar\omega$,
$\psi(x) = C\cdot e^{\pm ikx}$, $E = E_k = \hbar^2k^2/2m \Leftrightarrow k = \sqrt{2mE}/\hbar = p/\hbar$

# A Partícula Livre

## Caso quântico



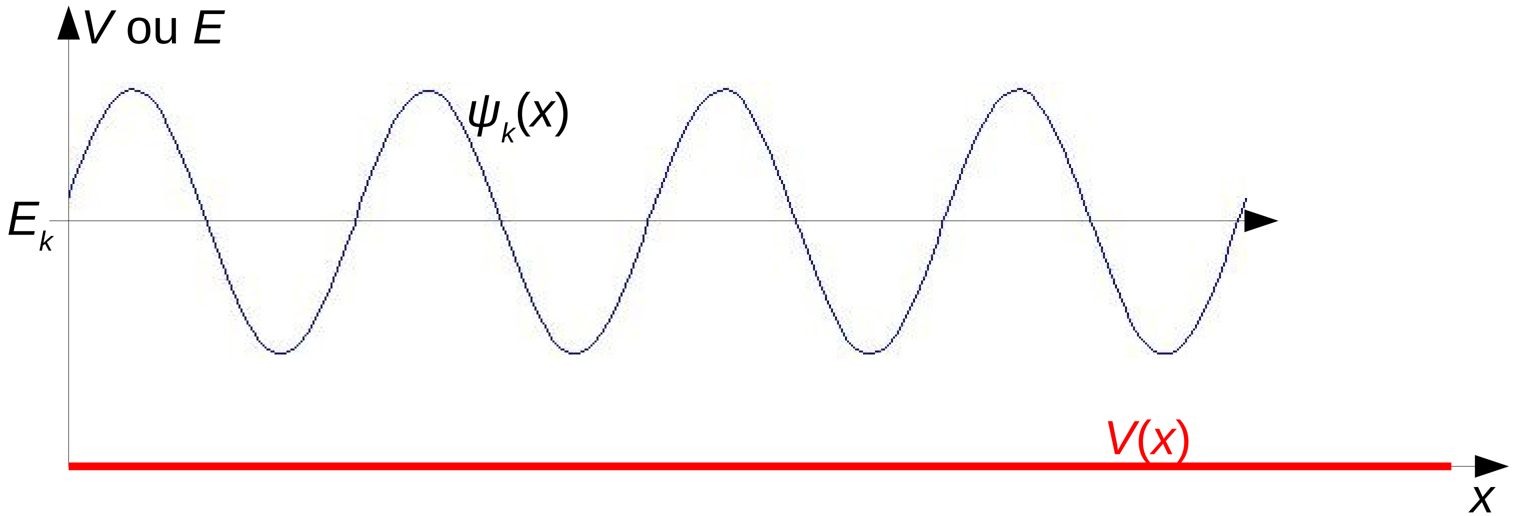

$$\Psi(x) = C{\cdot}e^{\,i(\pm kx\,-\,\omega t)}$$

A solução com $+k$ corresponde a uma onda propagando-se pra direita, já que $\Psi(x) = C{\cdot}e^{\,i(kx\,-\,\omega t)} = C{\cdot}e^{\,ik(x\,-\,vt)}$, com $v = \omega/k$, é da forma $g(x - vt)$ e analógicamente, a com $-k$, a uma onda propagando-se pra esquerda.

!!! Estas duas soluções não são normalizáveis (são ondas puras).
Para descrever uma partícula livre realista, é necessário combinar várias destas ondas, formando um pacote de ondas como visto duas aulas atrás.

# A Partícula Livre

Caso quântico




Já que $V(x) = 0$ não depende do tempo, também deve ser possível resolver o problema da partícula livre usando a Equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\psi(x)/\partial x^2 = E \cdot \psi(x)$$

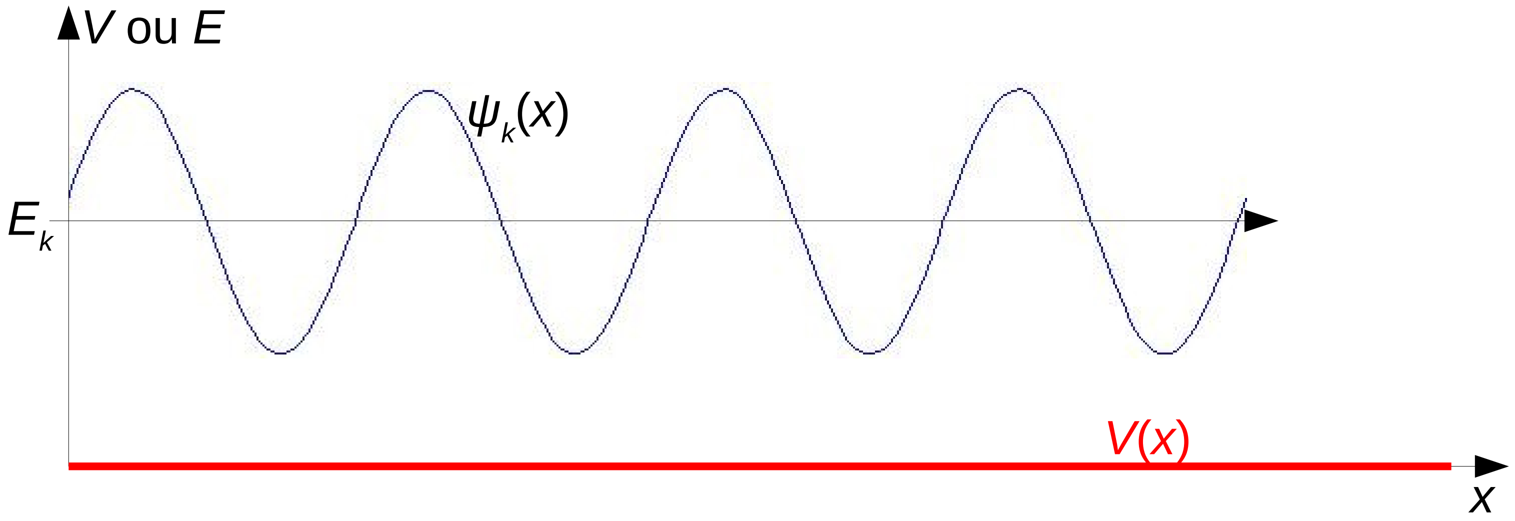
$\psi(x) = A \cdot \text{sen}\, kx + B \cdot \cos kx$

$\Rightarrow \partial^2\psi(x)/\partial x^2 = A \cdot (-k^2) \cdot \text{sen}\, kx + B \cdot (-k^2) \cdot \cos kx = -k^2 \cdot \psi(x)$

$\Rightarrow$ E.d.S.: $\hbar^2 k^2/2m \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$

# A Partícula Livre

## Caso quântico




Já que $V(x) = 0$ não depende do tempo, também deve ser possível resolver o problema da partícula livre usando a Equação de Schrödinger independente do tempo:

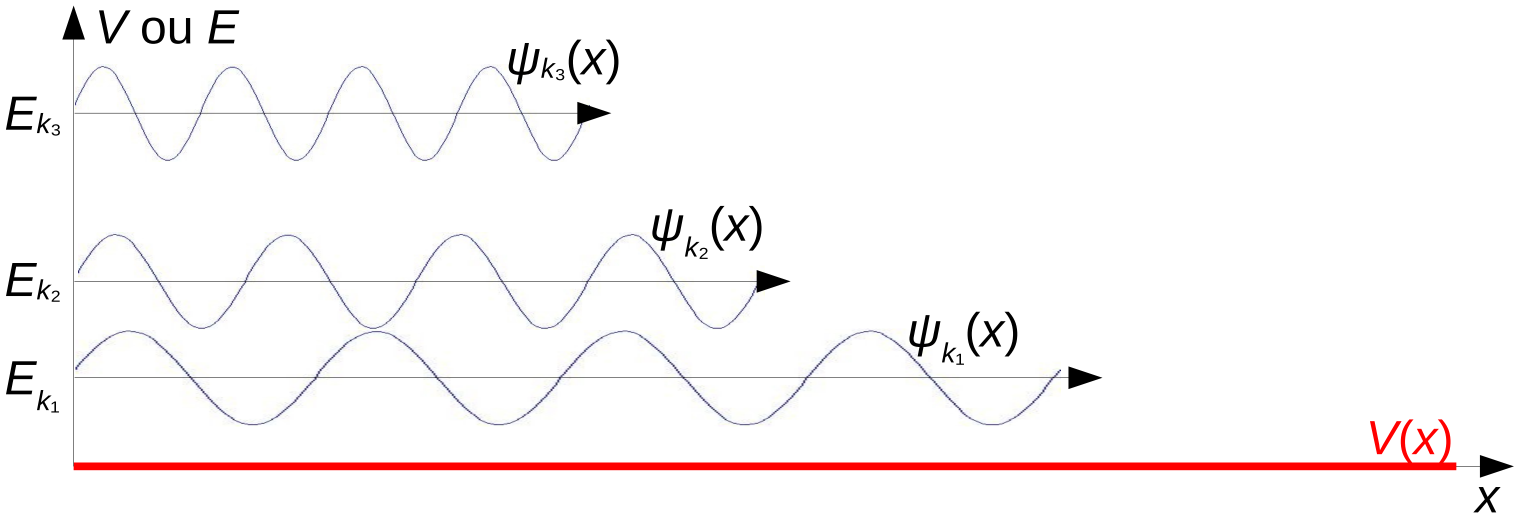
$$-\hbar^2/2m \cdot \partial^2\psi(x)/\partial x^2 = E \cdot \psi(x)$$

$$\psi(x) = A \cdot \text{sen } kx + B \cdot \cos kx, \text{ onde } E = E_k = \hbar^2 k^2/2m \Leftrightarrow k = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$$

$E < 0$: sem solução

# A Partícula Livre

## Caso quântico

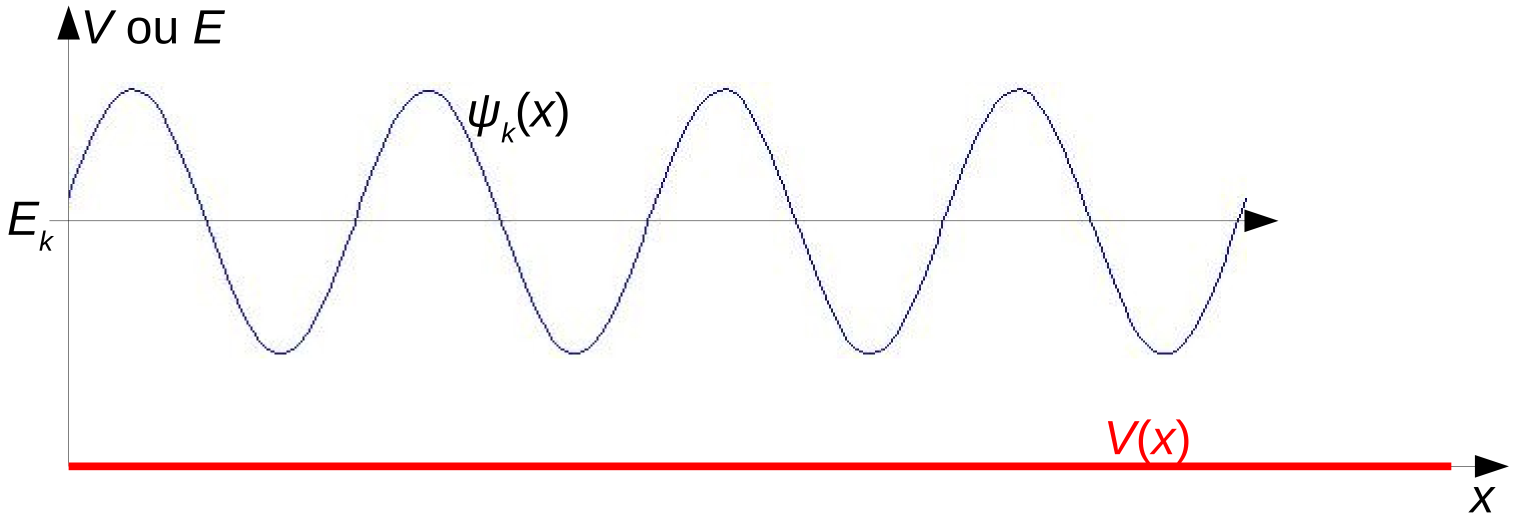



É frequente na física quântica colocar tudo no mesmo desenho:
- o potencial $V(x)$,
- as energias das funções de onda, como linhas horizontais,
- e as (partes reais das) funções de onda, usando as linhas que representam as suas energias como eixos $x$.

As escalas verticais das funções de onda são normalmente arbitrárias (afinal a unidade da função de onda não é a mesma que a do potencial/energia).

# A Partícula Livre

## Caso quântico




Mas o que as soluções encontradas usando a Equação de Schrödinger dependente do tempo, $C \cdot e^{\pm ikx}$, e estas últimas, $A \cdot \text{sen}\, kx + B \cdot \cos kx$, têm a ver uma com a outra?

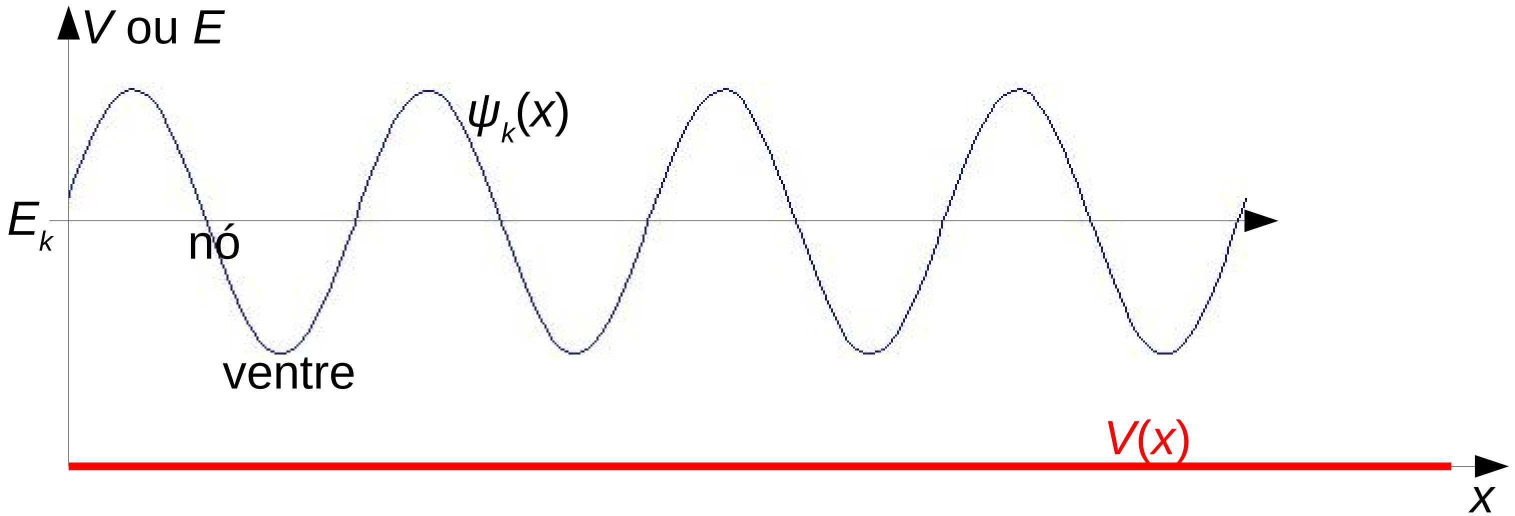
As últimas são combinações lineares das soluções $C \cdot e^{\pm ikx}$, já que:

$\cos kx = ½ \cdot (e^{+ikx} + e^{-ikx})$ e $\text{sen}\, kx = -i/2 \cdot (e^{+ikx} - e^{-ikx})$

e vice-versa: $e^{+ikx} = \cos kx + i \cdot \text{sen}\, kx$ e $e^{-ikx} = \cos kx + -i \cdot \text{sen}\, kx$

# A Partícula Livre

## Caso quântico

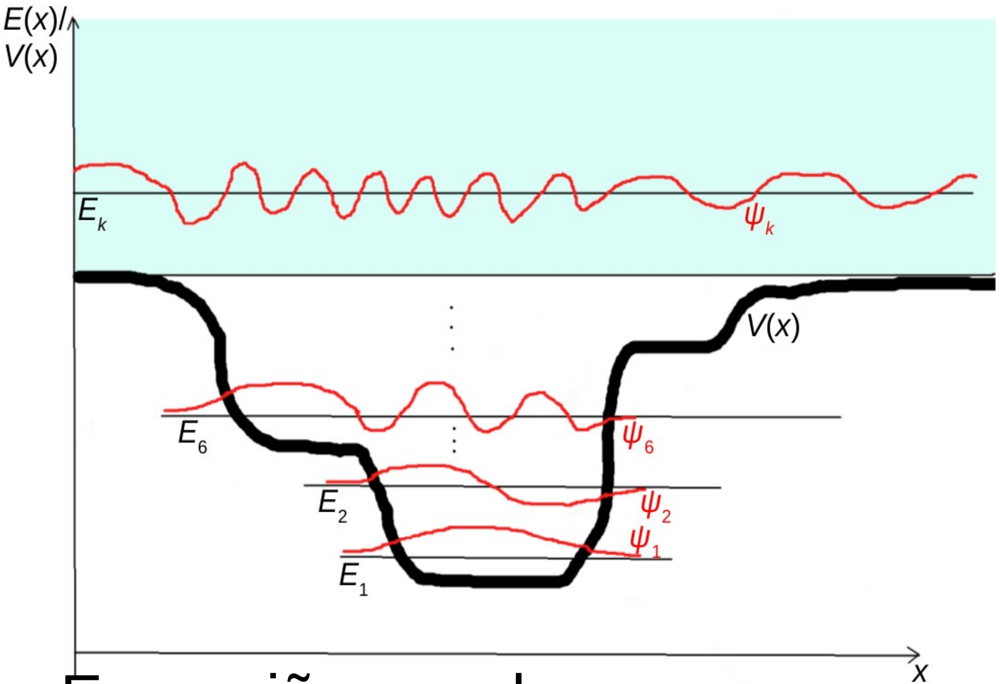



=> $A{\cdot}\text{sen}\,kx$ e $B{\cdot}\cos kx$ correspondem a combinações de ondas propagando-se pra direita, e ondas propagando-se pra esquerda, ou seja, a ondas estacionárias.

Não esqueçam, que a função de onda completa ainda contém a parte dependente do tempo, $\varphi(t) = e^{-i\omega t} = e^{-iEt/\hbar}$.

# "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 $\psi''/\psi = 2m(V-E)/\hbar^2$ negativo:

$\psi(x)$ oscilatório, cos/sen $kx$, ou $e^{\pm ikx}$, onde $k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$ ($\lambda = 2\pi/k$)

# Reflexão e Transmissão de Ondas (Potencial Degrau)

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 outra coisa:

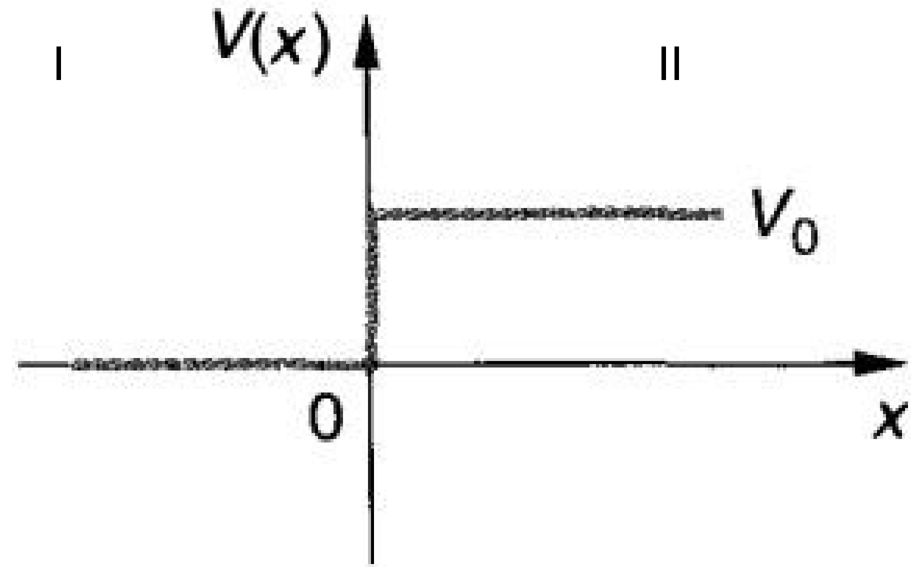
Interpretamos a função de onda como representação de um feixe de partículas, e normalizamos pela densidade de partículas $\rho := |\psi(x)|^2$. Se tem $N$ partículas entre as posições $a$ e $b$, $\rho = N/(b-a)$:

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

# Reflexão e Transmissão de Ondas

## Degrau de Potencial

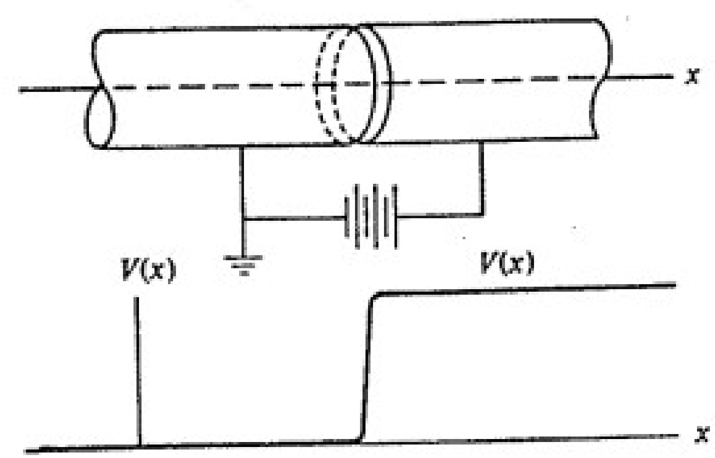
Potencial da forma:




$V(x) = 0$ para $x < 0$ (região I)

$V_0$ para $x > 0$ (região II)

Aproximação razoável pro potencial que "sente" uma partícula caregada num sistema de dois eletrodos ligeiramente separados e mantidos a voltagens diferentes, se a distância naquela o potencial "pula" de um valor pro outro é menor que o comprimento de onda de de Broglie da partícula.

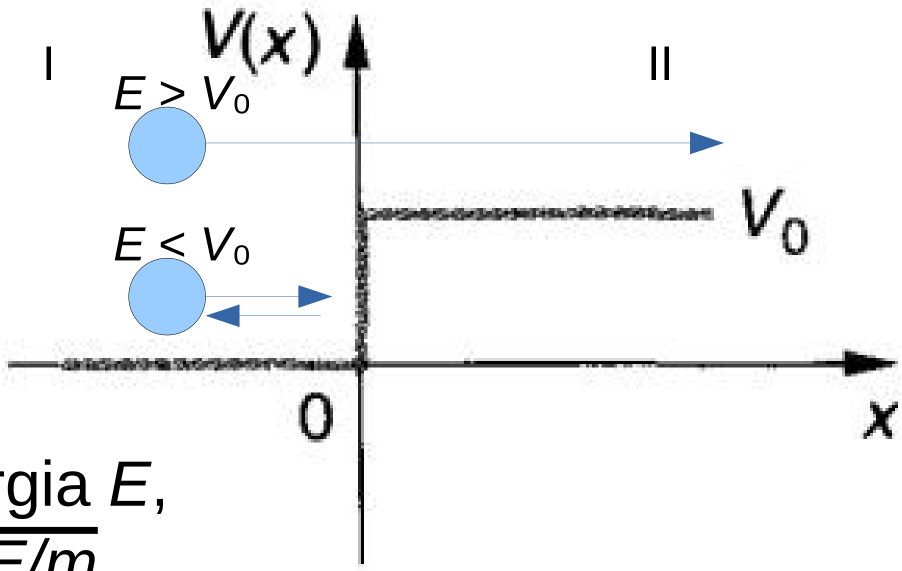


# Reflexão e Transmissão de Ondas

## 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 $v = \sqrt{2(E-V_0)/m}$
=> transmissão

# Reflexão e Transmissão de Ondas

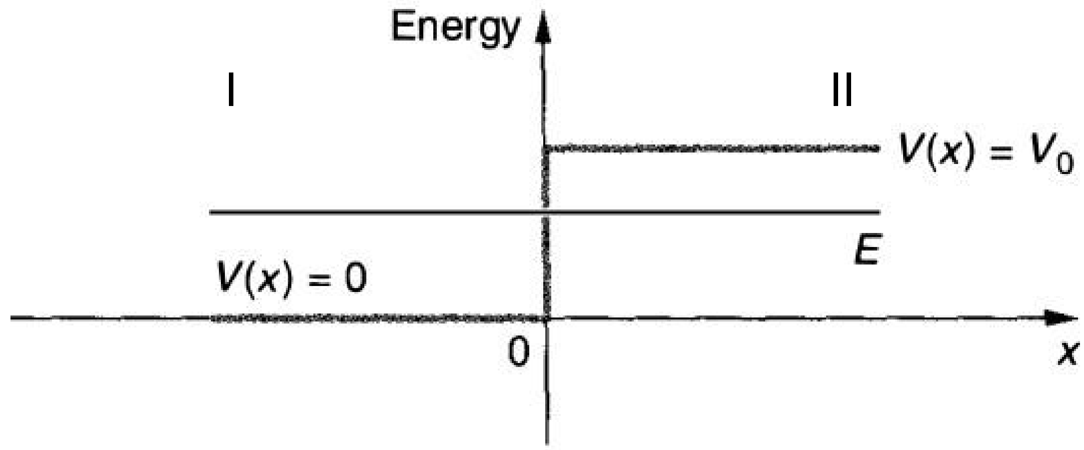
## Caso Quântico

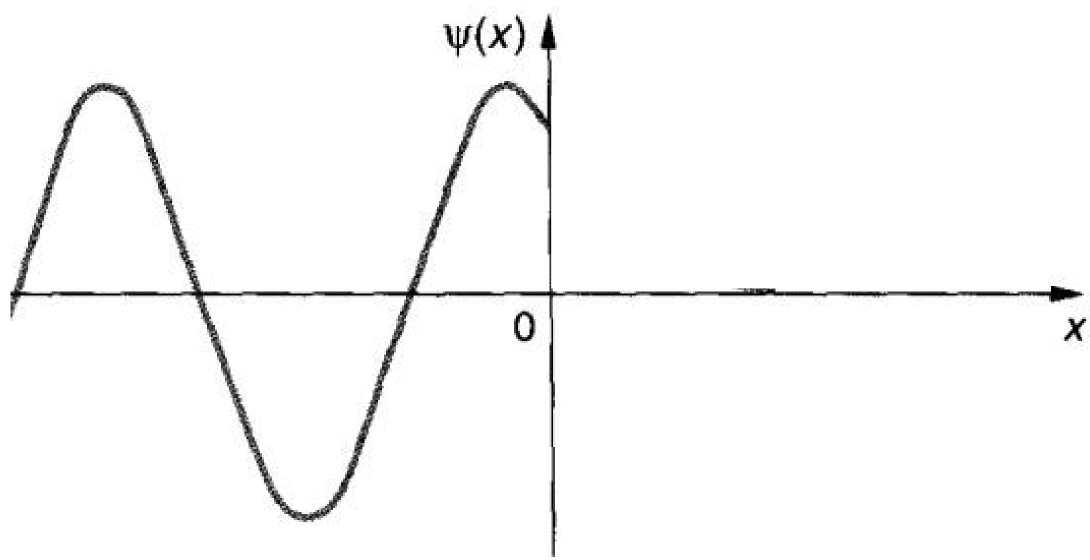
- $E < V_0$:

$x < 0$ (partícula livre):

$\psi_I(x) = \underbrace{Ae^{ik_1 x}}_{\text{feixe incidindo}} + \underbrace{Be^{-ik_1 x}}_{\text{feixe refletido}}$,

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



# Reflexão e Transmissão de Ondas

## Caso Quântico

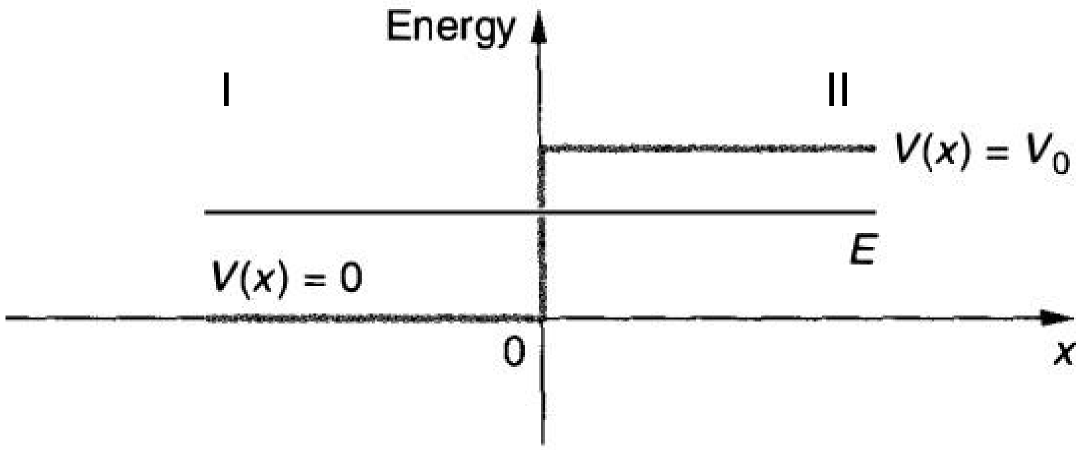
- $E < V_0$:

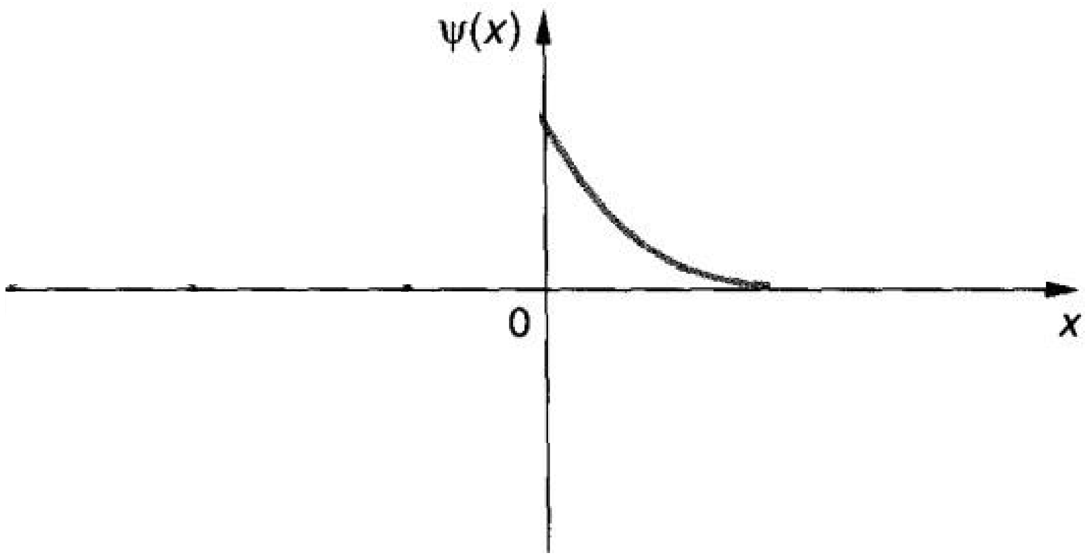
$x > 0$ (partícula em região "proibida"):

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

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

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



# Reflexão e Transmissão de Ondas

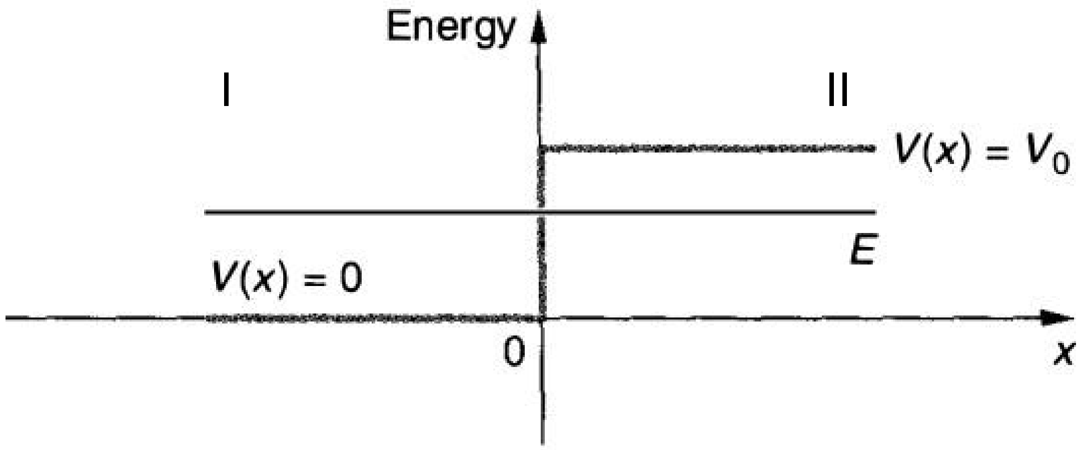
Caso Quântico

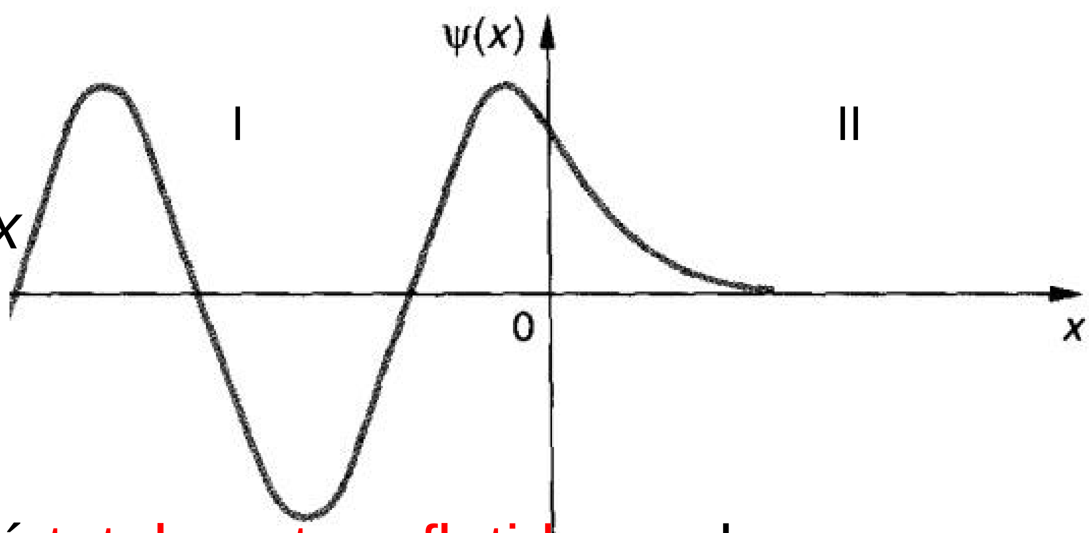
- $E < V_0$:

$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$,
onde $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $|A|^2 = \rho$

$\psi_{II}(x) = De^{-\alpha x}$,
onde $\alpha = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

Já que $\psi_I(x = 0) = \psi_{II}(x = 0)$
=> $D = A + B$
e $d\psi_I(x = 0)/dx = d\psi_{II}(x = 0)/dx$
=> $i\alpha/k_1 \cdot D = A - B$
=> $A = D/2\cdot(1+i\alpha/k_1)$,
=> $B = D/2\cdot(1-i\alpha/k_1) = \overline{A}$



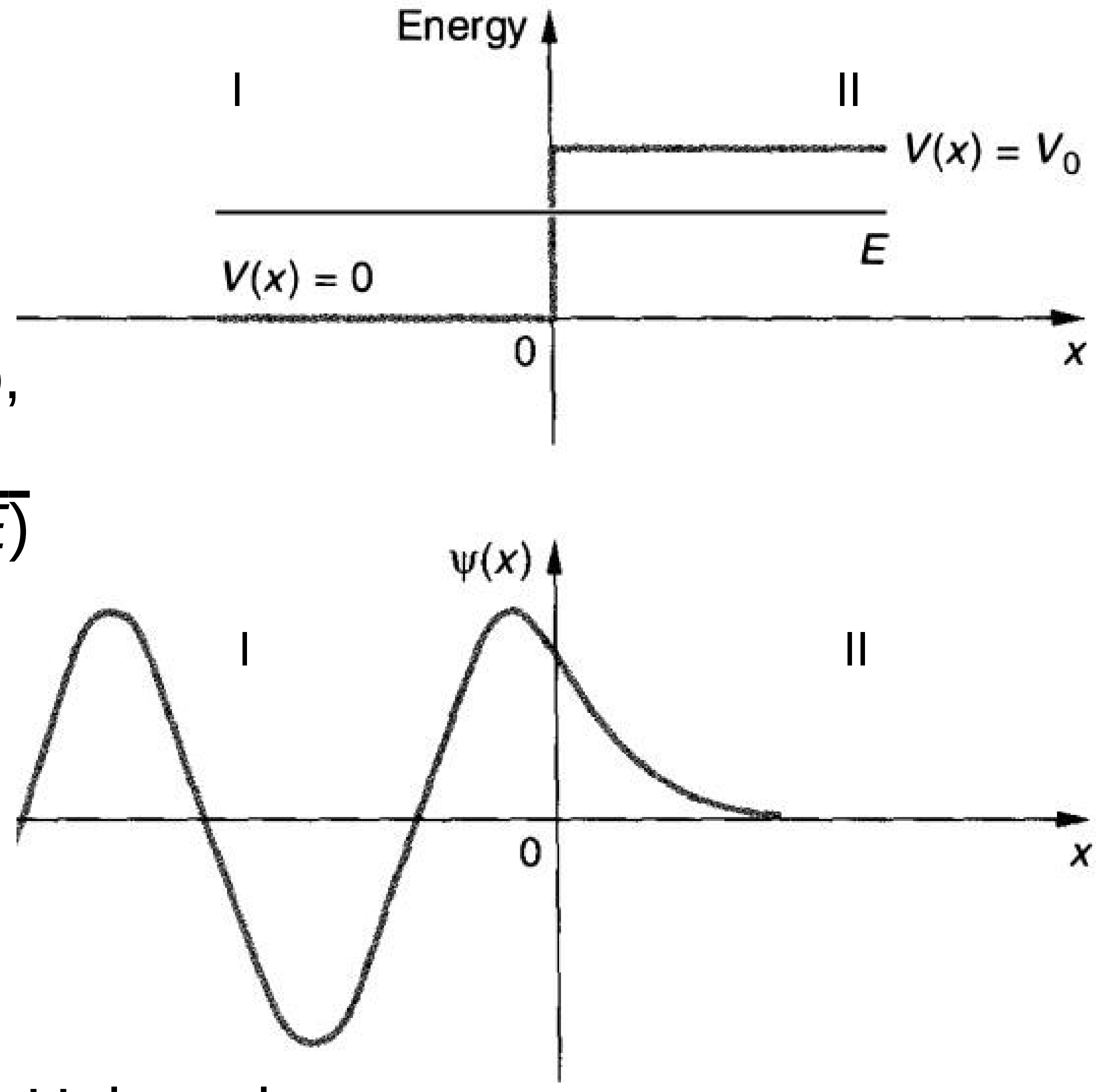




$|A| = |B|$ significa que a onda é totalmente refletida no degrau.
=> A sobreposição da onda incidente com a refletida é uma onda estacionária.

# Reflexão e Transmissão de Ondas

Caso Quântico

- $E < V_0$:



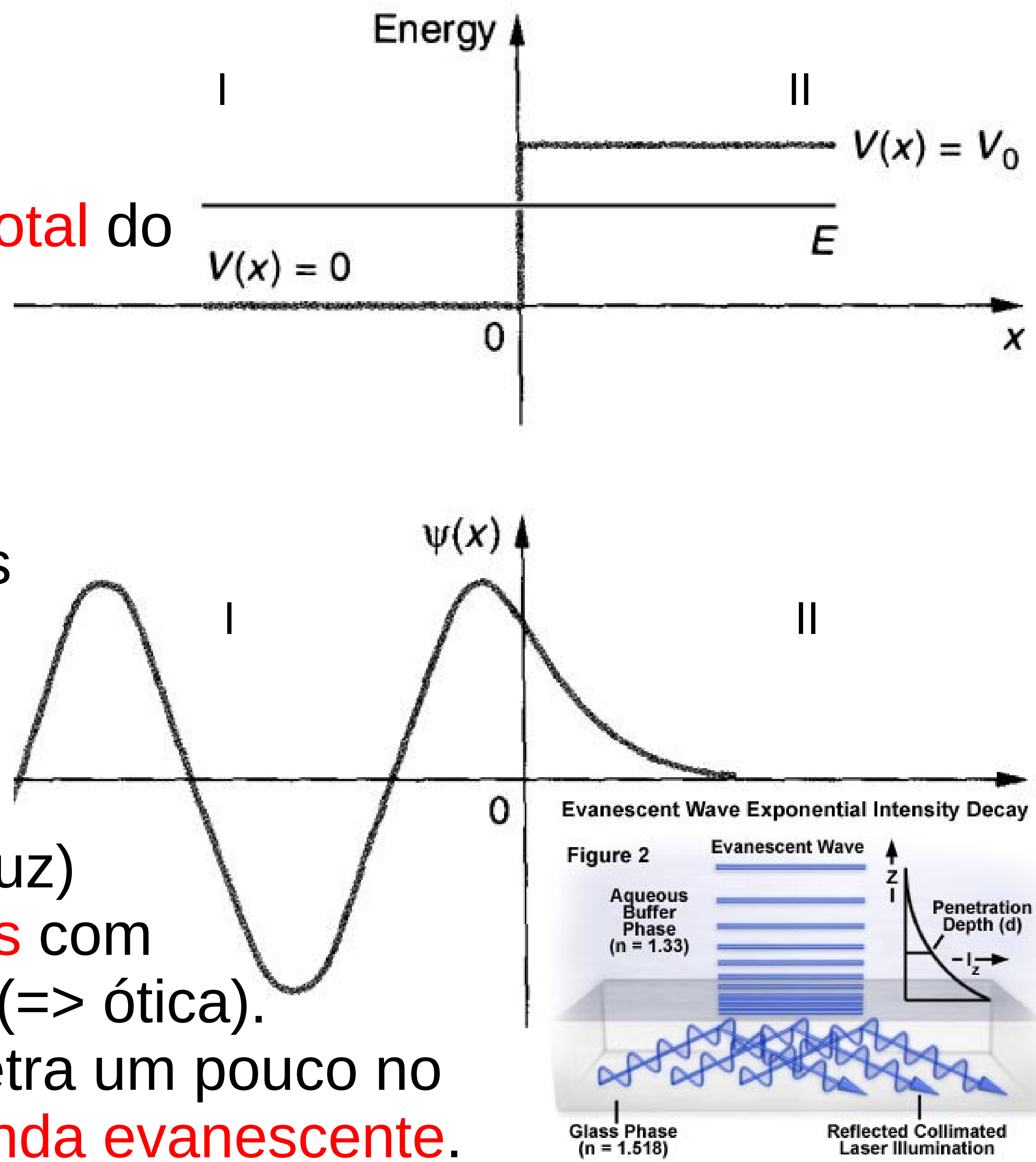

Na região classicamente probida, a função de onda consegue penetrar um pouco, a distância de penetração sendo $\Delta x = 1/\alpha = \hbar/\sqrt{2m(V_0\text{-}E)}$ => $\Delta p \approx \hbar/\Delta x = \sqrt{2m(V_0\text{-}E)}$ e $\Delta E \approx (\Delta p)^2/2m \approx V_0\text{-}E$, fazendo como que esta ”penetração na região proibida” está dentro da incerteza intrínseca na posição da partícula limitada pelo princípio de incerteza de Heissenberg.

# Reflexão e Transmissão de Ondas

## Caso Quântico

- $E < V_0$:

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



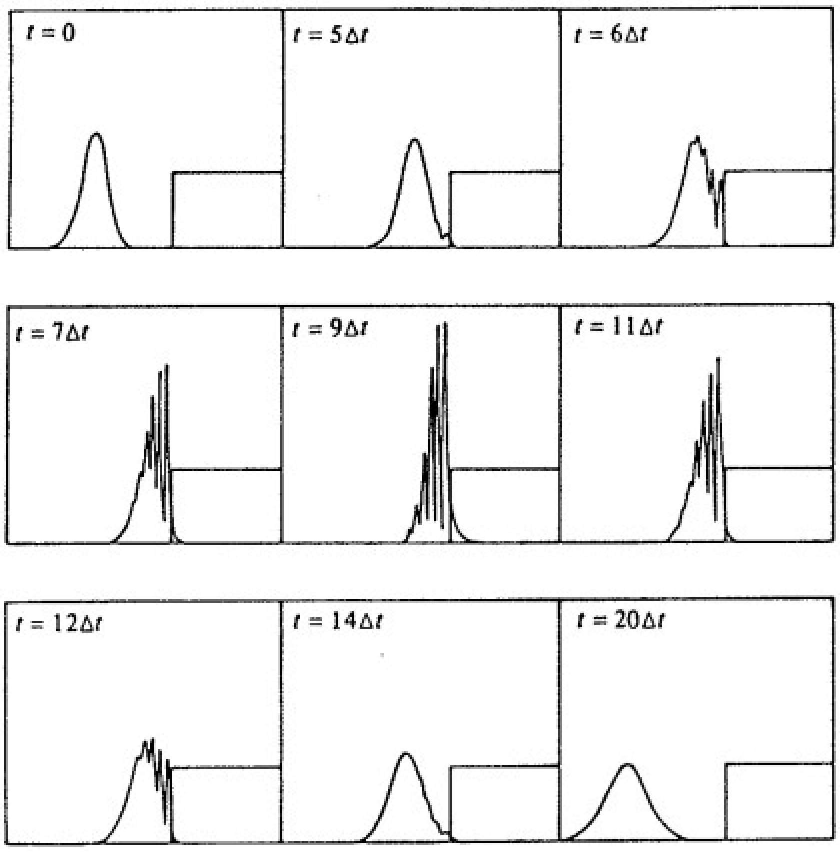

Parecido com a reflexão total de ondas eletromagnéticas (luz) na superfície entre dois meios com índices refratórios diferentes (=> ótica). Neste caso, a onda que penetra um pouco no meio “proibido” é chamada onda evanescente.

# Reflexão e Transmissão de Ondas

## Caso Quântico

- $E < V_0$:

Se queremos, em lugar de um feixe de partículas com momento ou comprimento de onda bem definido, olhar pro fenômeno para uma partícula individual, representada por um pacote de ondas localizado no espaço, mas com uma incerteza no momento (ou c. d. o.), a evolução no tempo da função de onda poderia se parecer com o "quadrinho" ao lado.



# Reflexão e Transmissão de Ondas

## Caso Quântico

- $E > V_0$:

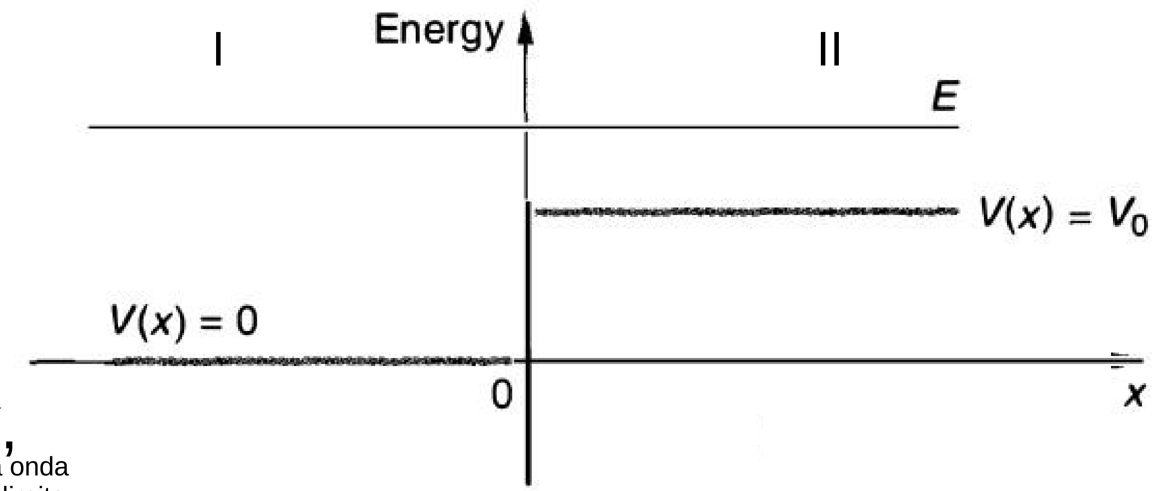
$x < 0$: $\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$,
onde $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $|A|^2 = \rho$

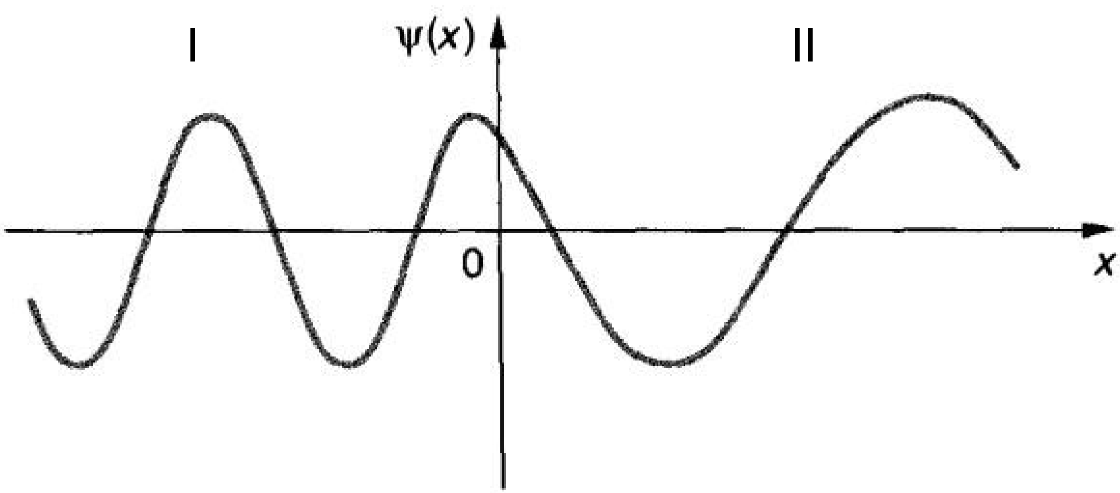
$x > 0$: $\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + \cancel{De^{-ik_2x}}$,
onde $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$,

seria uma onda
vindo da direita

Já que $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)$
$\Rightarrow A + B = C$

e $d\psi_I(x=0)/dx = d\psi_{II}(x=0)/dx$
$\Rightarrow k_1A - k_1B = k_2C$
$\Rightarrow B = (k_1-k_2)/(k_1+k_2) \cdot A$,
$C = 2k_1/(k_1+k_2) \cdot A$



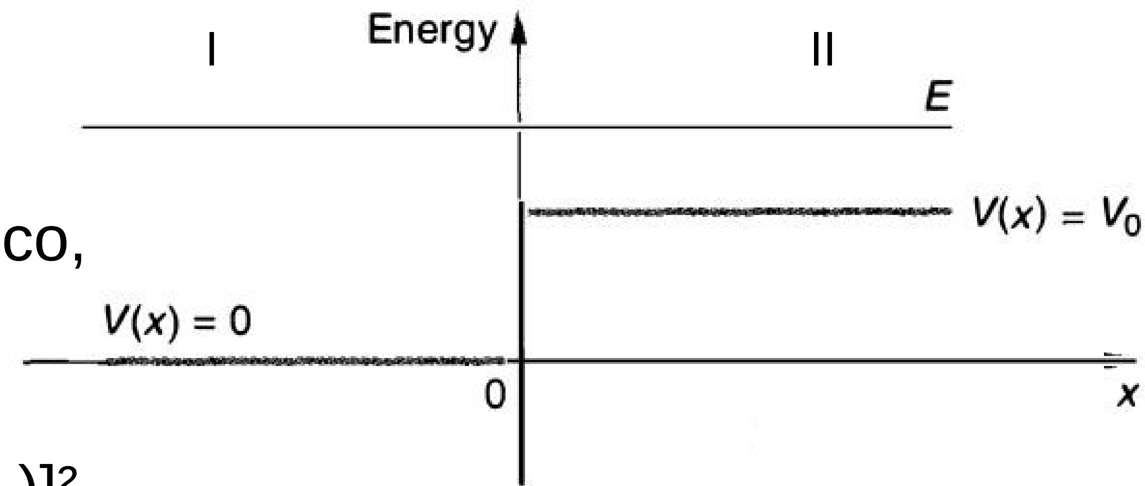



# Reflexão e Transmissão de Ondas

Caso Quântico

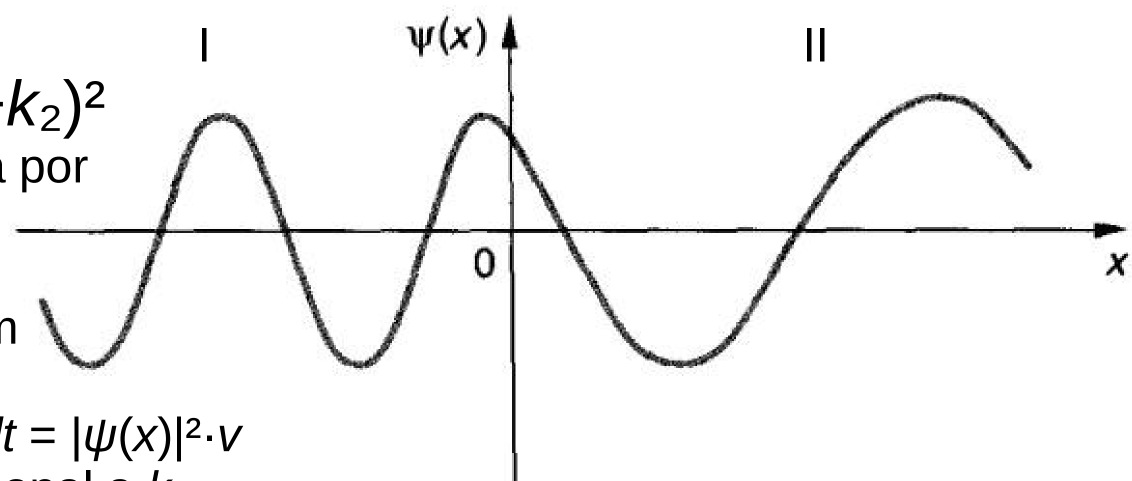
- $E > V_0$:

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 $k$.

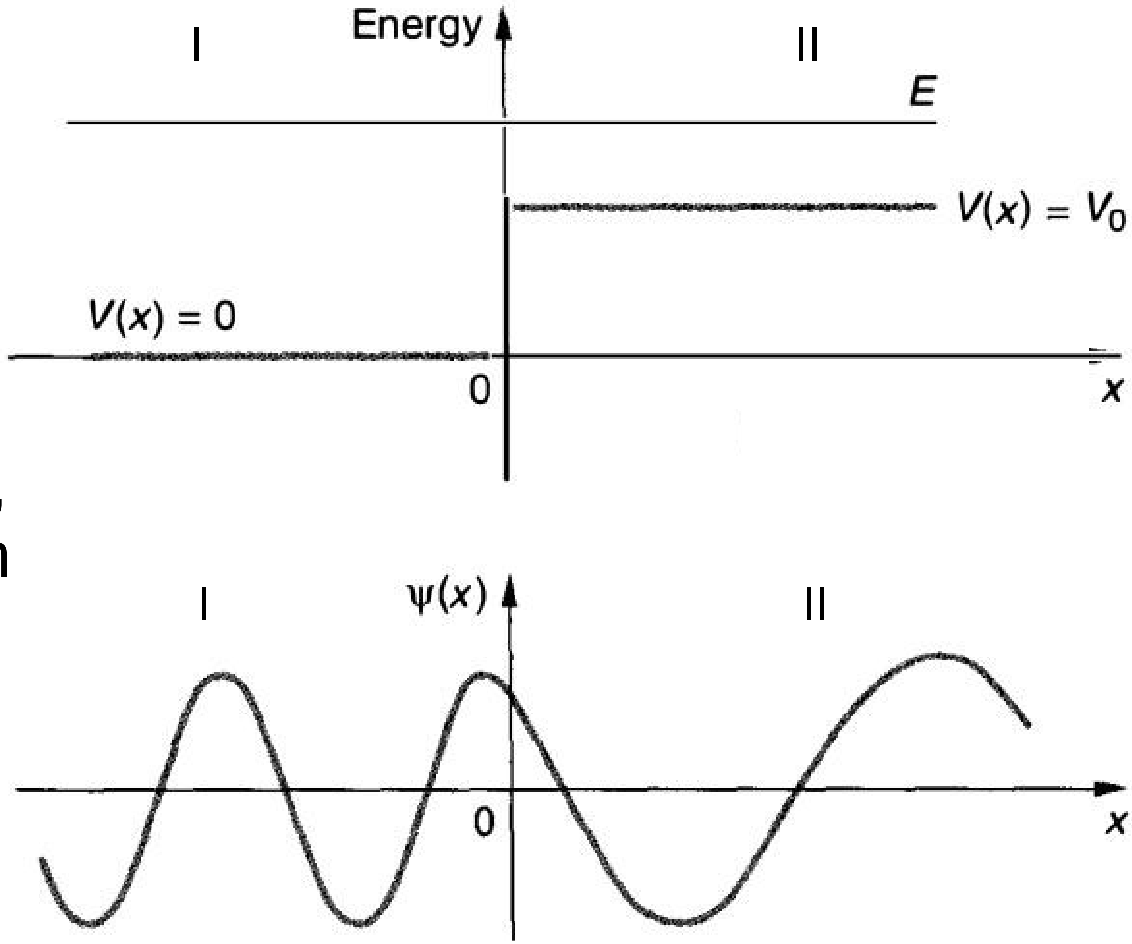
Exercício simples: mostre, que $R + T = 1$

# Reflexão e Transmissão de Ondas

Caso Quântico

- $E > V_0$:

$R = [(k_1-k_2)/(k_1+k_2)]^2$,
$T = 4k_1k_2/(k_1+k_2)^2$




É interessante ver que, nas expressões para $R$ e $T$, Os papeis de $k_1$ e $k_2$ podem ser trocados sem mudar os valores.
=> Tanto partículas vindo do potencial baixo pro alto, quanto as indo no sentido oposto, podem ser refletidas (e com os mesmos coeficientes de transmissão e reflexão).
=> reciprocidade

# Reflexão e Transmissão de Ondas

## Caso Quântico

- $E > V_0$:

Substituindo $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$,
e cortando duas vezes por $\sqrt{2mE}/\hbar$,
podemos escrever os coeficentes em termos de $V_0/E$:

$R = [(k_1-k_2)/(k_1+k_2)]^2 = [(1-\sqrt{1-V_0/E})/(1+\sqrt{1-V_0/E})]^2$,
$T = 4k_1k_2/(k_1+k_2)^2 = 4\sqrt{1-V_0/E} \,/\, (1+\sqrt{1-V_0/E})^2 = 1 - R$.

Pode parecer bizarro que $R$ e $T$ dependem apenas da razão entre energia das partículas e potencial do degrau, já que desta maneira, reflexão considerável deve ser possível até para energias macroscópicas, mas neste caso, um “pulo” abrupto o suficiente não é mais realista (não é mais um potencial tipo degrau), já que o comprimento de onda de de Broglie da partícula é muito mais curto que no caso microscópico.

# Reflexão e Transmissão de Ondas

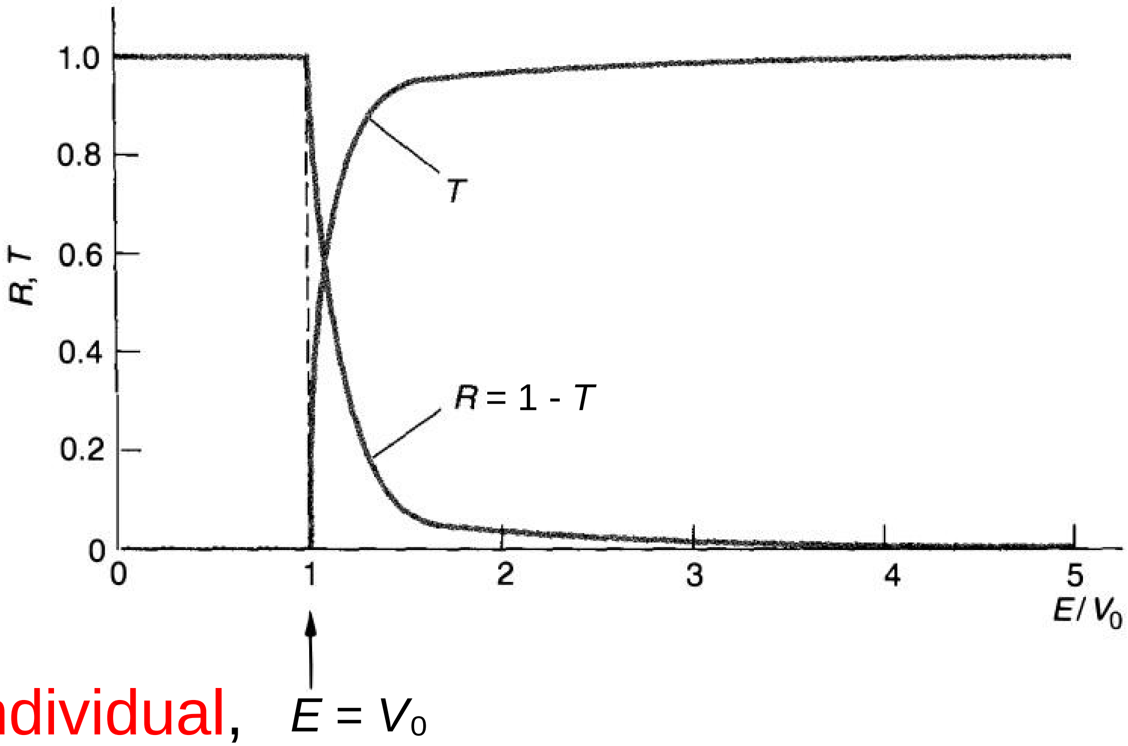
## Caso Quântico

Resumo:

$T = 0$ para $E < V_0$

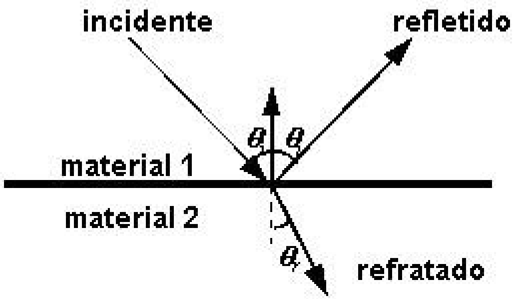
$T = 4\sqrt{1-V_0/E} \,/\, (1+\sqrt{1-V_0/E})^2$
para $E > V_0$

para $E >> V_0$, $T$ tende a 1
=> princípio de
correspondência



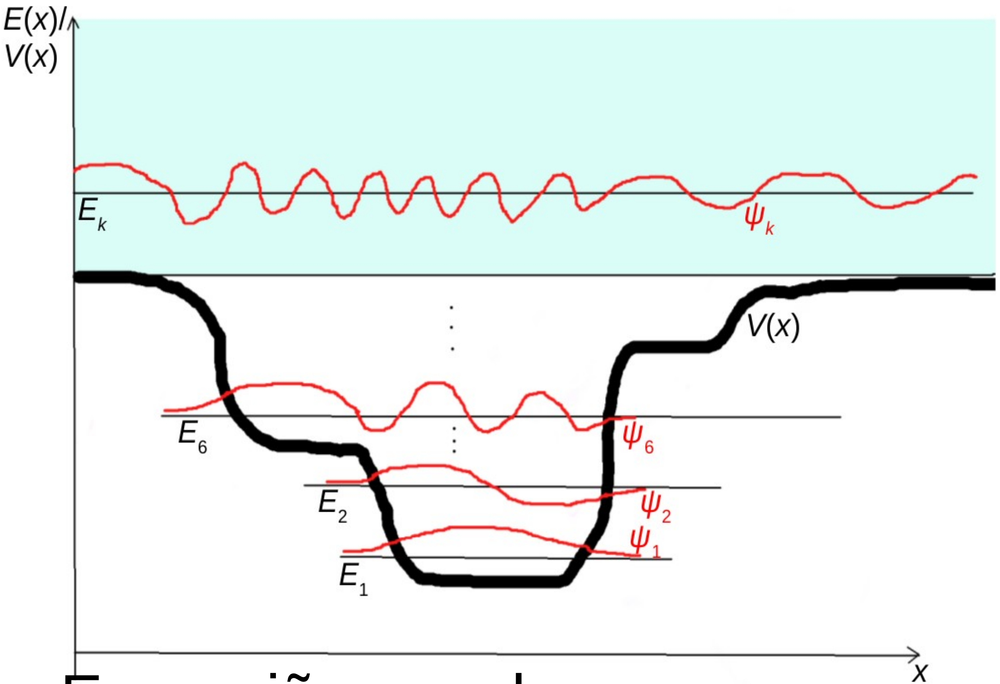

No caso de uma partícula individual, $R$ e $T$ são as probabilidades de a partícula ser refletida ou passar, respectivamente.

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



# "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

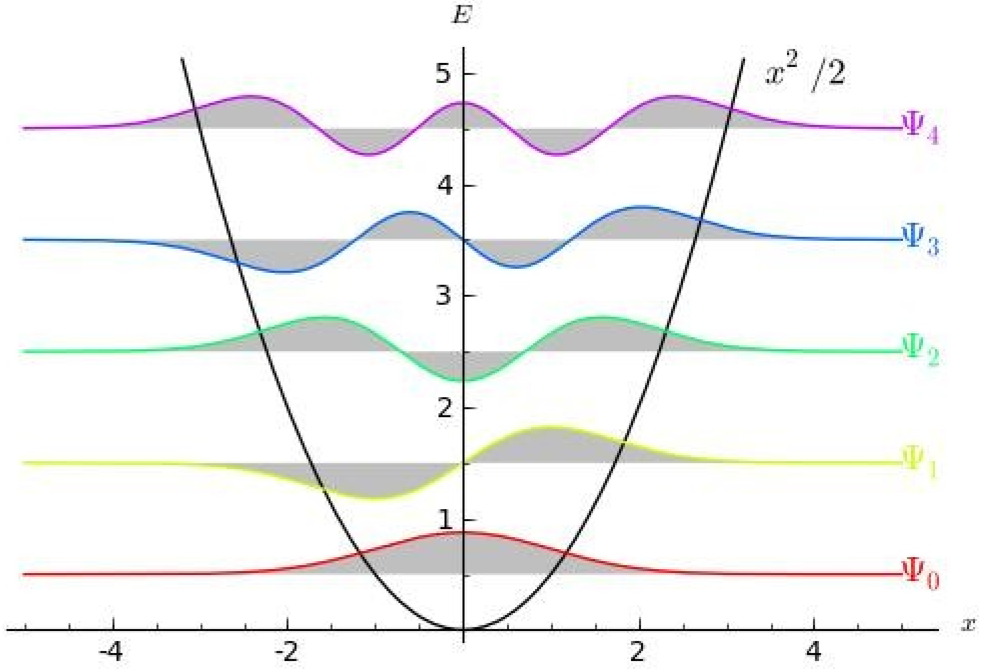
Em regiões, onde:

- $E > V(x)$ (classicamente "permitido")
  => sinal de $\psi''/\psi = 2m(V-E)/\hbar^2$ 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 $\psi''/\psi$ positivo:
  $\psi(x)$ exponencial, $e^{\pm\alpha x}$, onde $\alpha = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$
- $V(x) = \infty$: $\psi(x) = 0$

Física Quântica

# FIM PARA HOJE

Universidade Federal do ABC




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