

Instituto de Física USP

Física V - Aula 31

Professora: Mazé Bechara

Aula 31– Soluções da equação de Schroedinger para estados estacionários não ligados.

1. **Potenciais de estados não ligados: a interpretação de “partes” da função onda: “onda incidente”, “onda refletida” e “onda transmitida” na solução de um potencial não ligado. Os fluxos de incidência, reflexão e transmissão e os coeficientes de reflexão e transmissão. O caso particular das ondas planas.**
2. **Uma “barreira” de potencial. As posições e energias da partícula na Física Clássica. A probabilidade não nula de transmissão - o efeito túnel. Discussão qualitativa.**
3. **Os auto estados de energia e seus auto-valores para um potencial “degrau”.**
 - **As condições físicas que anulam as constantes da solução geral.**
 -

Conservação do fluxo de partícula a partir da equação de Schroedinger (dedução em aula)

O fluxo da partícula entre as posições x_1 e x_2 no estado $\psi(x,t)$:

$$S(x_2,t) - S(x_1,t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^*(x_2) \frac{\partial \Psi(x_2)}{\partial x} - \Psi(x_2) \frac{\partial \Psi^*(x_2)}{\partial x} \right] -$$
$$-\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^*(x_1) \frac{\partial \Psi(x_1)}{\partial x} - \Psi(x_1) \frac{\partial \Psi^*(x_1)}{\partial x} \right] = \frac{\partial P(x_1, x_2)}{\partial t}$$

- $P(x_1, x_2)$ é a probabilidade da partícula estar entre as posições x_1 e x_2 no instante t .
- Se $P(x_1, x_2)$ não variar no tempo, a conservação de fluxo será:

$$S(x_2, t) = S(x_1, t).$$

Coeficientes de reflexão e transmissão

Coeficiente de reflexão da partícula incidindo no sentido positivo de x (**Cuidado: o coeficiente de reflexão, nesta definição, é negativo. Mostre!**)

$$R = \frac{S_{refl}}{S_{inc}}$$

- Coeficiente de transmissão da partícula (**nesta definição, sempre positivo. Mostre!**)

$$T = \frac{S_{transm}}{S_{inc}}$$

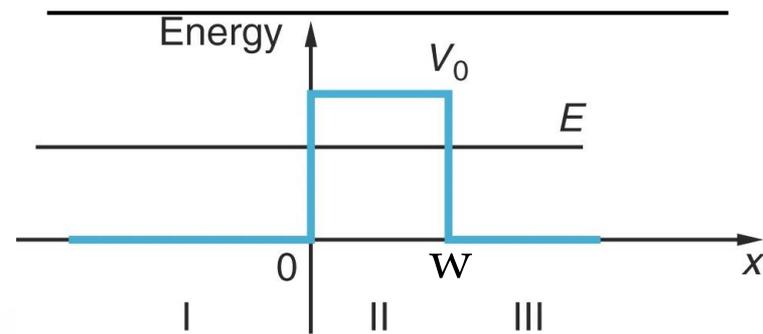
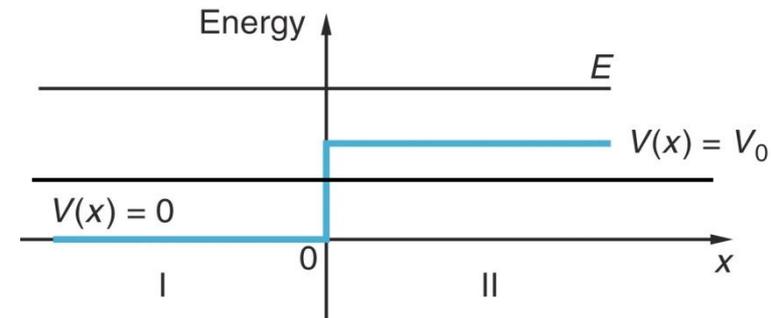
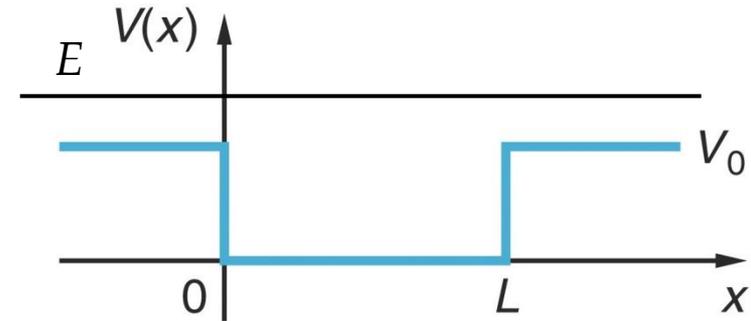
- A conservação da partícula:

$$1 + R = T$$

- **Cuidado! Alguns livros definem R e T como positivos sempre (módulo da razão dos fluxos) em cujo caso a conservação da partícula é: $R+T=1$.**

Estados não ligados – discussão qualitativa

1. No caso as partículas incidentes devem estar “longe” da origem do potencial de interação, que nos casos ao lado significa ou $x \rightarrow -\infty$ ou $x \rightarrow +\infty$.
2. Quando a partícula incidente encontra um potencial de interação pode refletir ou “continuar”.
3. Se puder ir até até o “infinito oposto da incidência”, “escapando” do potencial de interação, se tem a “transmissão” da partícula pelo potencial.
4. Nos casos não unidimensionais, estados não ligados são os espalhamentos, já que a partícula pode ir em qualquer direção.

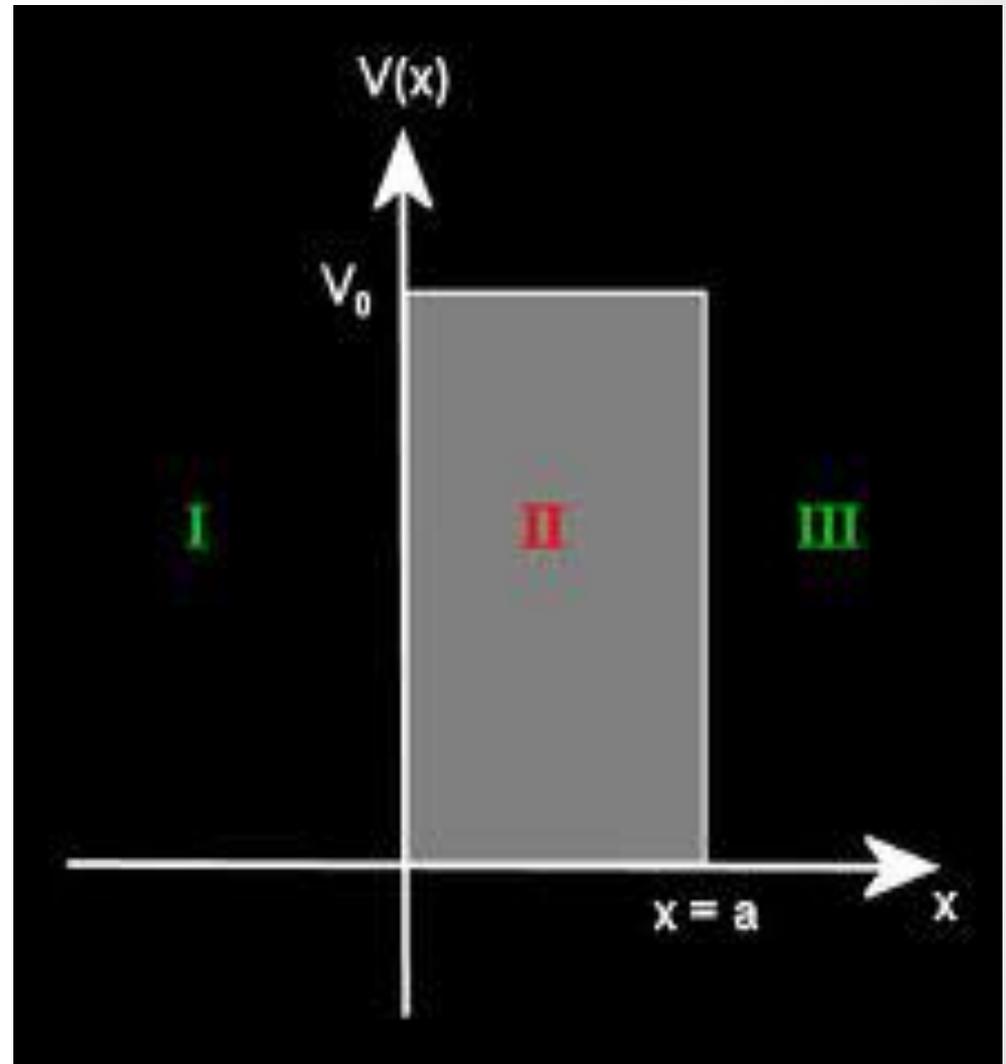


Um exemplo - Barreira de potencial

Se a partícula incidir na região I nesse região há onda refletida na barreira (em $x=0$ - classicamente permitido), e onda transmitida em III (classicamente proibido para $E < V_0$, no caso passou pela "montanha" daí o nome EFEITO TÚNEL!).

Se a partícula incidir em III, nessa região haverá onda incidente e refletida (em $x=a$ - classicamente permitido), e terá onda transmitida em I (classicamente proibido para $E < V_0$).

Para haver conservação de partícula, a probabilidade de incidência deve ser igual a probabilidade de reflexão mais a de transmissão (*probabilidade é grandeza positiva*)



Fluxo de partícula se movendo nos dois sentidos de x .

O fluxo de partícula no estado ψ_+ , ou seja incidindo no sentido positivo de x :

$$S_+ = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_+^* \frac{\partial \Psi_+}{\partial x} - \Psi_+ \frac{\partial \Psi_+^*}{\partial x} \right] = \frac{\hbar k}{m} A^* A = v A^* A$$

• O fluxo da partícula no estado ψ_- , ou seja, no sentido negativo de x :

$$S_- = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_-^* \frac{\partial \Psi_-}{\partial x} - \Psi_- \frac{\partial \Psi_-^*}{\partial x} \right] = -\frac{\hbar k}{m} B^* B = -v B^* B$$

- **Obs. (1) a segunda linha é o resultado da onda plana.**
- **(2) No caso de funções de onda reais os fluxos são nulos. (Estão incluídos aí todos os casos dos estados ligados.)**

Coeficientes de reflexão e transmissão

no caso de ondas planas

Coeficiente de reflexão da partícula incidindo no sentido positivo de x (**Cuidado: o coeficiente de reflexão, nesta definição, é negativo!**)

$$R = \frac{S_{refl}}{S_{inc}} = \frac{\hbar k A^* A}{-\hbar k B^* B} = -\frac{A^* A}{B^* B}$$

- Coeficiente de transmissão da partícula (**nesta definição, sempre positivo.**)

$$T = \frac{S_{transm}}{S_{inc}} = \frac{\hbar k A^* A}{\hbar k' C^* C} = \frac{k A^* A}{k' C^* C}$$

- **A conservação da partícula:**

$$1 + R = T$$

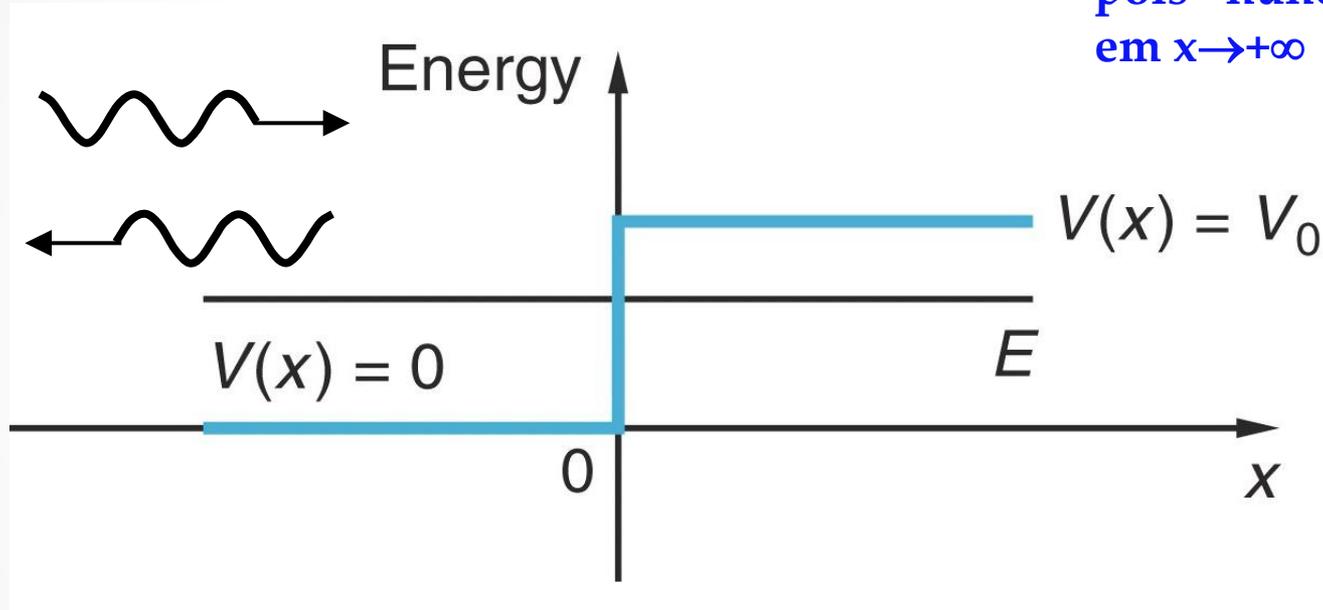
Potencial degrau em $x=a$

Física Clássica \rightarrow Quântica

- Para $T=E-V(x)>0 \rightarrow E>V(x)$ para todo x
- $0<E<V_0 \rightarrow$ Física Clássica: $x<0 \rightarrow$ trajetórias infinitas
 - Em Quântica: estados não ligados.
 - A partícula só pode incidir no sentido positivo de x , pois nunca pode estar em $+\infty$. (Neste caso a probabilidade de transmissão da partícula é nula, como demonstraremos!)
- $E>V_0 \rightarrow$ Física Clássica $-\infty<x<+\infty \rightarrow$ trajetórias infinitas
 - Em Quântica: estados não ligados.
 - A partícula pode incidir em qualquer sentido. As densidades de probabilidades expressam a probabilidade de transmissão e de reflexão da partícula na barreira, ambos não nulos e obedecendo $1+R=T$.

Cuidado!

Não tem como incidir no sentido negativo de x pois nunca pode estar em $x \rightarrow +\infty$



Solução do degrau na mecânica de Schroedinger: $E < V_0$

As funções de onda:

$$\varphi_I(x \leq 0) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(x \geq 0) = A_{II} e^{k'x} + B_{II} e^{-k'x}$$

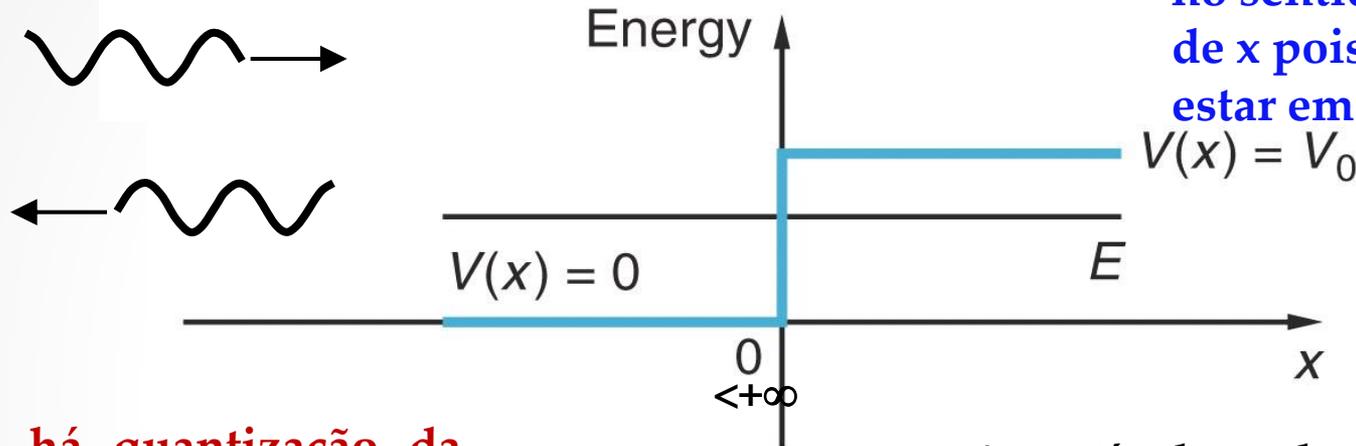
$$k'^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$$

- No instante inicial a partícula está necessariamente na região de $x < 0$. Assim O termo com A_I representa a onda incidente, e o termo com B_I a onda refletida em $x=0$!
- No entanto para $x \rightarrow +\infty$, a função de onda seria infinita, o que exige que $A_{II}=0$.
- Sendo $\varphi_{II}(x)$ uma função real, o coeficiente de transmissão é nulo! **Necessariamente o coeficiente de reflexão é 1.**

A função de onda

Cuidado!

Não tem como incidir no sentido negativo de x pois nunca pode estar em $x \rightarrow +\infty$



Não há quantização da energia

A partícula pode entrar na região classicamente proibida, mas será necessariamente refletida.

