38.7 A Equação de Schrödinger

A grandeza associada a uma onda de matéria é chamada de **função de onda** e é presentada por $\Psi(x, y, z, t)$. Em todas as situações discutidas nesse livro, as variáveis espaciais e a variável temporal podem ser separadas e a função de onda (complexa) pode ser escrita na forma

$$i = \sqrt{-1}$$

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-i\omega t}, \qquad (38.14)$$

onde $\omega(= 2\pi f)$ é a frequência angular da onda de matéria.

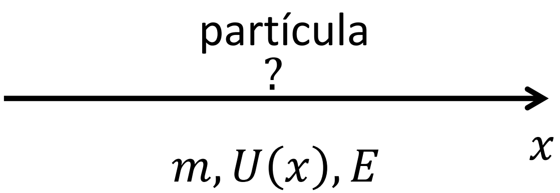
O que significa a **função de onda**? Suponha que uma onda de matéria chegue a uma região do espaço que contém um detector de pequenas dimensões. A probabilidade de que o detector indique a presença de uma partícula em um intervalo de tempo especificado é proporcional a $|\psi(x_0, y_0, z_0)|^2$, onde $|\psi(x_0, y_0, z_0)|$ é o valor absoluto da função de onda na posição (x_0, y_0, z_0) do detector.

A grandeza $|\psi(x, y, z)|^2$ é chamada **densidade de probabilidade**.

- A probabilidade (por unidade de tempo) de que uma partícula seja detectada em um pequeno volume com o centro em um ponto (x_0, y_0, z_0) é proporcional ao valor de $|\psi(x_0, y_0, z_0)|^2$ nesse ponto.

Como determinar a função de onda? As ondas sonoras e as ondas em cordas obedecem às equações da **mecânica newtoniana**. As ondas luminosas obedecem às **equações de Maxwell**. As ondas de matéria obedecem à **equação de Schrödinger**.

Muitas das situações que vamos discutir envolvem o movimento de uma partícula ao longo do eixo x em uma região na qual a força a que a partícula está sujeita faz com que a partícula possua uma energia potencial $U(x)$. Nesse caso, a equação de Schrödinger se reduz a



E é a energia mecânica total da partícula

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}[E - U(x)]\psi = 0. \quad (38.15)$$

Se $U(x) = 0$, a equação (38.15) descreve uma **partícula livre**, isto é, uma partícula que não está sujeita a nenhuma força. Nesse caso, $E = K + 0 = \frac{1}{2}mv^2$. A equação de Schrödinger se torna

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left[\frac{1}{2}mv^2\right]\psi = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(2\pi\frac{p}{h}\right)^2\psi = 0.$$

Usando o conceito de **comprimento de onda de de Broglie** ($\lambda = h/p$) e a definição de **número de onda angular** ($k = 2\pi/\lambda$), a equação de Schrödinger pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \quad (38.16)$$

A solução mais geral da equação (38.16) é

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (38.17)$$

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-i\omega t} \quad (38.14) \qquad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (38.17)$$

Combinando as equações (38.14) e (38.17), obtemos, para uma função de onda que se propaga ao longo do eixo x,

$$\Psi(x,t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-i\omega t} \Rightarrow \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}. \quad (38.18)$$

Determinação da Densidade de Probabilidade $|\psi(x)|^2$

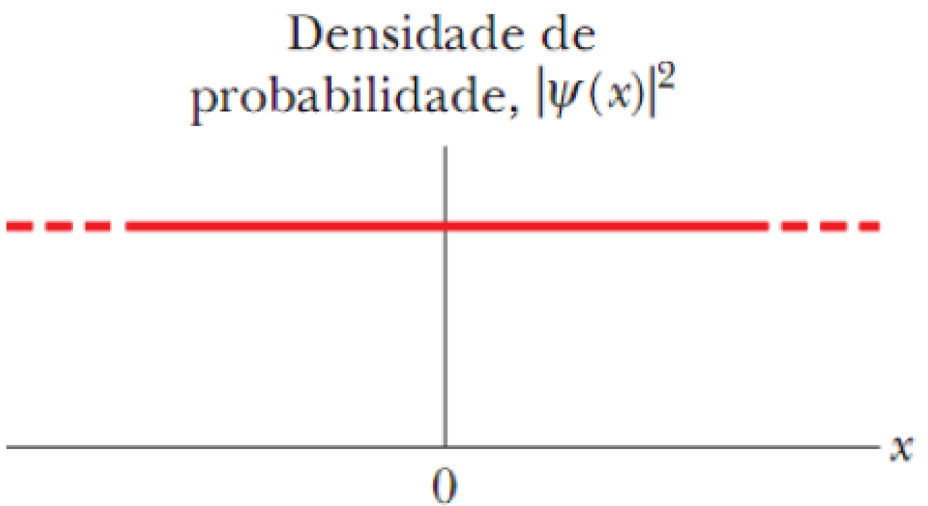
No caso em que a partícula livre se move no sentido positivo do eixo x, fazemos $B = 0$ e $A \equiv \psi_0$ na equação (38.17) e ficamos com

$$\psi(x) = \psi_0 e^{ikx}. \quad (38.19)$$

$$\Rightarrow |\psi(x)|^2 = \left|\psi_0 e^{ikx}\right|^2 = \psi_0^2(e^{ikx})\left(e^{ikx}\right)^* = \psi_0^2 e^{ikx}e^{-ikx} = \psi_0^2 e^{ikx-ikx} = \psi_0^2$$

$$\Rightarrow |\psi(x)|^2 = \psi_0^2$$

Na figura ao lado, temos o gráfico da densidade de probabilidade $|\psi(x)|^2$ para uma partícula livre se deslocando no sentido positivo do eixo x. Como $|\psi(x)|^2$ tem o mesmo valor para qualquer valor de x, a partícula pode ser detectada com a mesma probabilidade em qualquer ponto sobre o eixo x.



38.8 O Princípio de Indeterminação de Heisenberg

A impossibilidade de prever a posição de uma partícula livre (que possui o momento linear bem definido) foi nosso primeiro exemplo do **princípio de indeterminação de Heisenberg**.

De acordo com o **princípio de indeterminação de Heisenberg**, não é possível medir simultaneamente a posição $\vec{r}$ e o momento linear $\vec{p}$ de uma partícula com precisão ilimitada. Matematicamente, tal princípio pode ser representado por

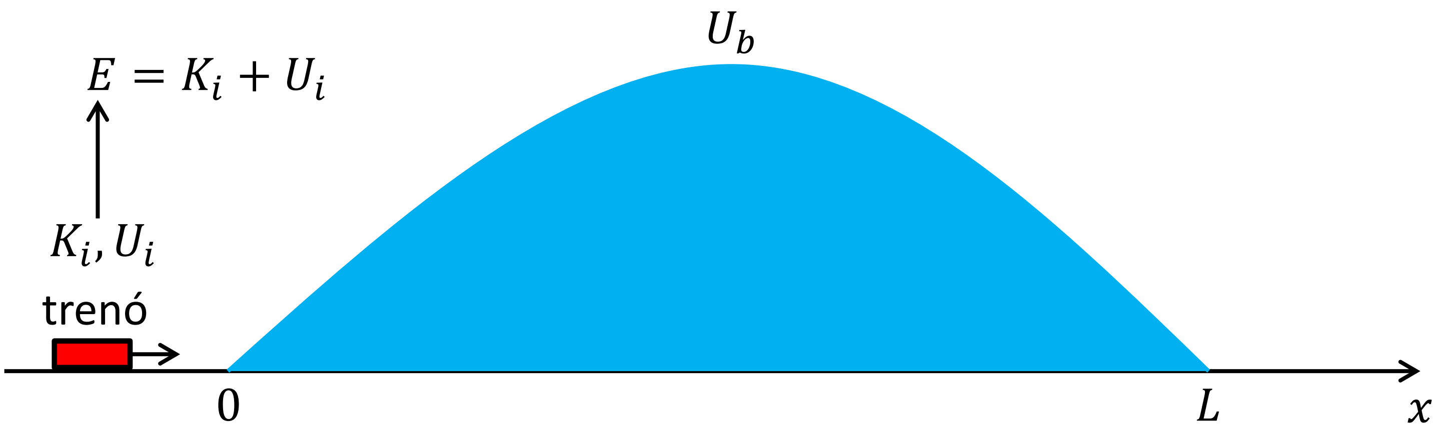
$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta p_y \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta p_z \geq \dfrac{\hbar}{2} \end{cases} \qquad (38.20)$$

onde $\hbar$ ("h cortado") é igual à constante de Planck dividida por 2π (ou seja, $\hbar = h/2\pi$).

Nas equações (38.20) Δx e Δp_x, por exemplo, representam as indeterminações nas medidas das componentes x de $\vec{r}$ e $\vec{p}$. Mesmo com os melhores instrumentos de medida que a tecnologia é capaz de fornecer, o produto da indeterminação da posição pela indeterminação do momento linear de uma partícula ao longo de um eixo qualquer jamais será menor que $\hbar/2$; trata-se de uma impossibilidade formal, que não depende da precisão dos instrumentos de medida.

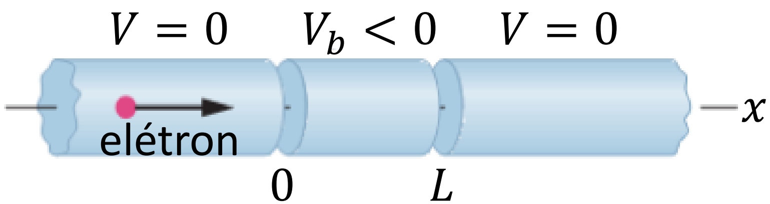
38.9 O Efeito Túnel

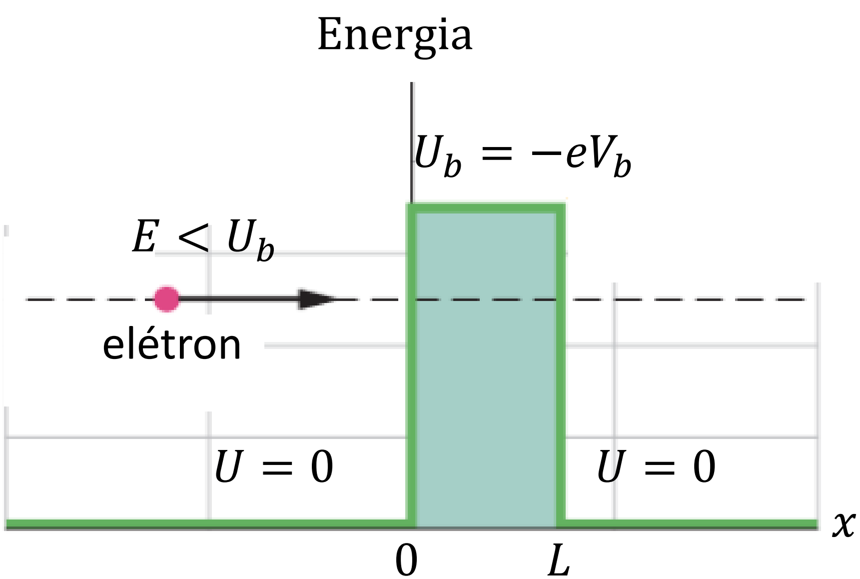
Suponha que um trenó deslize sem atrito em um plano horizontal em direção a uma colina coberta de gelo.



Quando o trenó começa a subir a colina, parte da sua energia cinética K_i se transforma em energia potencial gravitacional U. Quando o trenó chega no alto da colina, a energia potencial é U_b. Isso significa que o trenó só consegue chegar ao outro lado da colina se a energia mecânica inicial E é maior que U_b. Se $E < U_b$, o trenó para de subir antes de chegar ao alto da colina e escorrega de volta para a esquerda. Assim, por exemplo, se $U_b = 20\ J$ e $E = 10\ J$ o trenó não consegue passar para o outro lado da colina. Dizemos que a colina se comporta como uma **barreira de energia potencial** (ou, simplesmente, **barreira de potencial**) e que, no caso, a barreira tem uma altura $U_b = 20\ J$.

A figura abaixo mostra uma barreira de potencial para um elétron não-relativístico que se move no interior de um fio ideal de espessura desprezível. O elétron, cuja energia mecânica é E, se aproxima de uma região (a barreira) na qual o potencial V_b é negativo. Como possui carga negativa ($q = -e$), o elétron tem uma energia potencial positiva ($U_b = qV_b$) nessa região.



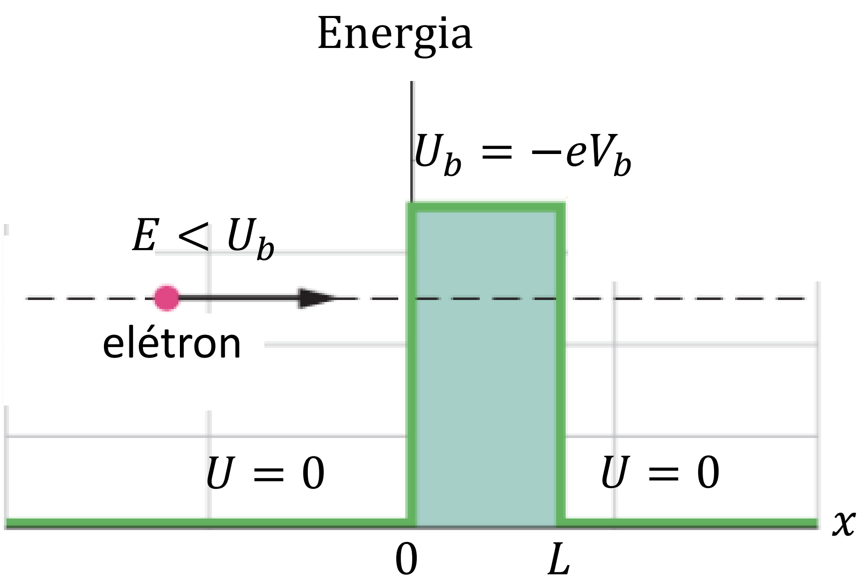


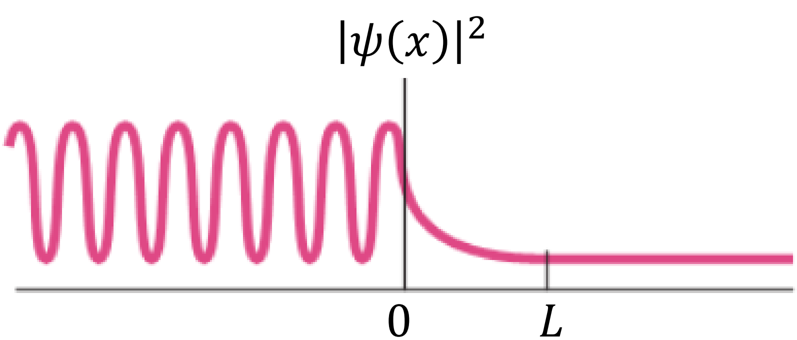
De acordo com a Física Clássica...

- Se $E > U_b$, esperamos que o elétron consiga passar pela região da barreira e aparecer à direita do ponto $x = L$. Não há nada estranho nesse comportamento.

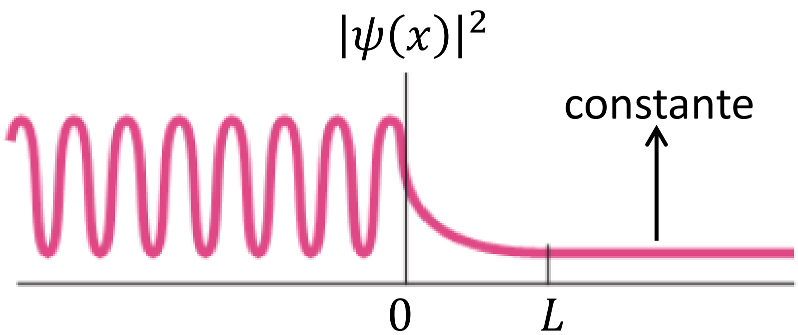
- Se $E < U_b$, esperamos que o elétron não consiga passar pela região da barreira e que o sentido do seu movimento se inverta, como no caso do trenó da figura do slide anterior para $E < U_b$.

Entretanto, algo estranho pode acontecer com o elétron se $E < U_b$. De acordo com a Física Quântica, como o elétron se comporta como uma onda de matéria, ele tem uma probabilidade finita de atravessar a barreira e aparecer do outro lado, movendo-se para a direita com energia E como se nada tivesse acontecido na região $0 \leq x \leq L$. É o chamado **efeito túnel**.





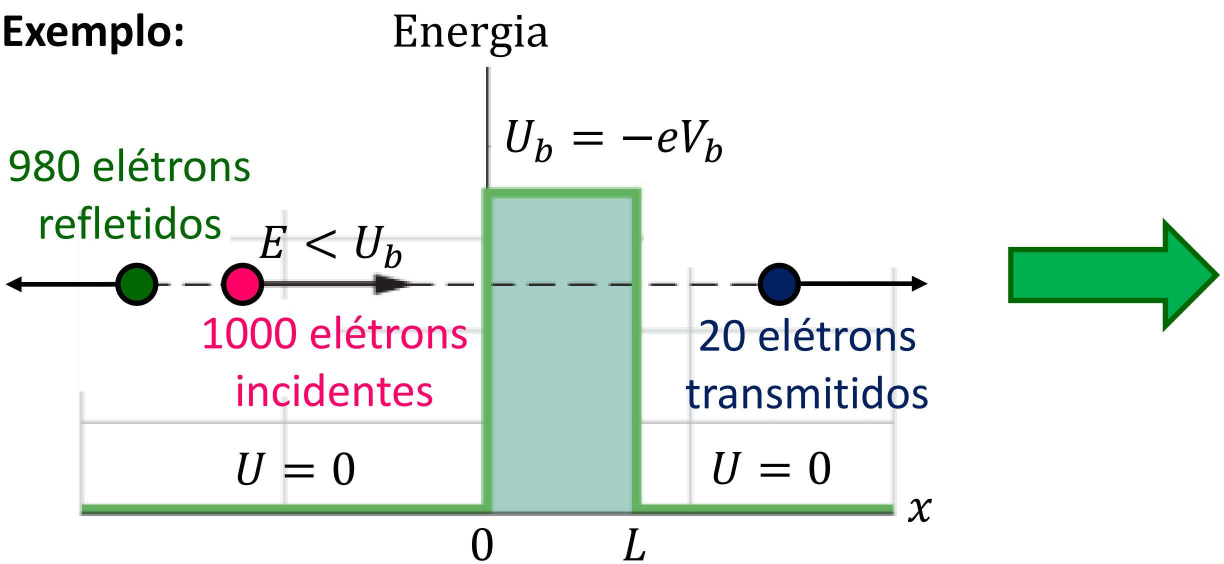
A função de onda $\psi(x)$ que descreve o movimento do elétron pode ser obtida resolvendo separadamente a equação de Schrödinger [eq. (38.15)] nas três regiões da figura ao lado: (1) à esquerda da barreira, (2) no interior da barreira e (3) à direita da barreira. As constantes arbitrárias que aparecem nas soluções devem ser escolhidas de tal forma que a função $\psi(x)$ e sua derivada primeira em relação a x sejam contínuas em $x = 0$ e $x = L$. A densidade de probabilidade pode ser determinada calculando o quadrado do valor absoluto de $\psi(x)$.



- No interior da barreira $(0 \leq x \leq L)$, $|\psi(0 \leq x \leq L)|^2$ decai exponencialmente com x.
- À direita da barreira $(x > L)$, $|\psi(x > L)|^2$ tem uma valor pequeno mas constante. Isso significa que um elétron pode ser detectado nessa região, embora com baixa probabilidade.

O **coeficiente de transmissão** T de uma barreira de potencial é definido como a fração de elétrons que conseguem atravessá-la.

Exemplo:



Nesse caso, $T = \frac{20}{1000} = 0{,}02$

O **coeficiente de transmissão** T também pode ser obtido através da seguinte expressão

$$T \approx e^{-2bL}, \qquad (38.21)$$

onde

$$b = \sqrt{\frac{8\pi^2 m(U_b - E)}{h^2}}. \quad (38.22)$$

Exercícios sugeridos das Seções 38.7, 38.8 e 38.9: 57, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 68, 69, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 79 e 80.

62) Suponha que $A = B = \psi_0$ na equação $\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)}$. Nesse caso a equação representa a soma de duas ondas de matéria de mesma amplitude, propagando-se em sentidos opostos. (Lembre-se de que esta é a condição para uma onda estacionária.) **(a)** Mostre que, nessas condições, $|\Psi(x,t)|^2$ é dado por

$$|\Psi(x,t)|^2 = 2\psi_0^2[1 + \cos 2kx].$$

(b) Plote essa função e mostre que representa o quadrado da amplitude de uma onda estacionária. **(c)** Mostre que os nós dessa onda estacionária estão situados nos pontos para os quais

$$x_n = \frac{(2n+1)\lambda}{4}, \text{onde } n = 0,1,2,3, \ldots$$

e λ é o comprimento de onda de de Broglie da partícula. **(d)** Escreve uma expressão do mesmo tipo para as posições mais prováveis da partícula.

Dicas: **(b)** Veja o próximo slide. **(c)** $|\Psi(x,t)|^2 = 0$. **(d)** $|\Psi(x,t)|^2 = 4\psi_0^2 \Rightarrow \cos 2kx = 1$.

Resposta: (**d**): $x_n = \frac{1}{2}n\lambda$, onde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ e $n = 0,1,2,3, \ldots$

62) (b)