

ções moleculares que não envolvem penetração de barreira, ou em outros fenômenos moleculares ou atômicos. Devido às simplificações técnicas resultantes, a frequência foi usada como um padrão para os primeiros relógios atômicos, que medem o tempo com precisão máxima.

Um exemplo recente, e muito útil, de penetração de barreiras por elétrons é encontrado no diodo túnel. Ele é um componente semiconductor, como um transistor, que é usado em circuitos eletrônicos rápidos, já que sua resposta em alta frequência é muito melhor do que a de qualquer outro transistor. A operação de um diodo será explicada no Capítulo 13, quando estivermos discutindo semicondutores. Aqui diremos apenas que o diodo utiliza penetração de barreira controlável para ligar ou desligar correntes tão rapidamente que pode ser utilizado para fazer um oscilador que opere em frequências superiores a 10^{11} Hz.

6-7 O POÇO DE POTENCIAL QUADRADO

Nas seções anteriores, consideramos o movimento de partículas em potenciais que não são capazes de limitá-las a determinadas regiões do espaço. Embora uma série de fenômenos quânticos interessantes tenham surgido, a quantização da energia não apareceu. É claro que sabemos, das discussões qualitativas do último capítulo, que podemos esperar que haja quantização de energia apenas no caso em que os potenciais são capazes de aprisionar uma partícula. Nesta seção vamos discutir um dos potenciais mais simples que apresentam esta propriedade, o *poço de potencial quadrado*.

O potencial nesse caso pode ser escrito como

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \text{ ou } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6-58)$$

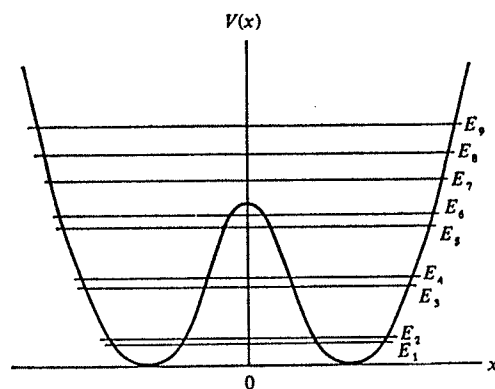


FIGURA 6-22. A energia potencial do átomo de N na molécula de NH_3 , como função de sua distância ao plano que contém os três átomos de H, que está colocado em $x = 0$. Em seus estados de mais baixas energias, a energia total da molécula está abaixo do alto da barreira que separa os dois mínimos, como indicado pelos autovalores do potencial mostrados na figura.

A ilustração na figura 6-23 indica a origem de seu nome. Se uma partícula tem energia total $E < V_0$, então segundo a *mecânica clássica* ela pode estar somente na região $-a/2 < x < +a/2$ (dentro do poço). A partícula está limitada a esta região e oscila entre os extremos da região com momento de módulo constante mas com sentidos alternados. Além disso, *qualquer valor*

$E > 0$ para a energia total é possível. No entanto, segundo a *mecânica quântica* apenas certos valores da energia total separados discretamente são possíveis.

O poço de potencial quadrado é frequentemente utilizado na mecânica quântica para representar uma situação na qual uma partícula se move em uma região limitada do espaço sob a influência de forças que a mantêm nesta região. Embora este potencial simplificado perca alguns dos detalhes do movimento, ele contém a característica básica, de limitar a partícula a uma região de um certo tamanho. Da discussão no exemplo 6-2, é evidente que é uma boa aproximação representar o potencial que atua sobre um elétron de condução em um bloco de metal por meio de um poço quadrado. A profundidade do poço quadrado é de cerca de 10 eV, e sua largura

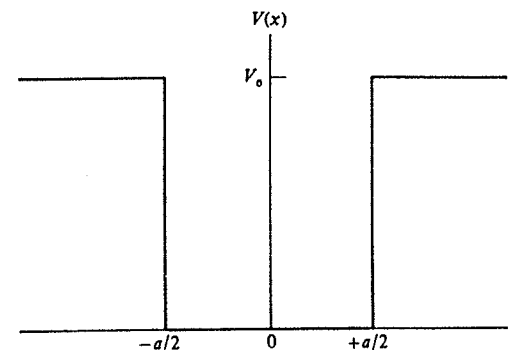


FIGURA 6-23. Um poço de potencial quadrado.

ra é igual à largura do bloco. A figura 6-24 indica, utilizando um ponto de vista diferente do usado no exemplo 6-2, como podemos obter algo semelhante a um poço quadrado superpondo os potenciais produzidos pelos íons positivos do metal que estão bastante próximos uns dos outros. No exemplo 6-3, indicamos que o movimento de um nêutron em um núcleo pode ser aproximado se supusermos que a partícula está em um poço de potencial quadrado de profundidade de cerca de 50 MeV. As dimensões lineares do potencial se igualam ao diâmetro nuclear, que é de cerca de 10^{-14} m.

Vamos iniciar nosso tratamento considerando, qualitativamente, a forma das autofunções que são soluções da equação de Schroedinger independente do tempo para o poço de potencial quadrado de (6-58). Como nas seções anteriores, o problema se decompõe em três regiões: $x < -a/2$ (à esquerda do poço), $-a/2 < x < +a/2$ (dentro do poço) e $x > +a/2$ (à direita do poço). A chamada *solução geral* da equação na região dentro do poço é

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{onde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 < x < +a/2 \quad (6-59)$$

O primeiro termo descreve ondas se propagando no sentido de x crescente, e o segundo, ondas se propagando no sentido de x decrescente. (Esta solução foi obtida na seção 6-2. Se o estudante não tiver estudado essa seção, ele pode facilmente mostrar que esta é uma solução para a equação de Schroedinger independente do tempo, para quaisquer valores das constantes arbitrárias A e B , substituindo-a em (6-2).)

A descrição clássica da partícula oscilando dentro do poço sugere que a autofunção nesta região deve corresponder a uma mistura igual de ondas se movendo nos dois sentidos. As duas ondas de mesma amplitude se propagando em sentidos opostos vão se combinar, formando uma

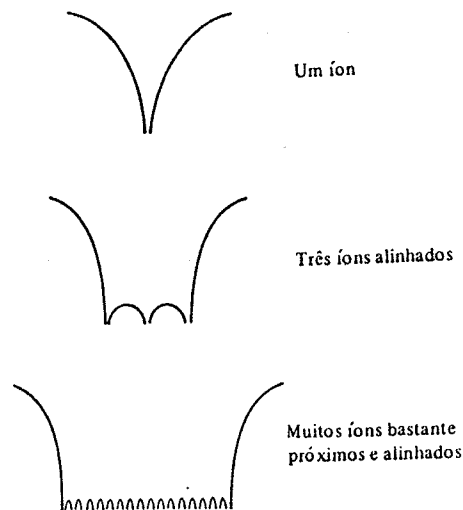


FIGURA 6-24. Uma indicação qualitativa de como podemos fazer com que a superposição dos potenciais que atuam sobre um elétron condutor em um metal se aproxime de um poço de potencial quadrado. Os potenciais se devem aos íons positivos próximos no metal.

onda estacionária. Podemos obter este comportamento igualando as duas constantes arbitrárias, de forma que $A = B$. Isto dá

$$\psi(x) = B(e^{ik_1x} + e^{-ik_1x})$$

que podemos escrever como

$$\psi(x) = B' \frac{e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}}{2}$$

onde B' é uma nova constante arbitrária, definida pela relação $B' = 2B$. Mas esta combinação de exponenciais complexas nos dá simplesmente

$$\psi(x) = B' \cos k_1x \quad \text{onde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6-60)$$

Esta autofunção descreve uma onda estacionária, já que uma inspeção na função de onda associada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ mostra que ela tem nós em posições fixas, onde $\cos k_1x = 0$.

Podemos obter também uma onda estacionária fazendo $-A = B$. Isto dá

$$\psi(x) = A(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x})$$

que podemos escrever como

$$\psi(x) = A' \frac{e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}}{2i}$$

onde A' é uma nova constante arbitrária, definida por $A' = 2iA$. Mas isto é exatamente

$$\psi(x) = A' \sin k_1x \quad \text{onde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6-61)$$

Como tanto (6-60) quanto (6-61) especificam soluções da equação de Schroedinger independente do tempo para o mesmo valor de E , e como a equação diferencial é linear em $\psi(x)$, sua soma

$$\psi(x) = A' \sin k_1x + B' \cos k_1x \quad \text{onde} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 < x < +a/2 \quad (6-62)$$

também é uma solução, como pode ser verificado por substituição direta. Na verdade, esta é uma *solução geral* da equação diferencial para a região *dentro* do poço porque ela contém duas constantes arbitrárias — é tão geral quanto a solução (6-59). Matematicamente, as duas são completamente equivalentes. No entanto, é mais conveniente utilizar (6-62) em problemas que envolvem o movimento de partículas ligadas. Fisicamente podemos pensar em (6-62) como descrevendo uma situação na qual uma partícula se move de forma tal que se conhece precisamente o módulo de seu momento, $p = \hbar k_1 = \sqrt{2mE}$, mas o seu sentido pode ser tanto o de x crescente quanto o de x decrescente.

Consideremos agora as soluções da equação de Schroedinger independente do tempo nas duas regiões *fora* do poço de potencial: $x < -a/2$ e $x > +a/2$. Nestas regiões, as *soluções gerais* terão as formas

$$\psi(x) = Ce^{k_{II}x} + De^{-k_{II}x} \quad \text{onde} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x < -a/2 \quad (6-63)$$

e

$$\psi(x) = Fe^{k_{II}x} + Ge^{-k_{II}x} \quad \text{onde} \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x > +a/2 \quad (6-64)$$

As duas formas de $\psi(x)$ descrevem ondas estacionárias na região fora do poço, já que na função de onda associada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ as dependências em x e t ocorrem como fatores separados. Estas ondas estacionárias não têm nós, mas elas serão ajustadas às ondas estacionárias dentro do poço, que têm nós. (As soluções gerais foram obtidas na seção 6-3. Sua validade, para quaisquer valores das constantes arbitrárias C, D, F e G , pode ser facilmente verificada pelos estudantes que pularam esta seção, substituindo-as em (6-13).)

Podemos obter autofunções válidas para todos os x unindo as formas consideradas, em cada uma das três regiões de x , para soluções gerais da equação de Schroedinger independente do tempo. Estas três formas envolvem seis constantes arbitrárias: A', B', C, D, F e G . Mas como uma autofunção aceitável deve se manter sempre finita, podemos ver imediatamente que devemos fazer $D = 0$ e $F = 0$. Se isto não fosse feito, a segunda exponencial em (6-63) faria $\psi(x) \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow -\infty$, e a primeira exponencial em (6-64) faria $\psi(x) \rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow +\infty$. Mais quatro equações podem ser obtidas exigindo-se que $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ sejam contínuas nos dois limites entre as regiões, $x = -a/2$ e $x = +a/2$, como é necessário para que a autofunção seja aceitável. (Elas já são unívocas.) Mas não podemos permitir que todas as quatro constantes arbitrárias que sobram sejam especificadas por estas quatro equações. Uma delas deve se manter não especificada, de forma tal que a amplitude da autofunção possa ser arbitrária. Exige-se que a amplitude seja arbitrária porque a equação diferencial é linear em relação à autofunção $\psi(x)$. Assim, pare-

ce haver uma discrepância entre o número de equações que devem ser satisfeitas e o número de constantes que podem ser ajustadas, mas isto é resolvido considerando-se a energia total E como uma constante adicional que pode ser ajustada, se necessário. Veremos que esse procedimento funciona, mas apenas para certos valores de E . Isto é, vai surgir um certo conjunto de valores possíveis da energia total E , e assim a energia total será *quantizada*, com um conjunto de autovalores. Apenas para estes valores da energia total é que a equação de Schroedinger tem soluções aceitáveis.

Não é difícil fazer o que está descrito acima, como verificaremos em breve tratando um caso especial. No entanto, o caso geral leva a uma solução que envolve uma equação transcendental complicada (uma equação na qual a incógnita está contida no argumento de uma função, como um seno), o que não permite expressar a solução de forma matematicamente concisa. Portanto, deixamos os detalhes da solução geral para o Apêndice G, e continuaremos por algum tempo com nossa discussão qualitativa:

As figuras 6-25 e 6-26 mostram, respectivamente, os autovalores e as autofunções para os três estados ligados de uma partícula em um poço de potencial quadrado particular. Não está mostrado um contínuo de autovalores que se estende para cima a partir do topo, já que qualquer valor da energia total E maior do que a altura das paredes do potencial V_0 é permitida. Também não são mostradas as autofunções do contínuo. Observando primeiro a região de x dentro do poço, notamos que a curvatura da parte senoidal da autofunção cresce à medida que a energia do autovalor correspondente aumenta. Em consequência disso, quanto maior for a energia, mais numerosas são as oscilações da autofunção correspondente e maior é o número de onda. Estes resultados refletem o fato de que o número de onda angular k_1 , na solução de (6-62) para a região dentro do poço, é proporcional a $E^{1/2}$. O poço de potencial quadrado desenhado na figura não tem um quarto estado *ligado* porque o valor associado de k_1 , e portanto de $E^{1/2}$, seria muito grande para satisfazer à condição de ligação $E < V_0$.

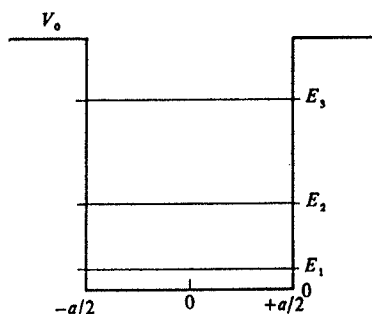


FIGURA 6-25. Um poço de potencial quadrado e seus três autovalores dos estados ligados. Não está mostrado o contínuo de autovalores da energia $E > V_0$.

Consideremos agora as partes das autofunções que se estendem às regiões fora do poço. Na mecânica clássica, uma partícula nunca poderia ser encontrada nessas regiões, já que sua energia cinética é $p^2/2m = E - V(x)$, que é negativa quando $E < V(x)$. Observemos que nessas *regiões classicamente proibidas* quanto menor for a energia do autovalor correspondente, mais rapidamente as autofunções tendem a zero. Isto está de acordo com o fato de que o parâmetro exponencial k_{II} , que aparece nas soluções (6-63) e (6-64) para a região fora do poço, é proporcional a $(V_0 - E)^{1/2}$. Também está de acordo com a idéia de que quanto mais séria for a violação da restrição clássica, de que a energia total deve ser ao menos do mesmo valor que a

energia potencial $V(x)$, menos facilmente as autofunções penetram nas regiões classicamente proibidas.

É instrutivo considerar o efeito que as autofunções sofrem se fazemos as paredes do poço quadrado ficarem muito altas, isto é, se fazemos $V_0 \rightarrow \infty$. Na figura 6-27, está mostrada a primeira autofunção para um poço de potencial quadrado. Quando $V_0 \rightarrow \infty$, E_1 crescerá, mas o fará de maneira muito lenta se comparada ao crescimento de V_0 . Isto é verdadeiro porque E_1 é determinado essencialmente pela exigência de que aproximadamente metade de uma oscilação da autofunção deve se ajustar ao comprimento do poço. Assim o parâmetro exponencial $k_{II} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, que determina o comportamento da autofunção nas regiões fora do poço, ficará muito grande à medida que V_0 fica muito grande, e a autofunção tenderá rapidamente a ir a zero fora do poço. No limite, $\psi_1(x)$ deve ser zero para todos $x < -a/2$ e para todos

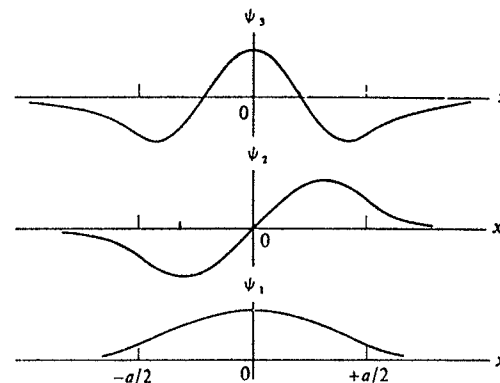


FIGURA 6-26. As três autofunções do poço quadrado da figura 6-25.

$x > +a/2$. Para um poço quadrado com paredes infinitamente altas, $\psi_1(x)$ tem a forma mostrada na figura 6-28. É evidente que este argumento é válido para todas as autofunções de um potencial deste tipo. Isto é, para todos os valores de n , em um poço de potencial quadrado infinito,

$$\psi_n(x) = 0 \quad x \leq -a/2 \quad \text{ou} \quad x \geq +a/2 \quad (6-65)$$

Esta condição para as autofunções do poço quadrado infinito só pode ser satisfeita se for violada, em $x = \pm a/2$, a exigência da seção 5-6, de que a derivada $d\psi_n(x)/dx$ seja contínua em todos os pontos; mas se o estudante for verificar o argumento que foi apresentado para justificar a exigência, verá que a derivada deve ser contínua apenas quando o potencial for finito.

6-8 O POÇO DE POTENCIAL QUADRADO INFINITO

O poço de potencial quadrado infinito é escrito como

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ ou } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6-66)$$

e está ilustrado na figura 6-29. Ele tem a característica de ser capaz de ligar uma partícula que tenha qualquer energia total finita $E \geq 0$. Na *mecânica clássica*, qualquer dessas energias é possível, mas na *mecânica quântica* apenas certos autovalores discretos E_n são possíveis.