Aula 13 - Equação de Schrödinger:

A equação de Schrödinger não pode ser demonstrada sendo considerada uma lei natural. Ela rege o comportamento das ondas de matéria sendo dada na sua forma unidimensional e independente do tempo por:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi+\frac{8\pi^2 m}{h^2}[E-U(x)]\psi=0 \qquad (1)$$

Esta equação pode ser apresentada em outra forma, reescrevendo a diferença entre a energia mecânica e a energia potencial como sendo a energia cinética e por fim reescrever esta última em termos da momento linear vinculando-o ao comprimento de onda de de Broglie, conforme a seguir demonstrado:

$$E-U=\frac{1}{2}mv^2=\frac{p^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2$$

Substituindo na equação 1 termos:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi+k^2\psi=0 \qquad (2)$$

com o número de onda ($2\pi/\lambda$) dado por:

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

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

A solução geral da equação 2 é dada por: $$\boxed{\psi(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}} \qquad (3)$$

onde A e B são constantes a serem determinadas.

Multiplicando a função de onda espacial, dada pela equação 3, pelo termo harmônico temporal $e^{-i\omega t}$ a equação obtida fornecerá ondas progressivas à direita (primeiro termo, e a esquerda, segundo termo).

É importante notar que a solução apresentada na equação 3 **só é valida se o número de onda for independente da posição x**, que está no escopo do nosso curso, nos casos especiais onde a energia potencial $U(x)$ é constante.

Vamos começar com o caso da **partícula livre: $U(x)$ = zero** (v = constante),

$$E = K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 \qquad \text{e} \qquad k = \frac{2\pi\sqrt{2mE}}{h} = \frac{2\pi\, p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

Considerando que a partícula está se movendo no sentido crescente do eixo dos x, só terá sentido a onda que se progressiva à direita (B=0). Neste caso a densidade de probabilidade terá o seguinte resultado:

$$|\psi(x)|^2 = |A\,e^{ikx}|^2 = A^2 |e^{ikx}|^2 = A^2 (e^{ikx})(e^{-ikx}) = A^2$$

Qual o significado deste resultado? Mais especificamente, o que significa a densidade de probabilidade ser constante para uma partícula livre?

Resposta: Que a partícula pode ser encontrada em qualquer lugar. Em outras palavras, a **posição da partícula está completamente indeterminada**!!!!!!!!!!!!!!!

Princípio de Incerteza de Heisemberg.

A natureza probabilística da física quântica impões uma importante limitação à medida da posição e do momento de uma partícula: "*Não é possível medir simultaneamente a posição e o momento linear de uma partícula com precisão ilimitada*".

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

Em termos matemático o princípio de incerteza de Heisemberg pode ser expresso por:

$$\Delta x \ \ \Delta p_x \geq \hbar = h/(2\pi)$$

Como vai ficando claro aos pouco, o valor da constante de Planck h está ligado a um valor de energia em que não é mais possível usar a física clássica para descrever esses sistemas microscópicos. O limiar de energia na transição de energia de um estado para outro é da ordem de hf, *Portanto* $\Delta E \geq hf$.

Para o átomo de Bohr $L = n\, h/2\pi$. O limite mínimo de variação de energia impõe por exemplo que $\Delta\, n = 1$ e portanto $\Delta L = \ h/2\pi$:

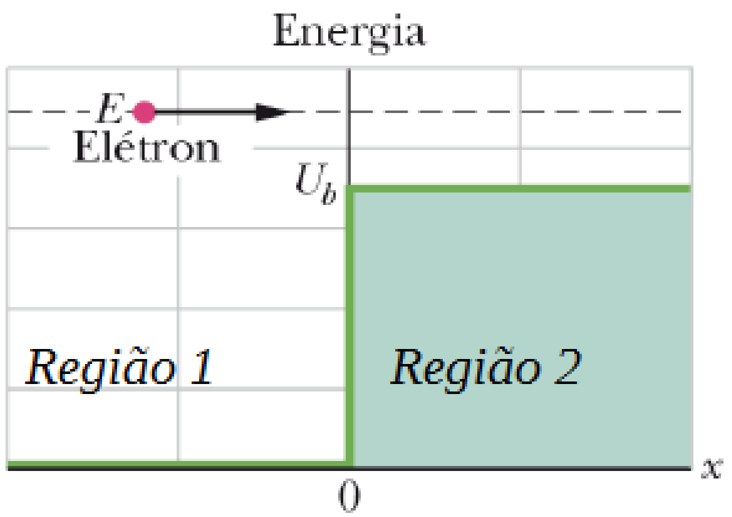
Pode ser que tais pensamentos estivessem na cabeça de Heisemberg no construção de seu princípio de incerteza. Por certo, este princípio está ligado transição mínima de energia que um sistema microscópico pode realizar!!!

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

Vamos considerar agora um segundo caso onde o potencial é constante e diferente de zero. Vamos dividir o espaço em duas regiões, uma a esquerda onde o potencial é identicamente nulo e noutra , a direita, onde o potencial é negativo, portanto repulsor de elétrons. Vamos considerar ainda que nosso elétron se mova para a direita e encontre esta região onde há este potencial repulsor.

O que acontece com este elétron quando chegar a barreira de potencial?

Isto vai depender da energia dele. A resposta mais precisa pode ser encontrada resolvendo-se a equação de Schrödinger. Vamos admitir então que a energia E seja maior que U_b



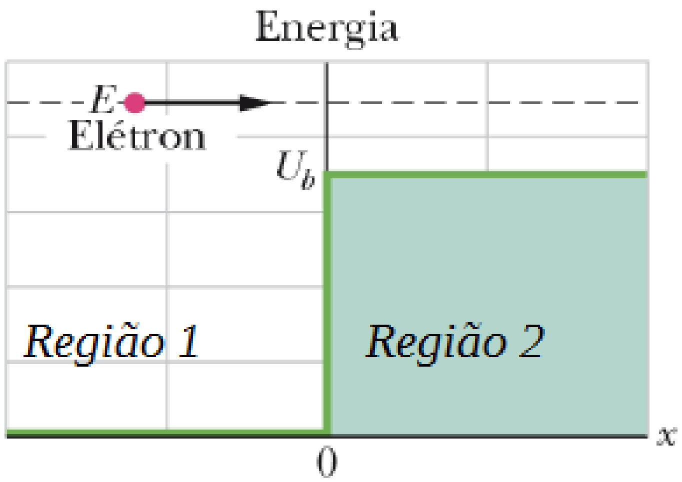
Como vimos, a solução para região 1 pode ser escrita como:

$$\psi_1(x) = A\,e^{ik_1 x} + B\,e^{-ik_1 x} \quad \text{e} \quad k_1 = \frac{2\pi\sqrt{2mE}}{h}$$

Porque devemos manter, desta vez, B ≠ 0?

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

Resp. Devemos manter o termo B para possibilitarmos que o elétron seja refletido pela barreira.



Para a região 2 podemos usar a solução geral, obviamente com coeficientes constantes mas diferentes dos da primeira região, e com novo numero de onda. Em termos específicos:

$$\psi_2(x) = C\,e^{ik_2x} + D\,e^{-ik_2x} \quad \text{e} \quad k_2 = \frac{2\pi\sqrt{2m(E-U_b)}}{h}$$

É de fato necessário considerar os dois coeficientes, C e D?

Resposta: Na verdade não. Podemos fazer D identicamente nula, e desta forma não admitir, na região 2, ondas progressivas para esquerda.

Para soluções “bem comportadas” a continuidade tanto da função quanto de sua derivada devem ser imposta o que nos traz as seguintes relações:

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

$A + B = C$ (igualando o valor das soluções em $x = 0$ e
$Ak_1 - B\,k_1 = C\,k_2$ (igualando o valor da derivada em $x = 0$.

O objetivo é o de calcular a fração dos elétrons que é refletida pela barreira de potencial. Como a densidade de probabilidade é proporcional ao quadrado do módulo da função de onda. Pode-se definir o coeficiente de reflexão, R, e o de transmissão T, respectivamente como:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \qquad \text{e} \qquad T = 1 - R$$

Teste: Se R = 0,010 e 10 000 elétrons incidem na barreira, quantos elétrons serão refletidos?

Resposta: 100

E se a energia dos elétrons incidentes sobre as barreira for menor que a energia da barreira, o que acontece?

Resposta: Do ponto de vista clássico (“senso comum!”), 100% serão refletidos. Da mesma forma que esperaríamos que no caso anterior, E>U_b, 100% deveriam passar!

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

EXERCÍCIO

1- Detalhe o trabalho analítico para se resolver a equação de Schrödinger para o caso anteriormente visto, ou seja, com o potêncial valendo $U(x)$ = zero para $x<0$ e $U(x) = Ub$ para $x>0$.

2- Mostre a partir da coeficiente de reflexão R e da relação R+T =1, que o coeficiente de transmissão T pode ser escrita como:

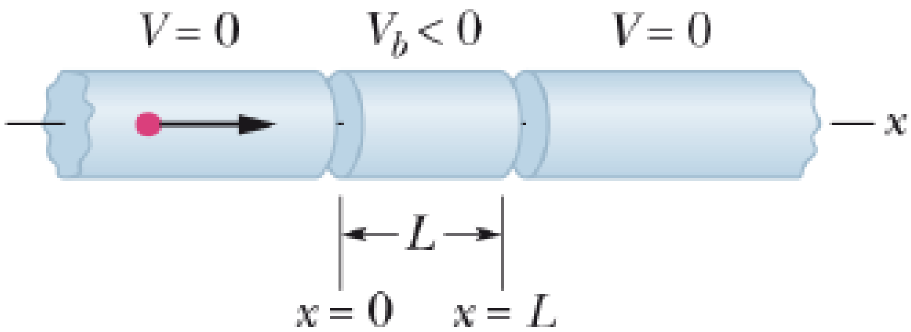
$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{C^2}{A^2}$$

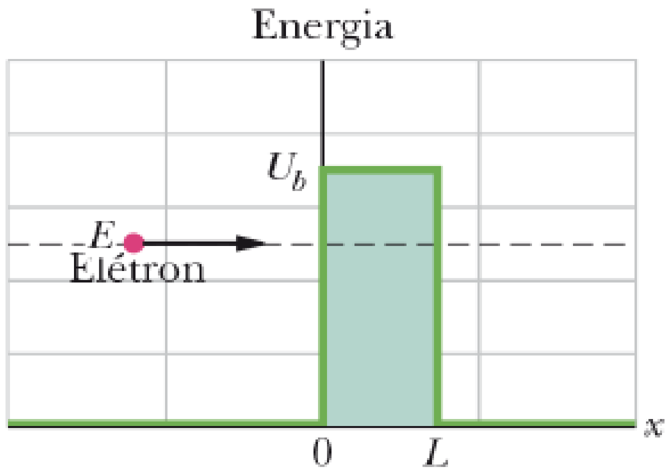
3 – Encontre o valor dos coeficientes de transmissão e reflexão para energia mecânica do elétron incidente de 10 eV e energia da barreira de 8,0 eV.

4- O que significa os números encontrados no item anterior?

Aula 13 - Equação de Schrödinger:

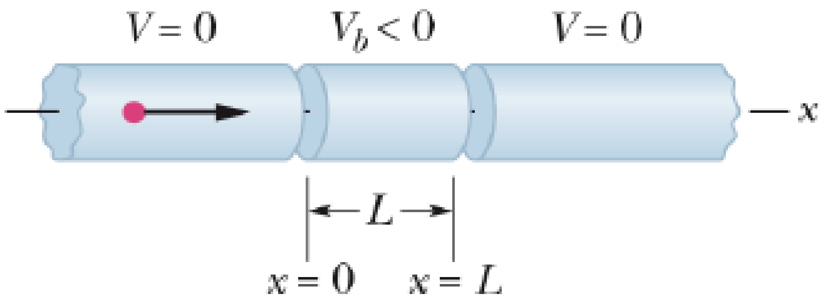
A pergunta anterior, do ponto de vista quântico pode ser obtida da análise da solução da equação de Schrödinger para, por exemplo, elétrons submetidos a potenciais elétricos na V(x) = 0 x<0 ; V(x) = Vb , 0<x<L e V(x) > L

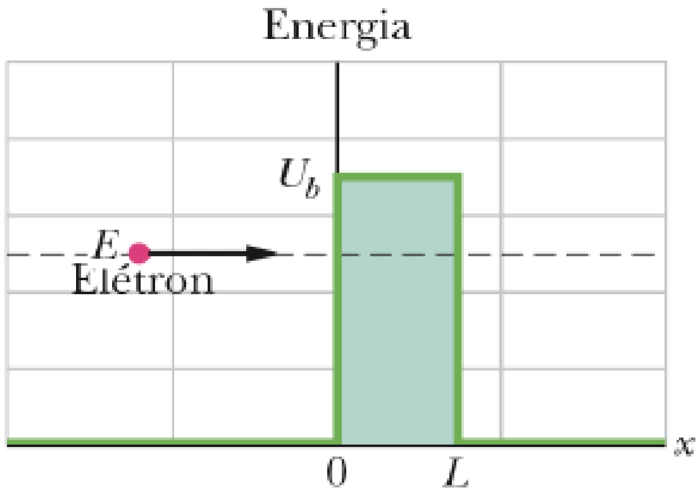




Quanticamente existe possibilidade o elétron penetrar na barreira. Dentro da barreira, na condição em que U_b >E, o número de onda será imaginário, o que tornará a função de onda não oscilatória e sim uma exponencial decrescente. Se a largura da barreira L não for grande o suficiente, o amplitude mesma poderá ser diferente de zero na interface x=L, e desta forma poder o elétron atingir a região em que x>L.

Aula 13 - Equação de Schrödinger:





O coeficiente de transmissão neste caso é dado por:

$$T \approx e^{-2bL} \; com \; b = \sqrt{\frac{8\pi m(U_b - E)}{h^2}}$$