Instituto de Física USP

Física V - Aula 36

Professora: Mazé Bechara

Aula 36– Soluções da equação de Schroedinger para auto-estados de energia não ligados.

1. **Reinterpretação da conservação da partícula**
   - O conceito de incidência, reflexão e transmissão da partícula por um potencial, quando em movimento unidimensional.
   - **Os fluxos de incidência, reflexão e transmissão da partícula e a equação da conservação da partícula.**

2. A solução dos **auto-estados de energia do potencial degrau para energias a baixo e acima do máximo do potencial.**

O fluxo de partícula

(deduzido na equação de ocontinuidade na aula passada)

- **O fluxo de partícula na posição x no instante t, a partir da equação de continuidade da densidade de probabilidade.**

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

O fluxo da partícula das ondas planas, no sentido positivo e no negativo de x

O fluxo de partícula no estado $\psi_+(x,t)=A_I e^{i(kx-wt)}$ (partícula se move no sentido positivo de x):

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

- O fluxo da partícula no estado $\psi_-(x,t)=B_I e^{-i(kx+wt)}$, ou seja, no sentido negativo de x:

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

- *Observação importante: No caso de funções de onda reais os fluxos são nulos. Estão incluídos aí todos os casos dos estados ligados unidimensionais.*

Estados não ligados – discussão qualitativa

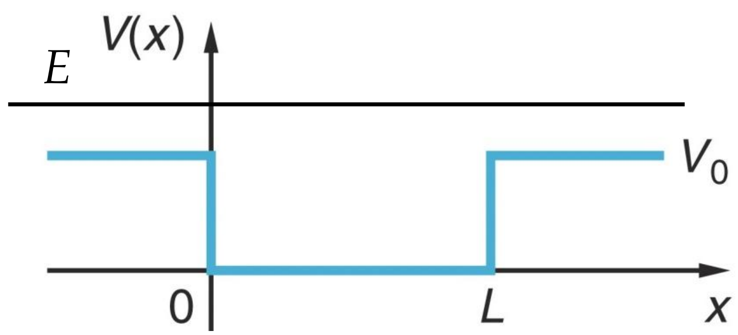
- **Casos unidimensionais:**

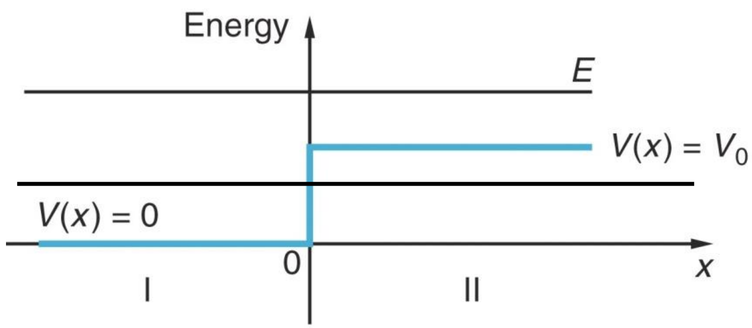
1. **No caso a partícula incidente deve estar "longe" da origem do potencial de interação, que pode ser ou $x \to -\infty$, ou $x \to +\infty$.**

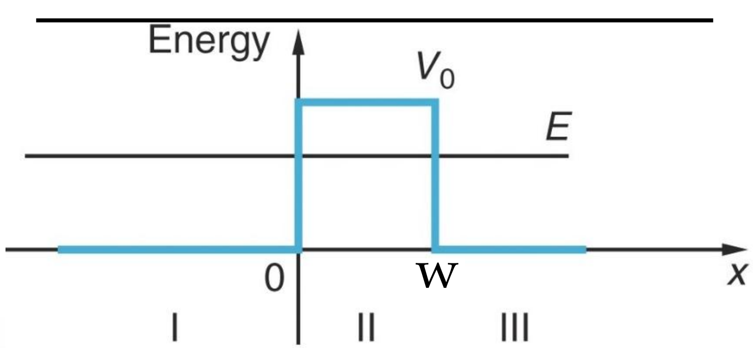
2. **Quando a partícula incidente encontra uma variação no potencial de interação pode tanto "refletir" , voltar no sentido oposto, como "transmitir", ir no mesmo sentido.**

3. **Independentemente do que há "no entorno na origem" do potencial, se a partícula puder "passar" até o infinito oposto ao da incidência, "escapando" assim do potencial de interação, tem-se a transmissão da partícula .**

- **Nos casos não unidimensionais, os estados não ligados são "de espalhamento", já que a partícula pode ir em qualquer direção, diferentemente do unidimensional, que só tem reflexão ou transimissão.**







Fluxo de partícula – reinterpretando a conservação da partícula (normalização).

O fluxo de partícula incidente, com função de onda ψ_{inc} é dado por (demonstração da expressão do fluxo em aula):

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

$$\psi_{inc} = \psi(+\infty, t) ou$$

$$\psi_{inc} = \psi(-\infty, t)$$

- Analogamente, o fluxo da partícula refletida ψ_{refl} , será respectivamente:

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

- Para identificar a onda refletida, é preciso ter em mente que ela está na mesma região assintótica (infinitamente longe da origem) que a incidente, mas se movendo em sentido oposto ao da onda incidente.
- *Pode ser, como nos casos dos potenciais da transparência anterior, que haja uma grande região com a mesma função de onda que em $x \to \infty$.*

Fluxo de partícula – reinterpretando a conservação da partícula (normalização).

O fluxo de partícula transmitida, com função de onda ψ_{trans} é dado por:

$$S_{trans} = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi_{inc}^{*}\frac{\partial\psi_{inc}}{\partial x} - \psi_{inc}\frac{\partial\psi_{inc}^{*}}{\partial x}\right]$$

$$se\,\psi_{inc} = \psi(+\infty, t) \Rightarrow \psi_{trans} = \psi(-\infty, t)$$

$$se\,\psi_{inc} = \psi(-\infty, t) \Rightarrow \psi_{trans} = \psi(+\infty, t)$$

- A conservação do fluxo:

$$S_{inc} + S_{refl} = S_{trans}$$

- Como a onda incidente tem sentido oposto ao da onda refletida, o fluxo refletido tem sinal oposto ao do incidente.
- Assim, vale a relação:

$$\frac{S_{inc}}{S_{inc}} + \frac{S_{refl}}{S_{inc}} = \frac{S_{trans}}{S_{inc}} \Rightarrow$$

$$1 + \frac{S_{refl}}{S_{inc}} = \frac{S_{trans}}{S_{inc}}$$

Coeficientes de reflexão e transmissão

Definição de coeficiente de reflexão:

$$R = -\frac{S_{refl}}{S_{inc}} > 0$$

- **Definição de coeficiente de transmissão:**

$$T = \frac{S_{transm}}{S_{inc}} > 0$$

- **A conservação da partícula:**

$$1 = \frac{S_{inc}}{S_{inc}} = -\frac{S_{refl}}{S_{inc}} + \frac{S_{trans}}{S_{inc}}$$

$$1 = R + T$$

Coeficientes de reflexão e transmissão de ondas planas

- Coeficiente de reflexão da partícula (sempre o sentido da reflexão é oposto ao da incidência):

$$R = -\frac{S_{refl}}{S_{inc}} = -\frac{-\hbar k B_I^* B_I}{\hbar k A_I^* A_I} = \frac{B_I^* B_I}{A_I^* A_I}$$

- Coeficiente de transmissão da partícula (sempre o sentido da transmissão é o mesma da incidência):

$$T = \frac{S_{transm}}{S_{inc}} = \frac{\hbar k' A_{II}^* A_{II}}{\hbar k A_I^* A_I} = \frac{k' A_{II}^* A_{II}}{k A_I^* A_I}$$

- A conservação da partícula em termos dos coeficientes de reflexão e transmissão:

$$1 = T + R$$

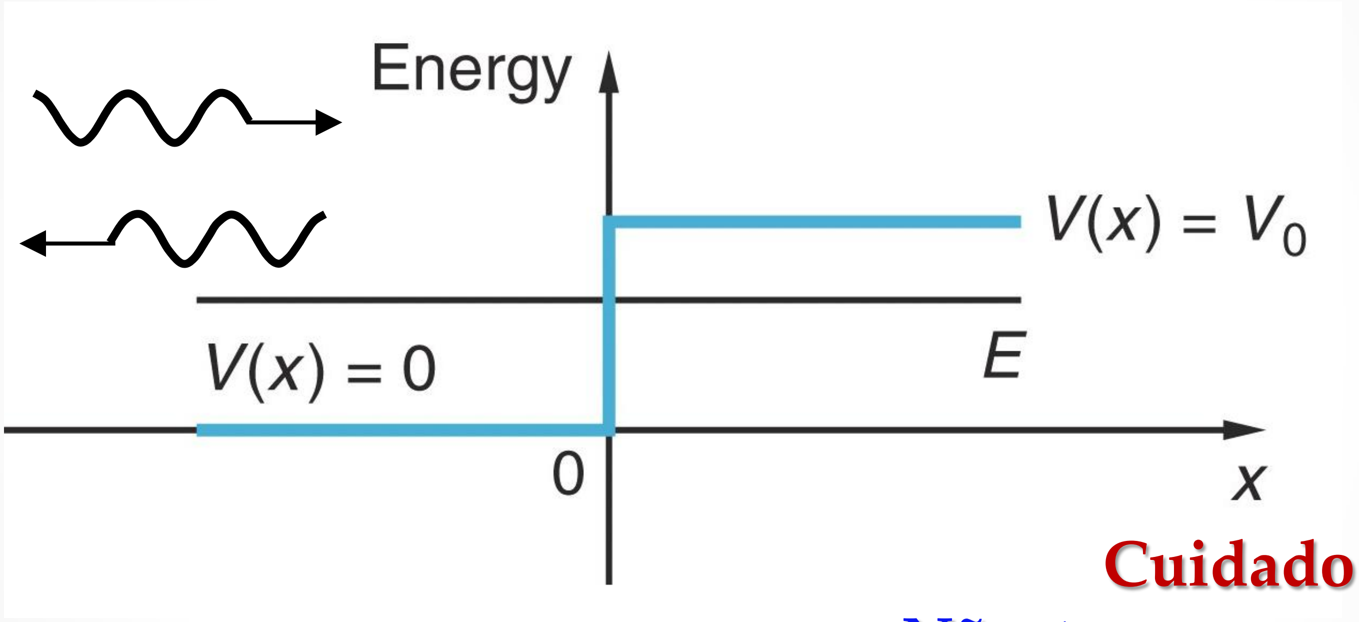
Potencial degrau em $x=0$
Física Clássica $\rightarrow$ Quântica

- Para $T = E - V(x) > 0 \rightarrow E > V(x)$ para todo x
- $0 < E < V_o \rightarrow$ 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 formalmente!)*
- $E>V_o \rightarrow$ 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 $1=T+R$.

Potencial degrau em x=0

$0 < E < V_o$



Cuidado!

Não tem como incidir no sentido negativo de x, pois classicamente a partícula não pode estar em $x \to +\infty$.

Solução do degrau na mecânica de Schroedinger: E<Vo

As soluções gerais das auto- funções de onda:

$$\varphi_I(x \le 0) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(x \ge 0) = A_{II} e^{k'x} + B_{II} e^{-k'x} \qquad k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

- **Como as funções de onda são obrigatoriamente finitas, e para x → +∞, a função de onda seria infinita, se exige que A_{II}=0.**

Solução do degrau na mecânica de Schroedinger: E<Vo

As funções de onda:

$$\varphi_I(x \leq 0) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(x \geq 0) = B_{II} e^{-k'x} \qquad k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

- **No instante inicial a partícula está necessariamente em x → +∞, e a função de onda aí é como em toda a região de x<0.**

Já na região II, a função de onda é real,

- **⇒ S_{transm} = 0 ⇒ T = 0**
- **Colocando as condições físicas de continuidade:**

$$\varphi_I(x=0) = \varphi_{II}(x=0) \qquad \varphi'_I(x=0) = \varphi'_{II}(x=0)$$

- **Resulta:**

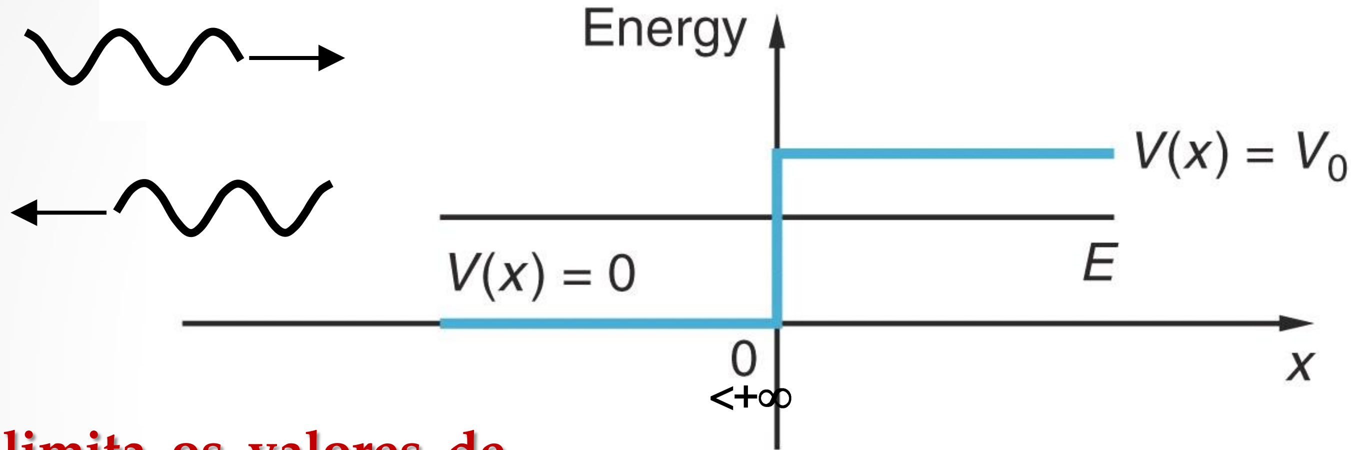
$$B_I = -A_I \frac{1 + i\frac{k}{k'}}{1 - i\frac{k}{k'}} \qquad B_{II} = \frac{2A_I}{1 + i\frac{k'}{k}}$$

A função de onda do potencial degrau

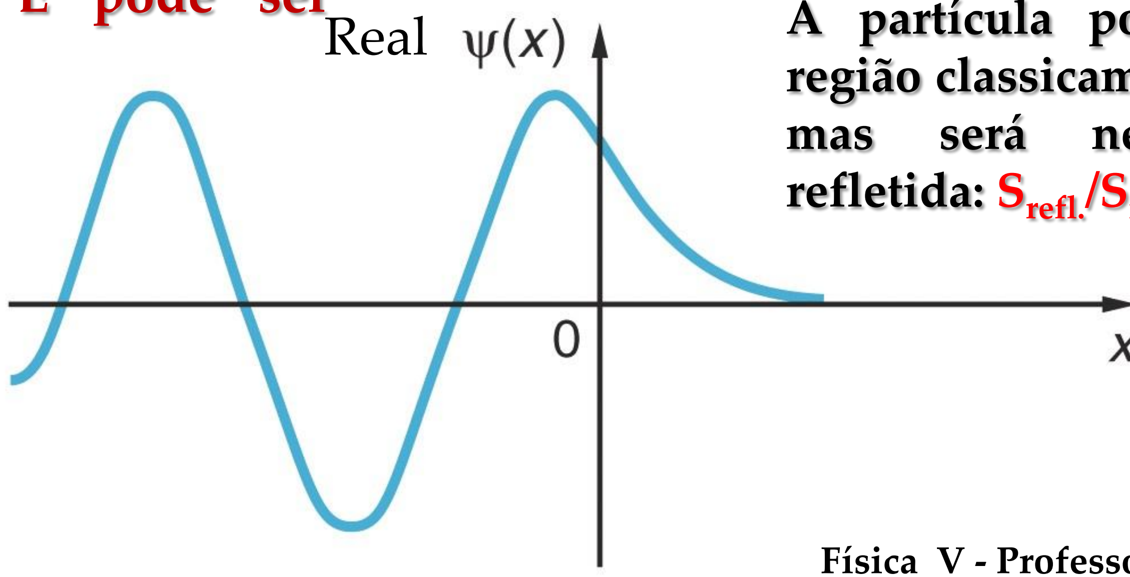
$0 < E < V_o$

Cuidado!

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



Nada limita os valores de k, ou seja, E pode ser qualquer.



A partícula pode entrar na região classicamente proibida, mas será necessariamente refletida: $S_{refl.}/S_{inc}=1$.

Solução do degrau na mecânica de Schroedinger: 0<E<Vo

As funções de onda:

$$\varphi_I(x \leq 0) = A_I e^{ikx} + B_I = -A_I \frac{1+i\dfrac{k}{k'}}{1-i\dfrac{k}{k'}} e^{-ikx}$$

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

$$\varphi_{II}(x \geq 0) = \frac{2A_I}{1+i\dfrac{k'}{k}} e^{-k'x}$$

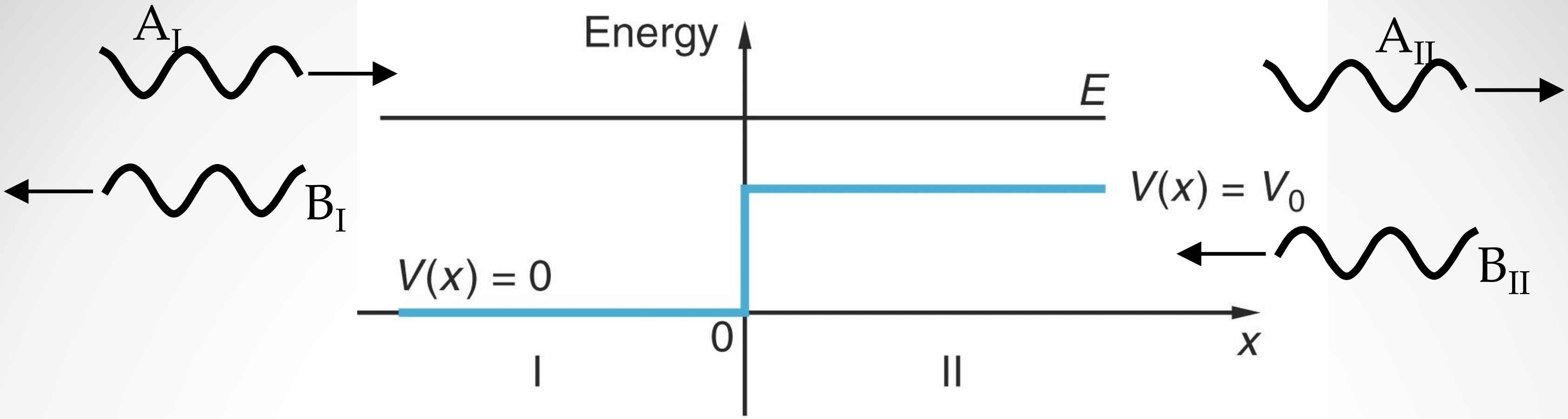
$$k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

$\Rightarrow$ **T = 0 e R = 1**

O potencial degrau: a interação de um elétron de condução - valores numéricos

- V_o = 2,0eV (função trabalho de metal) $\Rightarrow \left|B_{II}\right|^2 = 0{,}40$
- Valores para $E=0{,}1V_o$

$x\ (10^{-10}m)$	$-2k'a$	$\left\|\psi_{II}(x,t)\right\|^2$
0	0	0,40
0,1	0,137	0,349
1,0	1,374	0,101
2,0	2,748	0,026
5,0	6,869	0,001
10,0	13,74	~0



Região I:

$$\frac{d^2\varphi_I(x)}{dx^2} = -\underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k^2}\varphi_I(x)$$

Região II:

$$\frac{d^2\varphi_{II}(x)}{dx^2} = -\underbrace{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}_{k'^2}\varphi_{II}(x)$$

$$\varphi_I(x) = \underbrace{A_I \exp(ikx)}_{\text{Onda no sentido positivo de x}} + \underbrace{B_I \exp(-ikx)}_{\text{Onda no sentido negativo de x}}$$

$$\varphi_{II}(x) = \underbrace{A_{II} \exp(ik'x)}_{\text{Onda no sentido positivo de x}} + \underbrace{B_{II} \exp(-ik'x)}_{\text{Onda no sentido negativo de x}}$$

Possibilidades para E>V$_o$

a) **Podemos ter o termo com A$_I$ como onda incidente (no sentido de x positivo), então o termo com B$_I$ é da onda refletida, e o termo com A$_{II}$ é o da onda transmitida, B$_{II}$=0 (não tem onde refletir na região com V=cte!).**

b) **Para o termo com B$_{II}$ como o da onda incidente (no sentido de x negativo), o termo com A$_{II}$ é da onda refletida, e com B$_I$ o da onda transmitida, A$_I$ = 0 (não tem como refletir na região de V=cte).**

Solução do degrau na mecânica de Schroedinger: E >Vo (em aula)

Colocando as condições físicas de continuidade na função de onda e na sua derivada em x. De novo: três constantes e duas equações físicas (Sugestão: REFAÇA incidindo pelo lado contrário):

$$\varphi_I(x=0)=\varphi_{II}(x=0) \qquad \varphi'_I(x=0)=\varphi'_{II}(x=0)$$

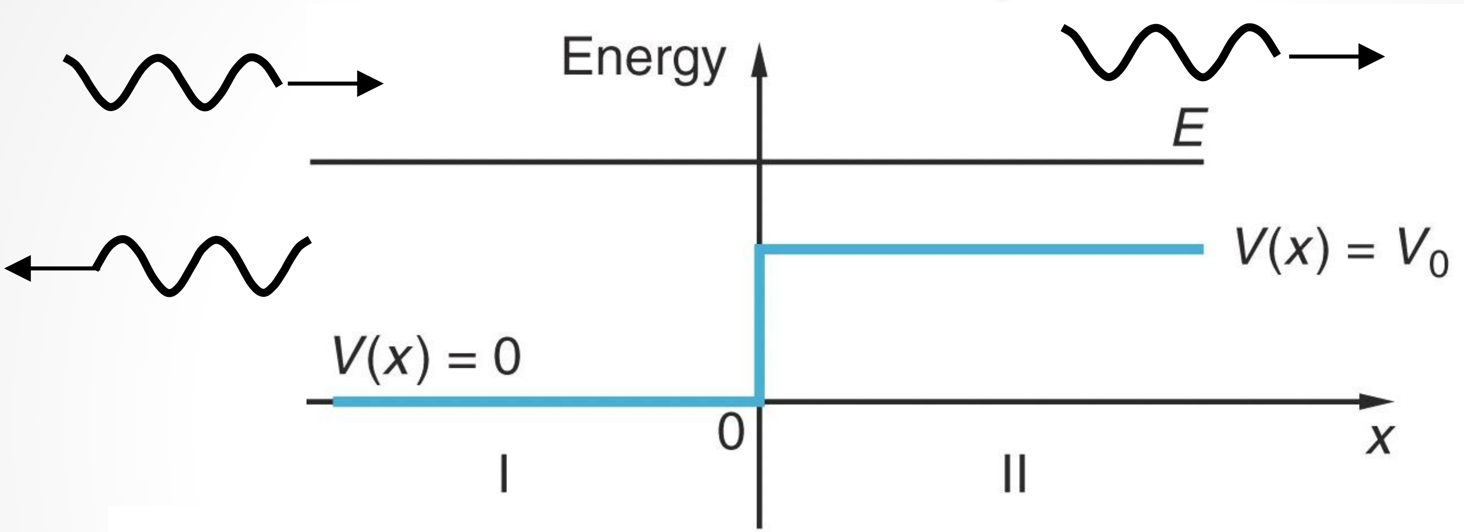
- Chega-se nos valores para as constantes em termos de uma delas (a constante do termo de incidência):

$$B_I = A_I \frac{\frac{k}{k'}-1}{1+\frac{k}{k'}} \qquad A_{II} = A_I[\frac{2k/k'}{1+k/k'}]$$

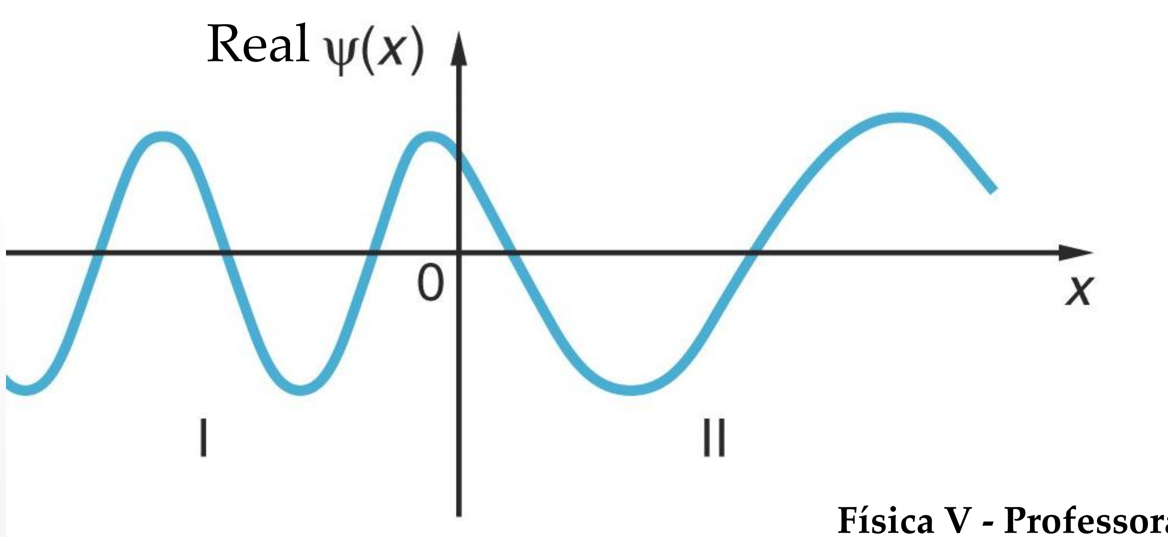
- Donde resultou:

$$R=\frac{(k/k'-1)^2}{(1+k/k')^2} \qquad T=\frac{4k/k'}{(1+k/k')^2}$$

Função de onda da partícula incidindo no sentido positivo de x



O fato de k > k´, faz valer λ < λ´.



A densidade de probabilidade para E > Vo e incidência no sentido de x positivo.

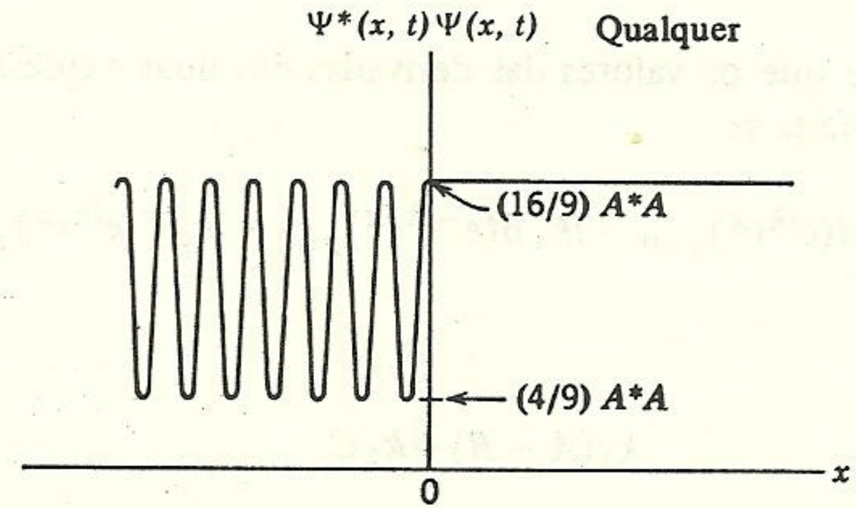


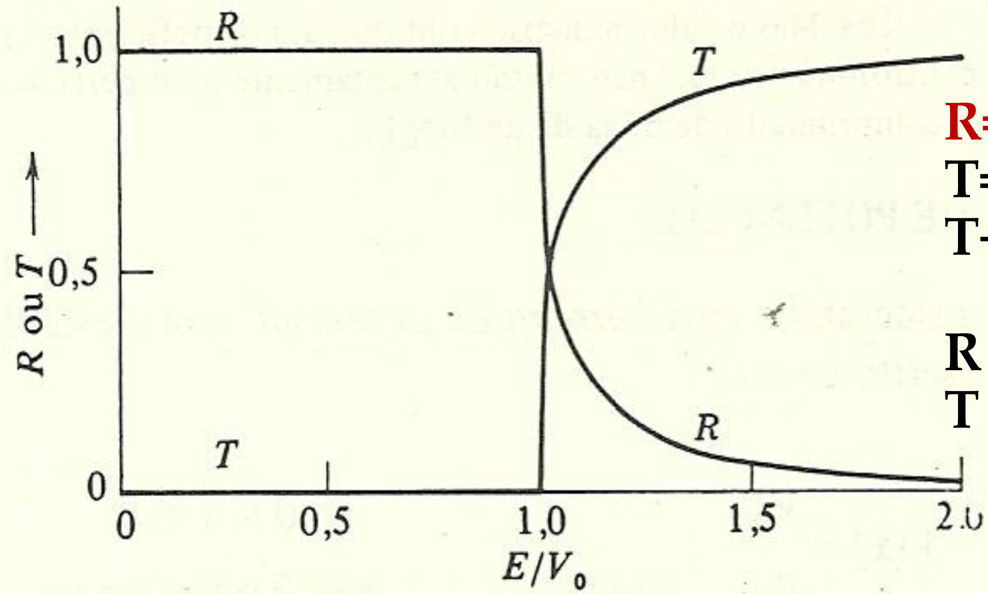
FIGURA 6-10. A densidade de probabilidade $\Psi^*\Psi$ para a autofunção de (6-39), quando $k_1 = 2k_2$.

Figura para k=2k´ - só neste caso a probabilidade da função de onda em II é igual ao máximo da oscilação na região I. CONFIRA!

Física Quântica – Eisberg

Os coeficientes de reflexão e transmissão em função da relação E/V_o – demonstração em aula

Na figura k_1 é o k e k_2 é o k´ das transparências anteriores.



$E<V_o$

$R=1$

$T=0$

$T+R=1$

$E>V_o$

$R = (k/k -1)^2/(1+k/k\ )^2$

$T = 4k/k\ /(1+k/k\ )^2$

FIGURA 6-11. Os coeficientes de reflexão e transmissão R e T para uma partícula incidente sobre um potencial degrau. A abscissa E/V_0 é a razão entre a energia total da partícula e o aumento em sua energia de potencial no degrau. O caso $k_1 = 2k_2$, ilustrado na figura 6-10, corresponde a $E/V_0 = 1,33$.