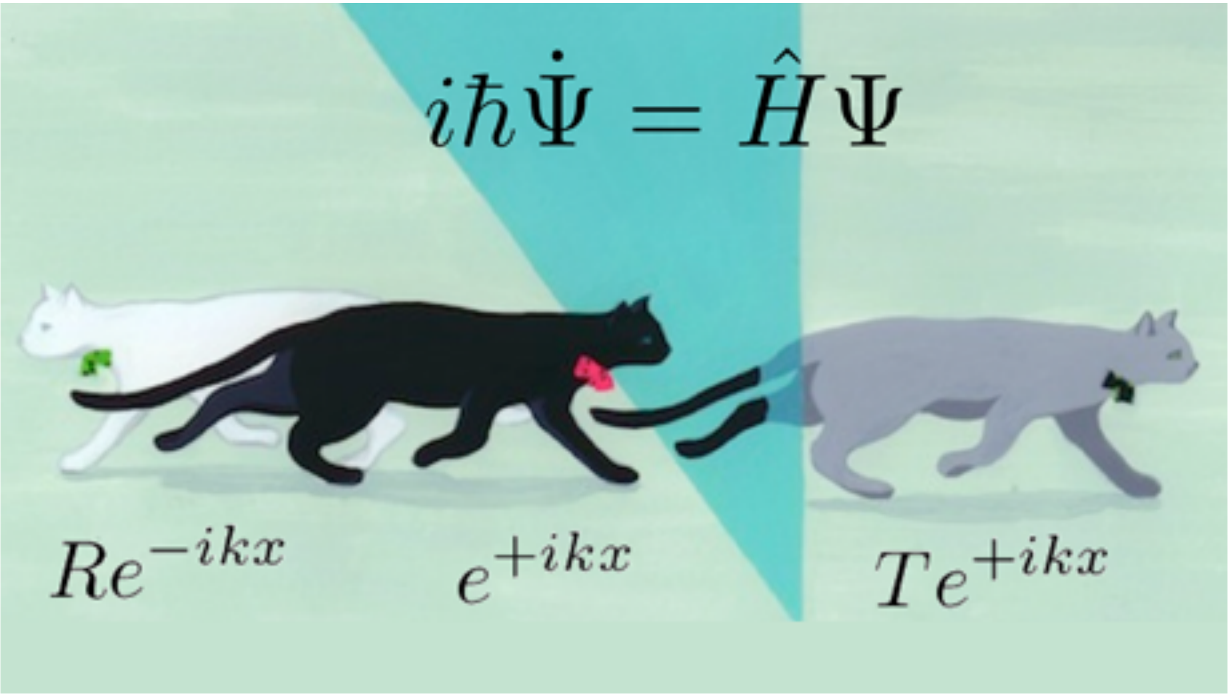
UFABC - Física Quântica - Curso 2017.3

Prof. Germán Lugones

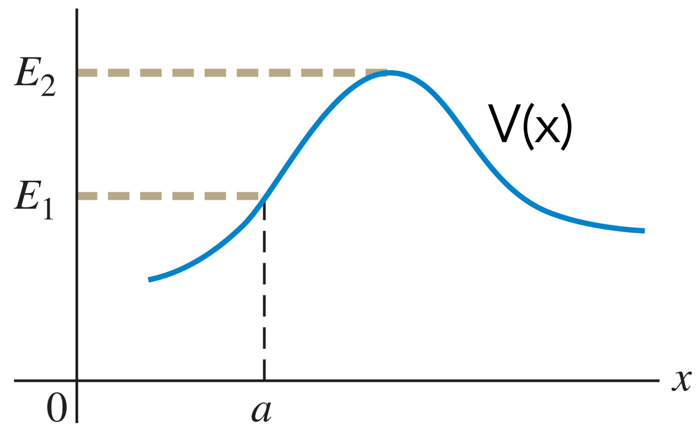
Aula 12

Barreira de potencial, efeito túnel, poço finito, e oscilador harmônico



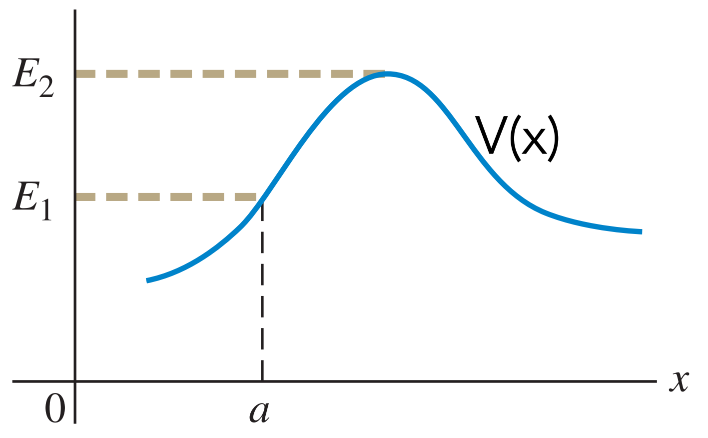
Barreira de potencial

Uma barreira de potencial é descrita por uma função de energia potencial com um máximo.



Na mecânica newtoniana clássica, se uma partícula está inicialmente ao lado esquerdo da barreira (que poderia ser uma montanha), e se a energia mecânica total é E_1, a partícula não pode se mover mais para o lado direito do ponto x=a.

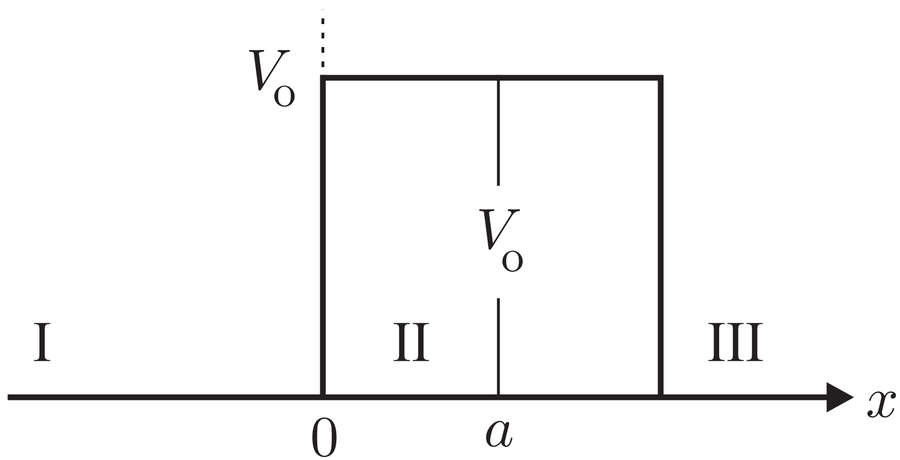
Caso ela fizesse isso, a energia potencial V seria maior que a energia total E e a energia cinética K=E–U seria negativa, o que seria impossível na mecânica clássica, uma vez que K =(1/2)mv^2 nunca poderá ser negativa.



Uma partícula da mecânica quântica comporta-se de forma diferente: se ela encontra uma barreira como a da Figura e possui energia menor que E_2, ela pode aparecer do outro lado. Esse fenômeno é chamado **tunelamento** ou **efeito túnel**.

Barreira de potencial retangular

Consideremos o espalhamento de um feixe de partículas de massa m e energia E, por uma barreira de potencial retangular de altura V_0 e largura a.



Nas regiões I e III a equação de Schrödinger pode ser escrita como:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

Nas região II equação de Schrödinger pode ser escrita como:

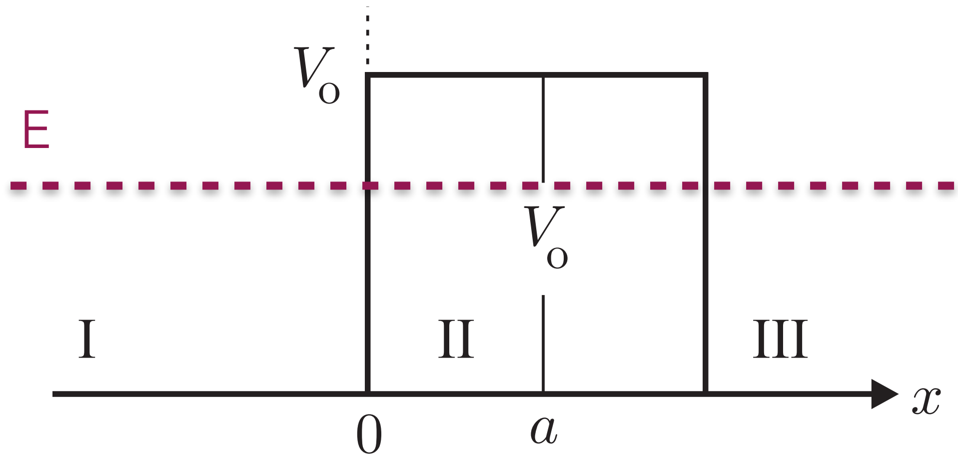
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + V_\circ\psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \overbrace{\frac{2m}{\hbar}\left[E - V_\circ\right]}\psi(x) = 0$$

Na região II, temos dois tipos de soluções:

- $E > V_\circ \quad \Longrightarrow \quad \psi(x) \sim e^{\pm ikx} \text{ com } \; k = \frac{\sqrt{2m(E - V_\circ)}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}$

- $E < V_\circ \quad \Longrightarrow \quad \psi(x) \sim e^{\pm\rho x} \; \text{ com } \; \rho = \frac{\sqrt{2m(V_\circ - E)}}{\hbar}$

Resolveremos primeiramente o caso com $E < V_0$:



Classicamente, uma partícula que incide desde a esquerda deve ser refletida com certeza em x=0. Veremos que no caso quântico, existe uma probabilidade não nula de que a partícula atravesse a barreira de potencial e passe para a região III. Esse fenômeno se denomina **efeito túnel**.

Para o caso em que E < V_0, as funções de onda nas três regiões são:

$$\psi_{\mathrm{I}} = \overbrace{Ae^{ik_\circ x}}^{\text{incidente}} + \overbrace{B^{-ik_\circ x}}^{\text{refeletida}} \qquad k_\circ = \sqrt{2mE}/\hbar \qquad (x < 0 \text{ e } V = 0)$$

$$\psi_{\mathrm{II}} = Ce^{\rho x} + D^{-\rho x} \qquad \rho = \sqrt{2m(V_\circ - E)}/\hbar \qquad (0 < x < a \text{ e } V = V_\circ)$$

$$\psi_{\mathrm{III}} = \underbrace{Fe^{ik_\circ x}}_{\text{transmitida}} \qquad (x > a \text{ e } V = 0)$$

Queremos determinar o coeficiente de transmissão dado por:

$$T = \frac{\psi^*_{III,trans}\psi_{III,trans}}{\psi^*_{I,inc}\psi_{III,inc}} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

As condições de contorno para a função de onda e a sua derivada são:

$$
\begin{cases}
\psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0) & \Rightarrow \quad A + B = C + D & (1) \\[2ex]
\psi'_{\mathrm{I}}(0) = \psi'_{\mathrm{II}}(0) & \Rightarrow \quad ik_\circ(A - B) = \rho(C - D) & (2) \\[2ex]
\psi_{\mathrm{II}}(a) = \psi_{\mathrm{III}}(a) & \Rightarrow \quad Ce^{\rho a} + De^{-\rho a} = Fe^{ik_\circ a} & (3) \\[2ex]
\psi'_{\mathrm{II}}(a) = \psi'_{\mathrm{III}}(a) & \Rightarrow \quad \rho(Ce^{\rho a} - De^{-\rho a}) = ikFe^{ik_\circ a} & (4)
\end{cases}
$$

Somando e subtraindo as Eqs. (3) e (4) temos:

$$
\begin{cases}
2Ce^{\rho a} = \left(1 + \frac{ik_\circ}{\rho}\right) Fe^{ik_\circ a} & (5) \\
2De^{\rho a} = \left(1 - \frac{ik_\circ}{\rho}\right) Fe^{ik_\circ a} & (6)
\end{cases}
$$

Somando e subtraindo as Eqs. (5) e (6) temos:

$$\begin{cases} 2\rho(C+D) = \left[(\rho + ik_\circ)e^{-\rho a} + (\rho - ik_\circ)e^{\rho a}\right] F e^{ik_0 a} & (7) \\ 2\rho(C-D) = \left[(\rho + ik_\circ)e^{-\rho a} - (\rho - ik_\circ)e^{\rho a}\right] F e^{ik_\circ a} & (8) \end{cases}$$

Mas, de acordo com as Eqs. (1) e (2) temos C+D = A+B e ρ(C–D) = i k_0(A–B). Substituindo nas Eqs. (7) e (8) temos:

$$\begin{cases} \left[(\rho + ik_\circ)e^{-\rho a} + (\rho - ik_\circ)e^{\rho a}\right] F e^{ik_0 a} = 2\rho(A+B) & (9) \\ \left[(\rho + ik_\circ)e^{-\rho a} - (\rho - ik_\circ)e^{\rho a}\right] F e^{ik_\circ a} = 2\rho = 2ik_\circ(A-B) & (10) \end{cases}$$

Agora combinamos as Eqs. (9) e (10) para eliminar B, e tentamos obter o quociente |F/A|, já que ele determina o coeficiente de transmissão T.

$$\frac{4A}{F}\, e^{-ik_\circ a} = e^{-\rho a}\left(\rho + ik_\circ\right)\overbrace{\left(\frac{1}{\rho}+\frac{1}{ik}\right)}^{(\rho+ik_\circ)/i\rho k_\circ} + e^{\rho a}\left(\rho - ik_\circ\right)\overbrace{\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{ik_\circ}\right)}^{-(\rho-ik_\circ)/i\rho k_\circ}$$

$$\begin{aligned} 4\,\frac{A}{F}\,(i\rho k_\circ)\, e^{-ik_\circ a} &= e^{-\rho a}\overbrace{\left(\rho+ik_\circ\right)^2}^{\rho^2+2i\rho k_\circ-k_\circ^2} - e^{\rho a}\overbrace{\left(\rho-ik_\circ\right)^2}^{\rho^2-2i\rho k_\circ-k_\circ^2} \\ &= 2i\rho k_\circ \underbrace{\left(e^{\rho a}+e^{-\rho a}\right)}_{2\cosh\rho a} - \left(\rho^2-k_\circ^2\right)\underbrace{\left(e^{\rho a}-e^{-\rho a}\right)}_{2\ \mathrm{senh}\,\rho a} \end{aligned}$$

$$\frac{A}{F}\, e^{-ik_\circ a} = \cosh\rho a - \frac{\left(\rho^2-k_\circ^2\right)}{2i\rho k_\circ}\ \mathrm{senh}\,\rho a$$

Logo:

$$\left|\frac{A}{F}\right|^2 = \underbrace{\cosh^2 \rho a}_{1+\mathrm{senh}^2\,\rho a} + \frac{\left(\rho^2 - k_\circ^2\right)^2}{4\rho^2 k_\circ^2}\mathrm{senh}^2\,\rho a$$

$$= 1 + \underbrace{\left[1 + \frac{\left(\rho^2 - k_\circ^2\right)}{4\rho^2 k_\circ^2}\right]}_{\frac{\left(\rho^2+k_\circ^2\right)^2}{4\rho^2 k_\circ^2}}\mathrm{senh}^2\,\rho a$$

$$\left|\frac{A}{F}\right|^2 = 1 + \boxed{\frac{\left(\rho^2 + k_\circ^2\right)}{4\rho^2 k_\circ^2}}\mathrm{senh}^2\,\rho a$$

Lembrando que:

$$\begin{cases} k_\circ^2 = 2mE/\hbar^2 \\ \rho^2 = 2m(V_\circ - E)/\hbar^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \left(\rho^2 + k_\circ^2\right)^2 = \left(2mV_\circ/\hbar^2\right)^2 \\ 4\rho^2 k_\circ^2 = 4\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^2 E(V_\circ - E) \end{cases}$$

temos

$$\boxed{\frac{\left(\rho^2 + k_\circ^2\right)^2}{4\rho^2 k_\circ^2}} = \frac{V_\circ^2}{4E(V_\circ - E)}$$

Assim, o coeficiente de transmissão fica:

$$\boxed{T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{V_\circ^2}{4E(V_\circ - E)}\ \mathrm{senh}^2\, \rho a\right]^{-1}}$$

Vemos que em geral T>0. Isto é, existe uma probabilidade de que a partícula que inicialmente estava do lado esquerdo da barreira possa ser encontrada do lado direito da barreira.

Essa probabilidade depende da espessura a da barreira e da energia E da partícula (totalmente cinética) em comparação com a altura da barreira V_0.

Casos particular: Consideremos o caso em que $E \ll V_0 \Rightarrow \rho a \gg 1$.

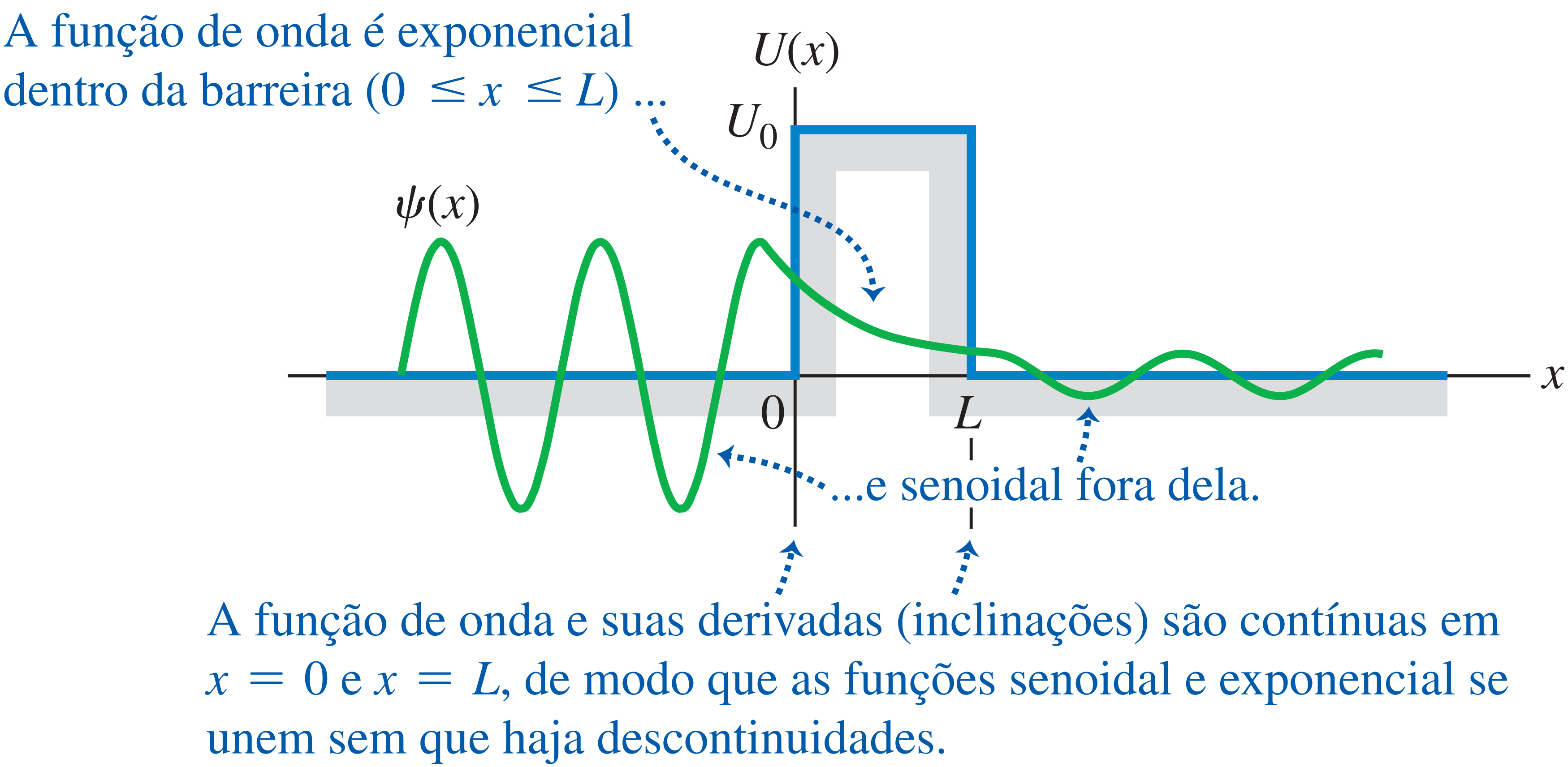
$$\lim_{\rho a \gg 1} \ \operatorname{senh}^2 \ \rho a \to \frac{e^{2\rho a}}{4} \gg 1$$

Portanto, o coeficiente de transmissão fica:

$$\lim_{E \ll V_\circ} \mathsf{T} = \frac{16E(V_\circ - E)}{V_\circ^2} \ e^{2\rho a} \ll 1$$

Isso indica que a probabilidade de penetração na barreira é muito pequena mas, dependendo da largura, algumas partículas do feixe atravessam a barreira.

Na Figura vemos uma função de onda possível para uma partícula tunelando através de uma barreira de energia potencial.



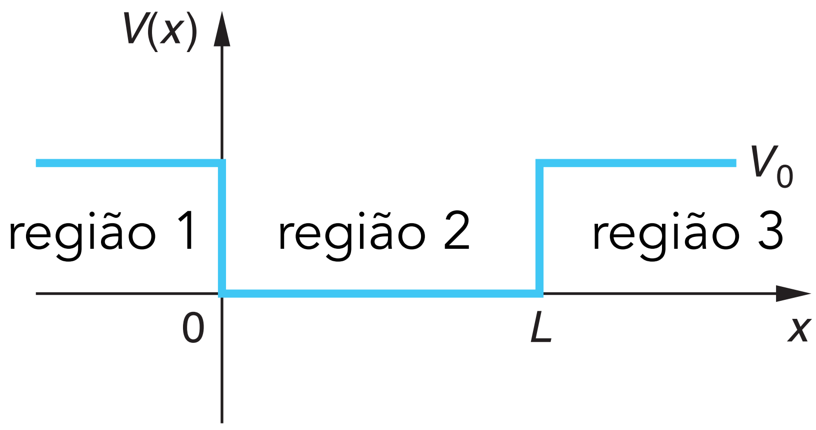
Partícula em uma caixa finita

Vamos considerar uma partícula imersa em um potencial da forma:

$$V(x) = 0 \quad \text{para } 0 < x < L$$
$$V(x) = V_0 \text{ para } x<0 \quad \text{e} \quad x>L$$

As soluções da Eq. de Schrödinger são bastante diferentes dependendo de se:

- caso 1: $E < V_0$
- caso 2: $E > V_0$



Vamos resolver agora o caso 1: $E < V_0$ e deixaremos o caso 2 para mais adiante.

Na região dentro do poço, 0<x<L, temos V(x)=0. Portanto, a equação de Schrödinger fica:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \qquad \Rightarrow \qquad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

Logo, a solução da equação diferencial na **região 2** é:

$$\psi_2(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

onde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Classicamente, uma partícula de massa m e energia E < V_0 encontra-se confinada dentro do poço finito. Contudo, a mecânica quântica permite que a partícula possa estar fora do poço.

Portanto, ψ(x) **não deve ser zero em x=0 e x=L.**

Nas **regiões 1 e 3** onde V(x) = V_0, a equação de Schrödinger fica:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) \qquad \Rightarrow \qquad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \underbrace{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}_{\equiv \alpha^2}\psi(x) = 0$$

Logo, a solução da equação diferencial nas **regiões 1 e 3** é da forma:

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

A função de onda deve ser finita, portanto:

- o termo contendo e^{kx} deve ser nulo na região 3, já que diverge quando x $\rightarrow +\infty$.
- o termo contendo e^{-kx} deve ser nulo na região 1, já que diverge quando x $\rightarrow -\infty$.

Assim sendo, as soluções nas regiões 1 e 3 devem ser:

$$\psi_1(x) = Ce^{\alpha x}$$
$$\psi_3(x) = De^{-\alpha x}$$

Condições de contorno: A função de onda $\psi(x)$ e a sua derivada primeira $d\psi(x)/dx$ devem ser contínuas já que $d^2\psi(x)/dx^2$ deve estar bem definida.

Isso leva às condições:

$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \Rightarrow \quad C = A + B$

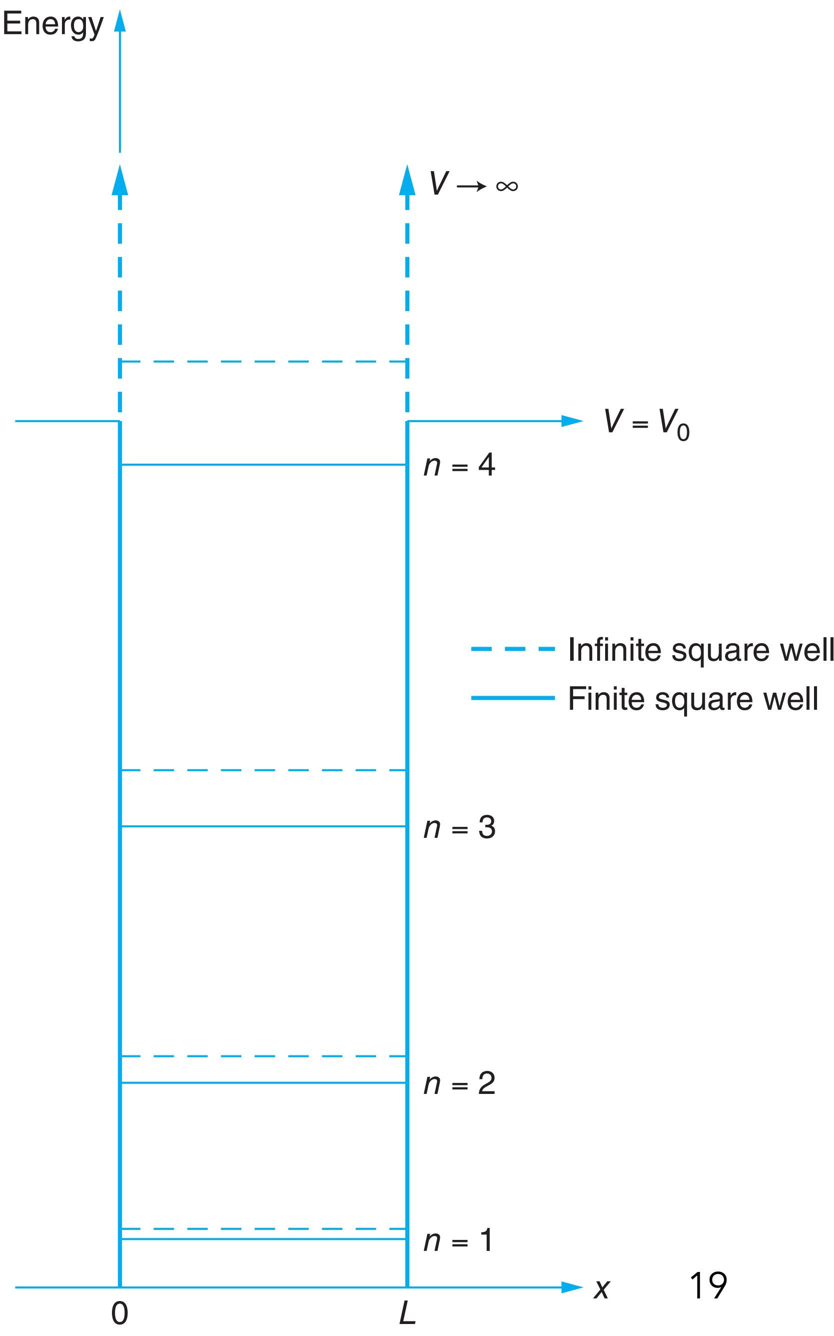
$\psi_2(L) = \psi_3(L) \quad \Rightarrow \quad Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = D\, e^{-\alpha L}$

$d\psi_1(0)/dx = d\psi_2(0)/dx \quad \Rightarrow \quad \alpha C = ik(A - B)$

$d\psi_2(L)/dx = d\psi_3(L)/dx \quad \Rightarrow \quad ik(Ae^{ikL} - Be^{-ikL}) = -\alpha D\, e^{-\alpha L}$

Os níveis de energia permitidos podem ser obtidos a partir das 4 equações anteriores, eliminando-se as incógnitas A, B, C e D.

No entanto, não é possível encontrar uma solução analítica para essas equações. Resolvendo-as através de métodos numéricos obtemos as energias mostradas na figura.



Oscilador Harmônico

Analisemos agora as soluções da equação de Schrödinger para o caso de uma partícula sujeita ao potencial unidimensional do tipo oscilador harmônico. O potencial é

$$V\left(x\right)=\frac{k}{2}x^{2}$$

e as soluções podem ser obtidas resolvendo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\,x^2}\psi\left(x\right)+\frac{k}{2}x^{2}\psi\left(x\right)=E\,\psi\left(x\right)$$

como se trata de uma situação onde há confinamento, pois a partícula está ligada pelo potencial de força restauradora, as energias formam um espectro discreto $\{E_n\}$. Para cada estado de energia haverá uma autofunção (i.e, função de onda) ψ_n correspondente.

Introduzindo-se uma variável adimensional

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

temos que

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - (\xi^2 - \kappa^2)\psi = 0 \qquad (✽)$$

onde $\kappa \equiv 2E/\ \omega$.

A resolução da Eq. (✽) está além do escopo deste curso. Um estudo bem mais completo do oscilador harmônico quântico pode ser encontrado nos livros-textos de Mecânica Quântica.

É possível mostrar que $\kappa=2n+1$, com $n=0,1,2,\ldots$, para que se obtenha soluções aceitáveis fisicamente, i.e. $\psi(x)$ tende a zero para $x \to \pm\infty$.

Decorre imediatamente desta condição a quantização da energia do sistema:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

As soluções da Eq. (✻) são dadas por

$$\psi_n(x) = C_n e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(x)$$

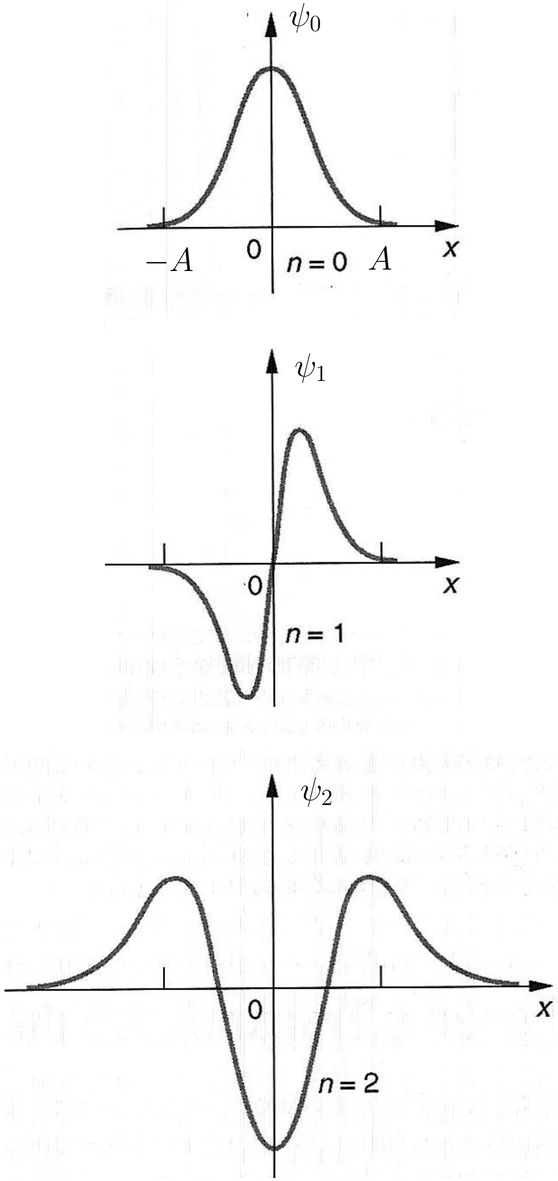
onde C_n são constantes de normalização, e as funções $H_n(\xi)$ são os **polinômios de Hermite**.

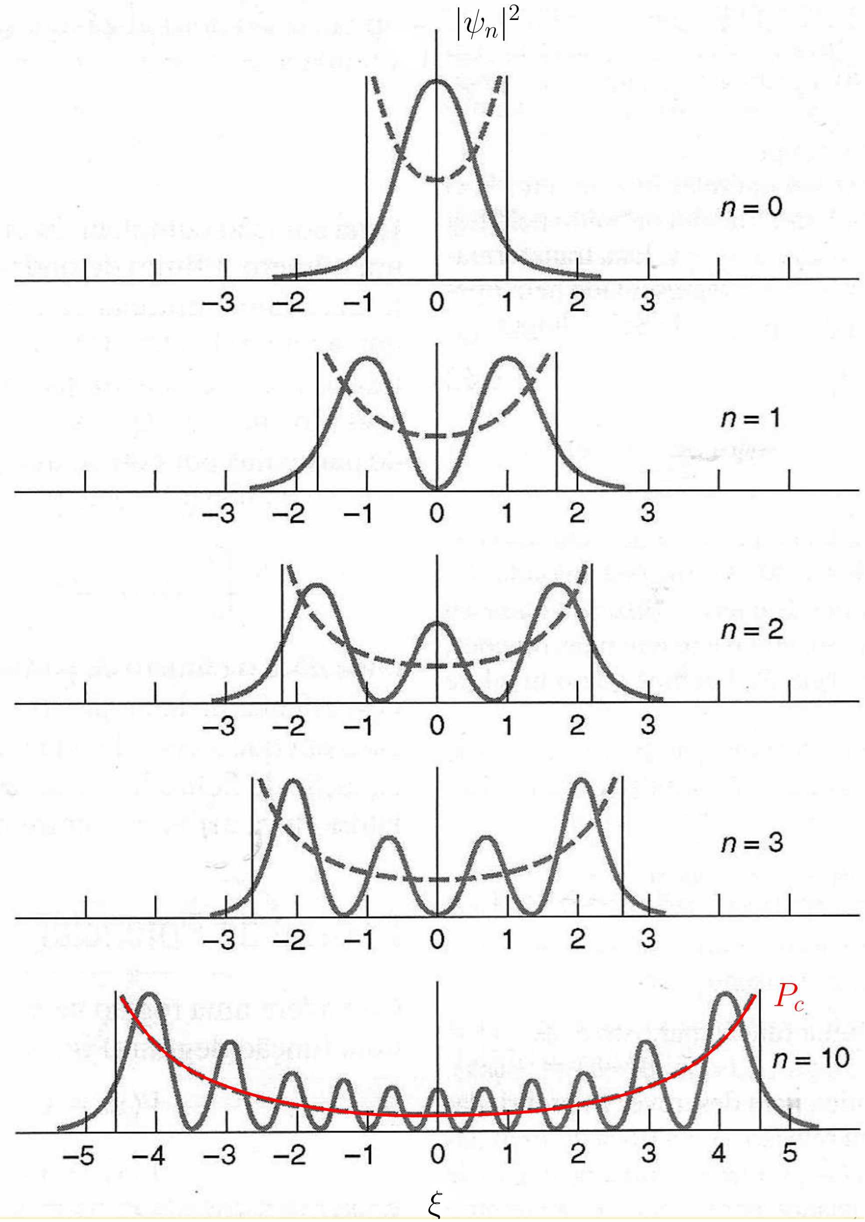
Os primeiros polinômios de Hermite são:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1 \\ H_1(y) &= 2y \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12 \end{aligned}$$

As funções de onda para n=0, 1, 2 são:

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= A_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar} \\ \psi_1(x) &= A_1 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} e^{-m\omega x^2/2\hbar} \\ \psi_2(x) &= A_2 \left(1 - \frac{2m\omega x^2}{\hbar}\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar} \end{aligned}$$


ψ_0
$-A$
0
$n = 0$
A
x
ψ_1
0
x
$n = 1$
ψ_2
0
x
$n = 2$


$|\psi_n|^2$
$n = 0$
–3 –2 –1 0 1 2 3
$n = 1$
–3 –2 –1 0 1 2 3
$n = 2$
–3 –2 –1 0 1 2 3
$n = 3$
–3 –2 –1 0 1 2 3
P_c
$n = 10$
–5 –4 –3 –2 –1 0 1 2 3 4 5
ξ