

Física Quântica I / Mecânica Quântica

Vítor M. Pereira

Departamento de Física | Universidade do Minho

2021/22 — 2º Sem

Lição 18

Potenciais constantes por partes em 1D. O poço e a barreira de potencial.

Estados ligados de potenciais simétricos

Poço de potencial I – estados estacionários ligados [bound states]

Corrente de probabilidade e a sua conservação

Poço de potencial II – estados estacionários de espalhamento [scattering states]

- As soluções de espalhamento
- Coeficientes de transmissão e reflexão

Barreira de potencial

- Soluções de espalhamento e efeito túnel
- Coeficientes de transmissão e reflexão

Estados ligados de potenciais simétricos (paridade)

Em 1D, as soluções da ESIT para **estados ligados** (só destes) têm as seguintes propriedades:

- Os estados ligados são sempre **não-degenerados**.
- Os estados ligados são descritos por **funções de onda** (FdO) **reais**.

Uma implicação importante para potenciais simétricos

Em 1D, os estados ligados $\varphi_n(x)$ de um potencial simétrico, $V(x) = V(-x)$, têm paridade definida: as FdO $\varphi_n(x)$ são funções **pares ou ímpares** de x .

Prova: Seja $\varphi_n(x)$ a FdO que descreve o estado estacionário com energia E_n .

$$\varphi_n(x) \text{ satisfaz a ESIT:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_n''(x) + V(x)\varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$$

$$\text{definamos uma outra função } \tilde{\varphi}(x): \quad \tilde{\varphi}(x) \equiv \varphi_n(-x) \quad \Leftrightarrow \quad \varphi_n(x) = \tilde{\varphi}(-x)$$

$$\text{substituindo na ESIT:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\tilde{\varphi}''(-x) + V(x)\tilde{\varphi}(-x) = E_n \tilde{\varphi}(-x)$$

$$\text{mudando de variável } x \rightarrow -x: \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\tilde{\varphi}''(x) + V(-x)\tilde{\varphi}(x) = E_n \tilde{\varphi}(x)$$

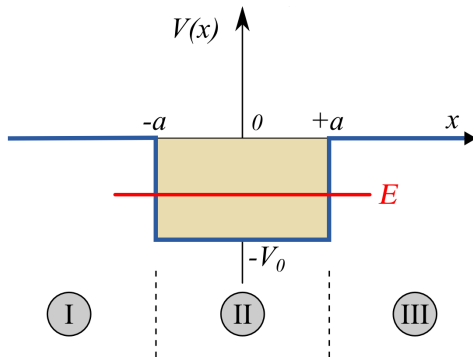
$$\text{mas como, por hipótese, } V(-x) = V(x): \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\tilde{\varphi}''(x) + V(x)\tilde{\varphi}(x) = E_n \tilde{\varphi}(x)$$

Logo, $\tilde{\varphi}(x)$ e $\varphi_n(x)$ **representam o mesmo estado físico**. Ou seja, como $\varphi_n(x) \in \mathbb{R}$,

$$\tilde{\varphi}(x) = \pm \varphi_n(x) \quad \Rightarrow \quad \varphi_n(-x) = \pm \varphi_n(x) \quad (\text{é uma função par ou ímpar}) \quad \square$$

Partícula num poço de potencial (caso $-V_0 < E < 0$)

estados ligados (bound states)



Poço de potencial – sol. para estados ligados ($-V_0 < E < 0$)

Aproveitando a simetria do potencial

- O potencial é simétrico: $V(x) = V(-x)$;
- Logo, soluções são funções pares ou ímpares;
- Escrevemos então

$$\psi_2(x) = F \sin(kx) + G \cos(kx),$$

e só precisamos de analisar para $x > 0$.

Soluções pares: $\psi(x) = \psi(-x)$

$$\psi_2(x) = G \cos(kx) \quad (-a < x < a)$$

Impondo continuidade em $x = a$:

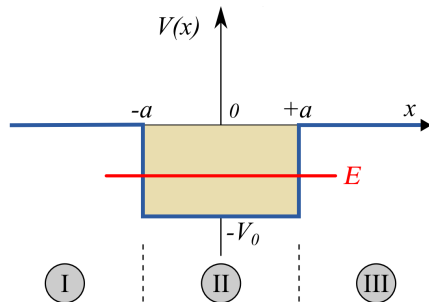
$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \Leftrightarrow G \cos(ka) = B_3 e^{-\lambda a}$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \Leftrightarrow -kG \sin(ka) = -\lambda B_3 e^{-\lambda a}$$

A existência de solução requer que: (dividindo as 2 eqs.)

Soluções pares para os estados ligados

$$k \tan(ka) = \lambda \quad (\text{condição de quantização})$$



$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

$$I: \quad \psi_1(x) = A_1 e^{+\lambda x} + \cancel{B_1} e^{-\lambda x}$$

$$II: \quad \psi_2(x) = A_2 e^{+ikx} + B_2 e^{-ikx}$$

$$III: \quad \psi_3(x) = \cancel{A_3} e^{+\lambda x} + B_3 e^{-\lambda x}$$

$$k \equiv \sqrt{2m(V_0 - |E|)}/\hbar, \quad \lambda \equiv \sqrt{2m|E|}/\hbar$$

Poço de potencial – sol. para estados ligados ($-V_0 < E < 0$)

Soluções ímpares: $\psi(x) = -\psi(-x)$

$$\psi_2(x) = F \sin(kx) \quad (-a < x < a)$$

Impondo continuidade em $x = a$:

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \Leftrightarrow F \sin(ka) = B_3 e^{-\lambda a}$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \Leftrightarrow kF \cos(ka) = -\lambda B_3 e^{-\lambda a}$$

A existência de solução requer agora que

$$k \cot(ka) = -\lambda.$$

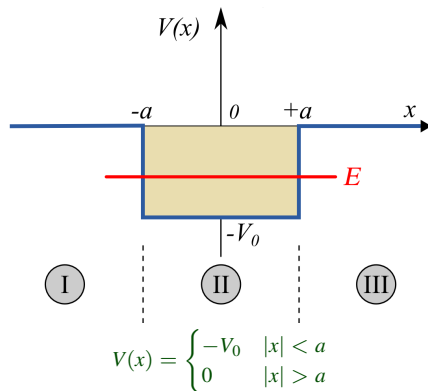
Condições que determinam as energias E_n

Soluções pares:

$$k \tan(ka) = \lambda.$$

Soluções ímpares:

$$k \cot(ka) = -\lambda.$$



$$I : \quad \psi_1(x) = A_1 e^{+\lambda x} + \cancel{B_1} e^{-\lambda x}$$

$$II : \quad \psi_2(x) = A_2 e^{+ikx} + B_2 e^{-ikx}$$

$$III : \quad \psi_3(x) = \cancel{A_3} e^{+\lambda x} + B_3 e^{-\lambda x}$$

$$k \equiv \sqrt{2m(V_0 - |E|)}/\hbar, \quad \lambda \equiv \sqrt{2m|E|}/\hbar$$

Determinar os estados estacionários (i.e.: os estados próprios deste Hamiltoniano) requer resolver as 2 equações **transcendentes**:

$$k \tan ka = \lambda \quad \text{ou} \quad k \cot ka = -\lambda. \quad (\text{são eqs. independentes})$$

Podemos estimar as soluções destas eqs. transcendentes de modo gráfico:

- Notamos que k e λ estão relacionados:

$$\lambda^2 = 2mV_0/\hbar^2 - k^2.$$

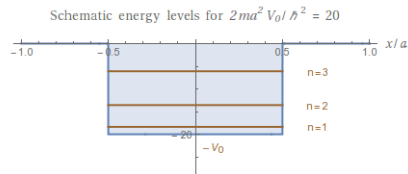
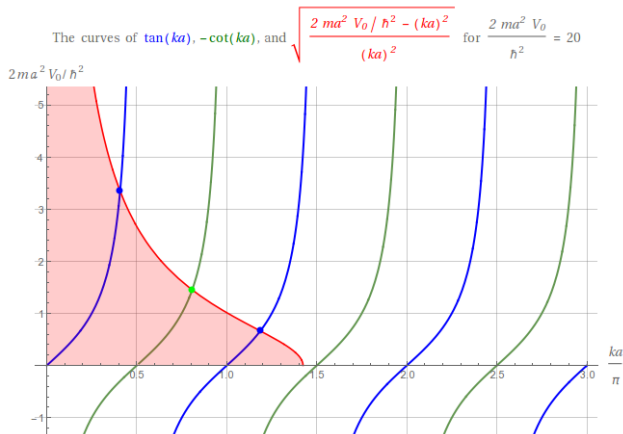
- Reescrevemos as eqs. acima como

$$\tan(ka) = \sqrt{\frac{\alpha^2 - (ka)^2}{(ka)^2}} \quad \text{e} \quad -\cot(ka) = \sqrt{\frac{\alpha^2 - (ka)^2}{(ka)^2}}, \quad \text{onde} \quad \alpha^2 \equiv \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}.$$

- Representamos as 3 funções $\tan(ka)$, $-\cot(ka)$ e $\sqrt{\cdot \cdot}$ no mesmo gráfico em função de ka .

Poço de potencial – espectro dos estados ligados ($-V_0 < E < 0$)

$$\tan(ka) = \sqrt{\frac{\alpha^2 - a^2k^2}{a^2k^2}} \quad \text{e} \quad -\cot(ka) = \sqrt{\frac{\alpha^2 - a^2k^2}{a^2k^2}}, \quad \text{onde} \quad \alpha^2 \equiv \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}$$



- Há **sempre pelo menos uma solução par**, qualquer que seja $V_0 > 0$.
- O nº soluções é finito (desde que V_0 seja finito).
- A paridade das soluções alterna entre estados sucessivos: E_1 é par, E_2 ímpar, E_3 par, etc.

Poço de potencial – funções de onda dos estados ligados

Cada raiz k_n das equações transcendentais dá-nos um valor quantizado de energia:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} - V_0, \quad -V_0 < E_n < 0.$$

Para determinar a função de onda associada a **cada um** destes estados:

- ❶ Relembramos a forma da FdO em cada região I, II e III. Por ex., para os estados **par**es:

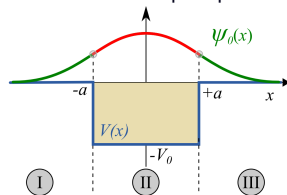
$$\psi_1(x) = A_1 e^{+\lambda x}, \quad \psi_2^{(\text{par})}(x) = G \cos(kx), \quad \psi_3(x) = B_3 e^{-\lambda x}.$$

- ❷ Voltamos às condições de continuidade na interface das regiões I e III, substituímos $k \rightarrow k_n$ e resolvemos para as constantes:

$$G \cos(k_n a) = B_3 e^{-\lambda_n a} \quad \longrightarrow \quad B_3 = G \frac{\cos(k_n a)}{e^{-\lambda_n a}}.$$

- ❸ Isto dá-nos $\varphi_n(x)$ em toda a região $x > 0$. A região $x < 0$ é determinada pela paridade:

$$\varphi_n^{(\text{par})}(x) = G \begin{cases} \cos(k_n x) & , \quad |x| \leq a \\ \cos(k_n a) e^{-\lambda_n(|x|-a)} & , \quad |x| \geq a \end{cases}$$



- ❹ A constante G é fixada normalizando $\varphi_n(x)$.

A densidade de corrente de probabilidade $\mathcal{J}(x)$

A corrente (ou fluxo) de probabilidade

Vimos antes (L7) que a normalização do vetor de estado é preservada no tempo:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0. \quad (\text{conservação global da probabilidade})$$

A equação de Schrödinger para a FdO $\psi(x, t)$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \mathcal{H} \psi(x, t) \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \mathcal{V}(x) \right] \psi(x, t),$$

garante também a existência de uma **lei de conservação local** da densidade de probabilidade

$$\rho(x, t) \equiv |\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t) \psi(x, t). \quad (\text{densidade de probabilidade para a posição})$$

Derivê-mo-la:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} [\psi^*(x, t) \psi(x, t)] = \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + \psi(x, t) \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} \\ &= \psi^*(x, t) \left[\frac{-i}{\hbar} \mathcal{H} \psi(x, t) \right] + \psi(x, t) \left[\frac{+i}{\hbar} \mathcal{H} \psi^*(x, t) \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar}{2im} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \psi(x, t) \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \right) \right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \mathcal{J}(x, t) \quad [\mathcal{J}(x, t) : \text{corrente de probabilidade}] \end{aligned}$$

A eq. Schrödinger implica conservação local da densidade de probabilidade

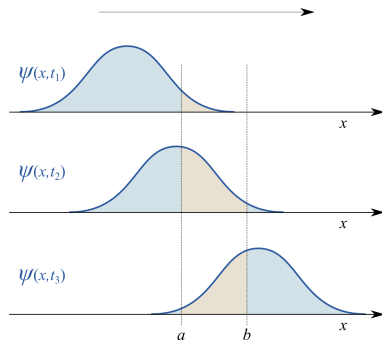
$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{J}(x, t)}{\partial x} = 0 \quad \xrightarrow[\text{no caso 3D}]{\text{generaliza-se}} \quad \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{J}(\mathbf{r}, t) = 0$$

Interpretação da corrente de probabilidade (caso 1D)

densidade: $\rho(x, t) \equiv |\psi(x, t)|^2$, **corrente:** $\mathcal{J}(x, t) \equiv \frac{\hbar}{2im} \left[\psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) - \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x, t) \right]$.

Conservação local da densidade de probabilidade

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{J}(x, t)}{\partial x} = 0$$



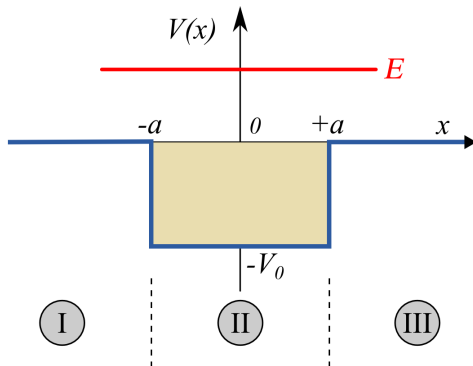
Em qualquer região do espaço, p. ex. $a \leq x \leq b$, temos

$$\int_a^b \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} dx + \int_a^b \frac{\partial \mathcal{J}(x, t)}{\partial x} dx \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}(a \leq x \leq b) = \mathcal{J}(a, t) - \mathcal{J}(b, t).$$

A última equação significa: a taxa de variação da probabilidade (de encontrar a partícula numa dada região do espaço) é igual ao balanço do fluxo de probabilidade que entra nessa mesma região (corrente que entra menos corrente que sai).

Partícula num poço de potencial (caso $E > 0$)

estados de espalhamento (scattering states)



Poço de potencial finito – soluções de espalhamento ($E > 0$)

Soluções de espalhamento

- Existem para todas as energias que permitem a partícula escapar até $\pm\infty$.
- Permitem responder a questões do tipo:
 - Qual a probab. de uma partícula proveniente de $\pm\infty$ ser refletida pelo potencial?
 - Num feixe de tais partículas, que fração é transmitida e refletida?

Condições fronteira para espalhamento

A uma solução do tipo

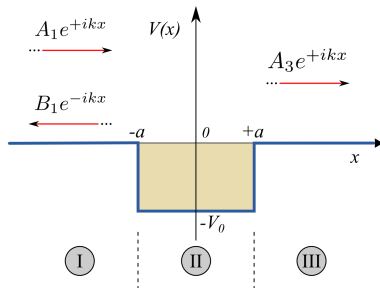
$$\psi(x) = A e^{+ikx} + B e^{-ikx}$$

está associada a **corrente de probabilidade**

$$\mathcal{J}(x) = \frac{\hbar k}{m} [|A|^2 - |B|^2] = \underset{\text{corrente} \rightarrow}{\mathcal{J}_A} - \underset{\text{corrente} \leftarrow}{\mathcal{J}_B}.$$

Ou seja, cada onda plana contribui, individualmente,

$$A e^{ikx} \xrightarrow[\text{corrente}]{\text{contrib. para}} \frac{\hbar k}{m} |A|^2.$$



$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

$$I : \quad \psi_1(x) = A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$II : \quad \psi_2(x) = A_2 e^{+iqx} + B_2 e^{-iqx}$$

$$III : \quad \psi_3(x) = A_3 e^{+ikx} + \cancel{B_3} e^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$$

Poço de potencial – soluções de espalhamento ($E > 0$)

Coefficientes de reflexão e transmissão

$$R \equiv \frac{\mathcal{I}_{\text{refletida}}}{\mathcal{I}_{\text{incidente}}}, \quad T \equiv \frac{\mathcal{I}_{\text{transmitida}}}{\mathcal{I}_{\text{incidente}}}$$

Para este potencial concreto:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}, \quad T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}.$$

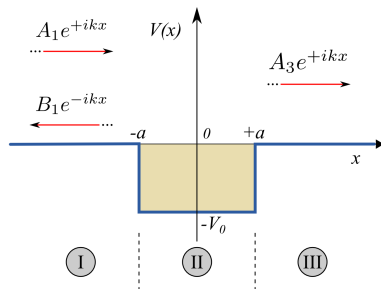
Cálculo dos coeficientes R e T em geral:

- 1 Impôr continuidade de $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ em $x = \pm a$.
- 2 Expressar as constantes B_1 e A_3 em termos de A_1 .
- 3 Substituir nas expressões para R e T .

$$R = \frac{1}{1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(2qa)}}, \quad T = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(2qa)}{4k^2 q^2}}.$$

Aspectos qualitativos destes R e T :

- T cresce com o aumento de E .
- Ressonâncias de transmissão ($T = 1$) sempre que $2qa = n\pi$.



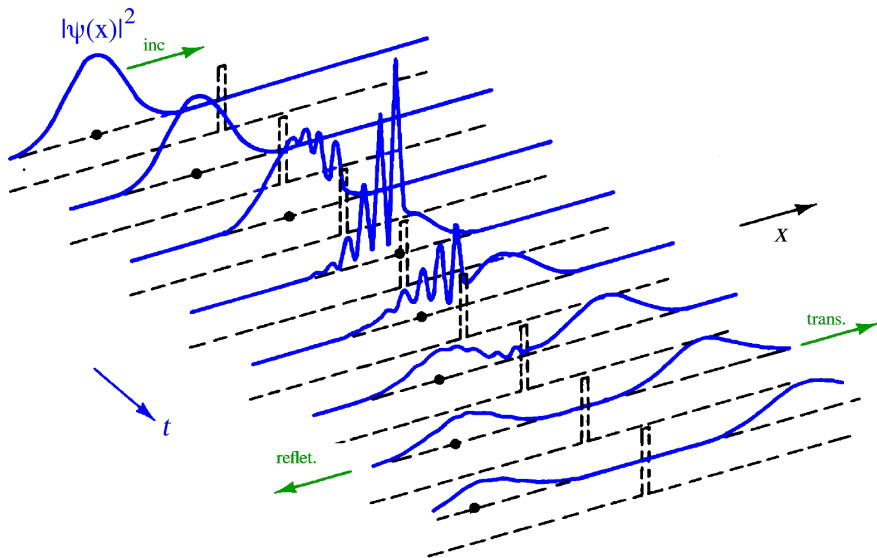
$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

$$I: \quad \psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$II: \quad \psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$$

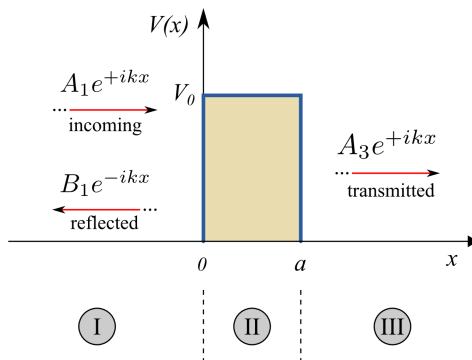
$$III: \quad \psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + \cancel{B_3} e^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad q = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$$



Reflexão e transmissão de um trem de ondas por uma barreira de potencial.

A barreira de potencial



Barreira de potencial – transmissão por efeito túnel ($E < V_0$)

Regime de tunelamento: $E < V_0$

Continuidade em $x = 0$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{e} \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

\Downarrow

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$ik(A_1 - B_1) = \lambda(A_2 - B_2)$$

Continuidade em $x = a$:

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad \text{e} \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

\Downarrow

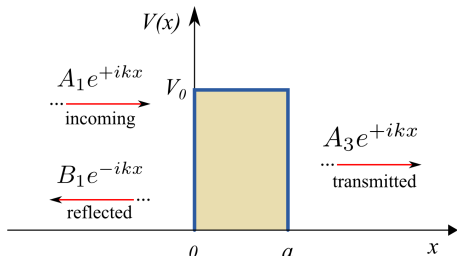
$$A_3 e^{ika} = A_2 e^{+\lambda a} + B_2 e^{-\lambda a}$$

$$ik A_3 e^{ika} = \lambda(A_2 e^{+\lambda a} - B_2 e^{-\lambda a})$$

4 incógnitas (B_1, A_2, B_2, A_3) + 4 equações:

$$R = \frac{\mathcal{J}_r}{\mathcal{J}_i} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left[1 + \frac{4k^2 \lambda^2}{(k^2 + \lambda^2)^2 \sinh^2 \lambda a} \right]^{-1}$$

$$T = \frac{\mathcal{J}_t}{\mathcal{J}_i} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \left[1 + \frac{(k^2 + \lambda^2)^2 \sinh^2 \lambda a}{4k^2 \lambda^2} \right]^{-1}$$



I

II

III

$$I: \quad \psi_1(x) = A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$II: \quad \psi_2(x) = A_2 e^{+\lambda x} + B_2 e^{-\lambda x}$$

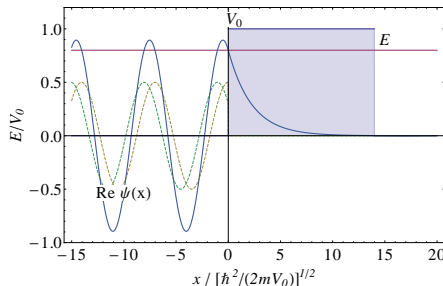
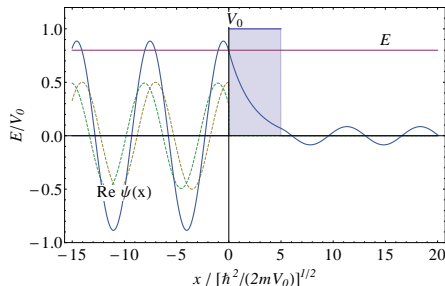
$$III: \quad \psi_3(x) = A_3 e^{+ikx} + B_3 e^{-ikx}$$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad \lambda = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

$$\mathcal{J}_i = \frac{k}{m} |A_1|^2, \quad \mathcal{J}_r = \frac{k}{m} |B_1|^2, \quad \mathcal{J}_t = \frac{k}{m} |A_3|^2$$

Barreira de potencial – transmissão por efeito túnel ($E < V_0$)

Comportamento da função de onda em torno da barreira de potencial:



Coeficiente de transmissão:
$$T = \left[1 + \frac{(k^2 + \lambda^2)^2 \sinh^2 \lambda a}{4k^2 \lambda^2} \right]^{-1}$$

Penetração da barreira e tunelamento

- Classicamente, a barreira é totalmente opaca para $E < V_0$ (i.e. $T = 0$ classicamente).
- Mas, quanticamente, a prob. transmissão T **nunca** é estritamente 0 (com V_0 finito).
- T é **exponencialmente sensível** à largura a da barreira:

$$T \xrightarrow{\lambda a \gg 1} \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\lambda a} \quad (\text{supressão exponencial do efeito túnel})$$

Barreira de potencial – espalhamento ($E > V_0$)

Soluções de espalhamento: $E > V_0$

Continuidade em $x = 0$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{e} \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

\Downarrow

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$ik(A_1 - B_1) = iq(A_2 - B_2)$$

Continuidade em $x = a$:

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad \text{e} \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

\Downarrow

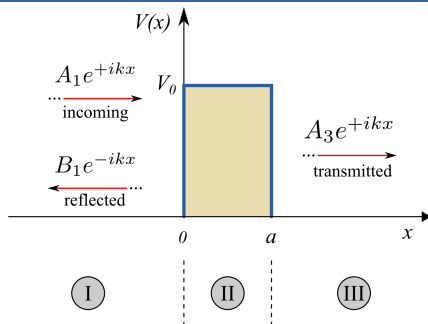
$$A_3 e^{+ika} = A_2 e^{+iqu} + B_2 e^{-iqu}$$

$$ik A_3 e^{+ika} = iq(A_2 e^{+iqx} - B_2 e^{-iqx})$$

4 incógnitas (B_1, A_2, B_2, A_3) + 4 equações:

$$R = \frac{\mathcal{J}_r}{\mathcal{J}_i} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left[1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(qa)} \right]^{-1}$$

$$T = \frac{\mathcal{J}_t}{\mathcal{J}_i} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \left[1 + \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(qa)}{4k^2 q^2} \right]^{-1}$$



$$I : \quad \psi_1(x) = A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

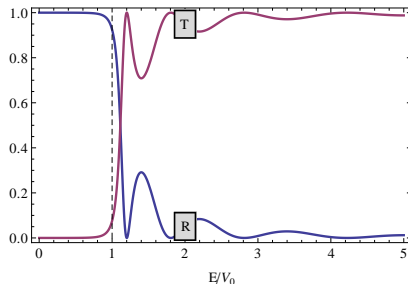
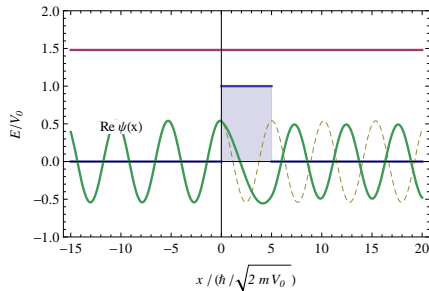
$$II : \quad \psi_2(x) = A_2 e^{+iqx} + B_2 e^{-iqx}$$

$$III : \quad \psi_3(x) = A_3 e^{+ikx}$$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$$

$$\mathcal{J}_i = \frac{k}{m} |A_1|^2, \quad \mathcal{J}_r = \frac{k}{m} |B_1|^2, \quad \mathcal{J}_t = \frac{k}{m} |A_3|^2$$

Comportamento da função e dos coeficientes R e T :



$$T = \left[1 + \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 qa}{4k^2 q^2} \right]^{-1},$$

$$R = \left[1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(qa)} \right]^{-1}$$

Ressonâncias de transmissão

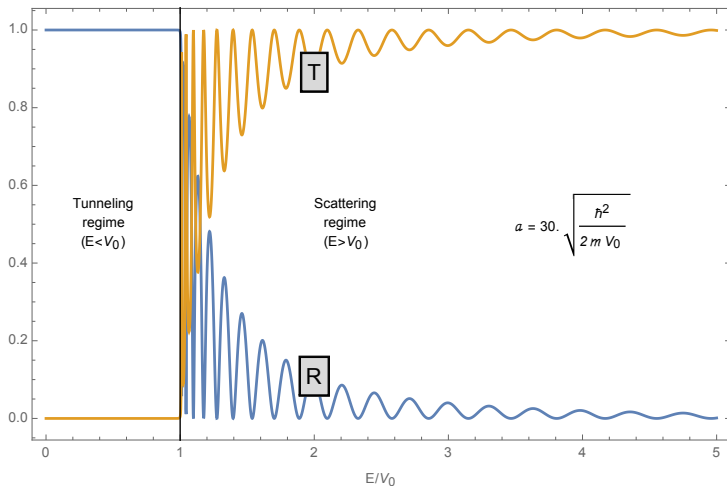
- Classicamente, a barreira seria completamente transparente para $E > V_0$. (i.e. $T = 1$)
- Mas, genericamente, a probabilidade de transmissão quântica é $T < 1$.
- Exceto nos casos em que $q = n\pi/a$:

$$\sin(qa) = \sin(n\pi) = 0 \quad \Rightarrow \quad T = 1 \quad (\text{transmissão perfeita})$$

Tais casos são chamados **ressonâncias**. Ocorrem para as energias “especiais” $E_{\text{res}} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$.

Barreira de potencial – coeficientes T e R

Transmission (T) and reflection (R) coefficients vs particle's energy (E)
(square potential barrier of width a)



Coeficientes calculados para uma barreira razoavelmente larga, tendo $a = 30 \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}$.

Cobrimos os casos representativos mais importantes:

- Poço de potencial infinito (confinamento total)

- Apenas estados ligados; um número infinito deles.
- Espectro de energia totalmente discreto e infinito.
- Estados estacionários não degenerados.

- Poço de potencial (potencial atrativo)

- Espectro discreto para $E < 0$ e contínuo para $E \geq 0$.
- Número finito de estados ligados.
- Pelo menos um estado ligado.
- Transmissão quando $E > 0$ não é perfeita: $T \leq 1$
- Transmissão ressonante ($T = 1$) quando $2qa = n\pi$.

- Barreira de potencial (potencial repulsivo)

- Existem apenas soluções de espalhamento.
- Espectro totalmente contínuo para $E > 0$.
- Tunelamento e transmissão possível mesmo se $E < V_0$.
- Transmissão aumenta com E .
- Transmissão ressonante ($T = 1$) quando $qa = n\pi$.

