AULA 8

O degrau de potencial. Caso I: energia menor que o degrau

Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico ao caso de uma partícula quântica que incide sobre um potencial $V(x)$ que tem a forma de um degrau, ou seja, tem um valor 0 para $x < 0$ e um valor $V_0 > 0$ para $x > 0$. Vamos considerar inicialmente o caso em que a energia da partícula é menor que a altura do degrau.

objetivo

- mostrar que, no caso da energia E da partícula ser menor do que a altura do degrau (V_0), existe a possibilidade de encontrar a partícula na região classicamente proibida.

Pré-requisito

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise as Aulas 6 e 7 desta disciplina.

O DEGRAU DE POTENCIAL

Vamos estudar agora o caso de uma partícula de massa m que se movimenta num potencial $V(x)$, em que $V(x) = 0$ para $x < 0$ e $V(x) = V_0 > 0$ para $x > 0$, como ilustra a **Figura 8.1**. Este é o chamado *degrau de potencial* ou *potencial degrau*. Podemos supor, por simplicidade, que a partícula incide a partir da esquerda, como mostra a **Figura 8.1**:

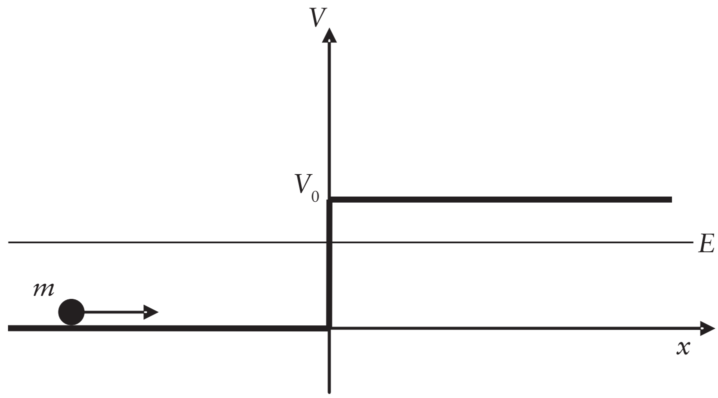

Figura 8.1: Uma partícula quântica de massa *m* que incide em um degrau de potencial com a energia menor que a altura do degrau.

Note que, se V_0 fosse igual a zero, voltaríamos ao caso da partícula livre, discutido na Aula 7. Para o degrau de potencial, da mesma forma que no caso da partícula livre, não existem soluções da equação de Schrödinger com energia $E < 0$, já que isso obrigaria a função de onda $\psi(x)$ a divergir para $x \to +\infty$ e/ou $x \to -\infty$. Assim, podemos dividir nosso estudo em dois casos: $0 < E < V_0$, ou seja, a energia da partícula é menor do que a altura do degrau de potencial, e $E > V_0$, em que a energia é maior do que o degrau. Nesta aula, discutiremos o primeiro caso, enquanto o segundo caso será discutido na próxima aula.

Note que o potencial é contínuo (e constante!) em todo o espaço, sofrendo apenas uma descontinuidade em $x = 0$. Este é o primeiro de uma série de exemplos que iremos estudar de potenciais com essas características, ou seja, "contínuos por partes". A estratégia para solucionar esse tipo de problema é sempre a mesma: resolvemos a equação de Schrödinger separadamente em cada região onde o potencial é contínuo. Depois, tentamos ajustar as diferentes soluções, para que elas sejam consistentes nos pontos de descontinuidade do potencial. Já veremos como isso funciona na prática.

Antes de iniciarmos nosso estudo, vamos lembrar o que acontece no domínio da Física Clássica, ou seja, para sistemas macroscópicos. No primeiro caso (energia menor que a barreira), a partícula clássica não pode penetrar na região do degrau ($x > 0$), sendo refletida elasticamente na origem (*ponto de retorno*). No segundo caso (energia maior que a barreira), a partícula clássica passa sem ser refletida, diminuindo apenas a sua energia cinética e, portanto, a sua velocidade de movimento. Parece simples, não? Pois bem, veremos que, no domínio da mecânica quântica, as coisas não são tão simples assim... É isso que as torna ainda mais interessantes!

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER NO CASO $E < V_0$

Como dissemos, nossa estratégia é tratar separadamente as regiões $x < 0$ e $x > 0$. Para $x < 0$, onde o potencial é nulo, a equação de Schrödinger pode ser colocada da mesma forma do que para a partícula livre, vista na aula anterior. Portanto, na região esquerda, a solução tem a forma:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0 \qquad (8.1)$$

em que $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

Para $x > 0$, a equação de Schrödinger adquire uma forma um pouco diferente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x), \qquad (8.2)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - K^2\psi(x) = 0\,, \qquad (8.3)$$

em que $K = \sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}/\hbar$.

Essa equação diferencial é também nossa conhecida dos cursos de cálculo. Sabemos que a sua solução tem a seguinte forma geral:

$$\psi(x) = Ce^{Kx} + De^{-Kx},\ x > 0\,. \qquad (8.4)$$

Porém, lembramos que, para que a função de onda seja aceitável, ela não pode ir para infinito quando $x \to +\infty$. Como K é positivo, isso implica que o coeficiente C deve ser nulo e, portanto, a solução geral simplifica-se:

$$\psi(x) = De^{-Kx}, \quad x > 0 \qquad (8.5)$$

Portanto, temos a forma geral da solução em $x < 0$ (Equação (8.1)) e $x > 0$ (Equação (8.5)). Como havíamos programado, resta agora fazer a "costura" das duas soluções em $x = 0$, ou seja, no ponto de descontinuidade do potencial. Como fazer isso? Bem, sabemos que a função de onda $\psi(x)$ deve satisfazer a condição de ser contínua e ter derivada contínua em todos os pontos do eixo x. As expressões (8.1) e (8.5) já garantem essas condições para $x < 0$ e para $x > 0$, falta apenas impô-las para $x = 0$. Para que a função de onda seja contínua nesse ponto, o valor das duas expressões em $x = 0$ terá de ser o mesmo, levando à condição:

$$A + B = D. \qquad (8.6)$$

Vamos agora impor a condição de continuidade da derivada de $\psi(x)$ em $x = 0$. As derivadas de (8.1) e (8.5) são, respectivamente,

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}, \quad x < 0 \qquad (8.7)$$

e

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -KDe^{-Kx}, \quad x > 0. \qquad (8.8)$$

Dessa forma, a continuidade da derivada da função de onda em $x = 0$ implica a condição

$$ik(A - B) = -KD. \qquad (8.9)$$

Vemos que a solução completa de nosso problema, expressa pelas Equações (8.1) e (8.5), depende de três constantes arbitrárias: *A*, *B* e *D*. As condições de continuidade da função de onda e de sua derivada permitiram-nos obter as Equações (8.6) e (8.9), que relacionam estas três constantes. Para determinar completamente essas constantes, precisaríamos de uma terceira relação, que pode ser obtida pela condição de normalização da função de onda.

Conseguimos obter duas equações, (8.6) e (8.9), que relacionam as três constantes que queremos determinar. Assim, podemos, por exemplo, determinar A e B como função de D:

$$A = \frac{k + iK}{2k} D, \;\; B = \frac{k - iK}{2k} D. \qquad (8.10)$$

ATIVIDADE

1. Mostre que *A* e *B* têm o mesmo módulo.

____

____

RESPOSTA COMENTADA

Podemos definir $z = \frac{k + iK}{2k}$*, de modo que* $A = zD$ *e* $B = z^* D$

Escrevendo A, B, z e D em termos de seus módulos e fases, temos

$$|A| = |z||D| = |z^*||D| = |B|.$$

Como A e B têm o mesmo módulo, a densidade de corrente de probabilidade j associada à onda plana se propagando para a direita, $j = v_g|A|^2$, calculada na Atividade 3 da Aula 7, é igual à da onda plana se propagando para a esquerda, $j = v_g|B|^2$. Dessa forma, a densidade de corrente total, calculada na Atividade 5 da Aula 7, será nula. Se interpretarmos a onda plana se propagando para a direita como uma onda *incidente* sobre o degrau de potencial, então a onda se propagando para a esquerda deve ser considerada como a onda *refletida*. Se definirmos o coeficiente de reflexão como o quociente da densidade de corrente de probabilidade refletida sobre a densidade de corrente de probabilidade incidente,

$$R = \frac{v_g |B|^2}{v_g |A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1\,, \qquad (8.11)$$

vemos que o coeficiente de reflexão R é igual a 1. Portanto, teremos reflexão total da onda de probabilidade incidente sobre o degrau de potencial. Isto concorda perfeitamente com as previsões da mecânica clássica: partículas com energia $E < V_0$ são sempre refletidas pelo degrau de potencial.

Se escrevermos os coeficientes complexos A e B em termos de seus módulos e fases, ou seja, $A = |A| e^{i\theta_A}$ e $B = |B| e^{i\theta_B}$, e usando o fato de A e B terem o mesmo módulo, obteremos

$$\frac{B}{A} = \frac{|B|}{|A|} e^{i(\theta_B - \theta_A)} = e^{i\alpha}, \qquad (8.12)$$

em que $\alpha = \theta_B - \theta_A$ é a diferença entre os ângulos de fase das ondas refletida e incidente, que se conhece também como *deslocamento de fase* da onda refletida.

ATIVIDADES

2. Usando as Equações (8.10), calcule o deslocamento de fase α da onda refletida pelo degrau de potencial.

RESPOSTA COMENTADA

Usando as Equações (8.10) e tomando a razão B/A, obteremos:

$$\frac{B}{A} = \frac{k - iK}{k + iK} = \frac{e^{i\left[\tan^{-1}(-K/k)\right]}}{e^{i\left[\tan^{-1}(K/k)\right]}} = e^{i\left[2\tan^{-1}(-K/k)\right]} = e^{i\alpha},$$

de modo que $\alpha = -2\tan^{-1}(K/k)$.

3. Mostre que a função de onda para o degrau de potencial pode ser escrita na forma:

$$\psi(x) = 2Ae^{i\alpha/2}\cos(kx - \alpha/2), x < 0$$
$$\psi(x) = 2Ae^{i\alpha/2}\cos(\alpha/2)e^{-Kx}, \; x > 0$$

RESPOSTA COMENTADA

Substituindo $B = Ae^{i\alpha}$ *na Equação (8.1), temos:*

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Ae^{i\alpha}e^{-ikx} = Ae^{i\alpha/2}\left[e^{i(kx-\alpha/2)} + e^{-i(kx-\alpha/2)}\right] = 2Ae^{i\alpha/2}\cos(kx - \alpha/2).$$

Esta é a expressão para a função de onda na região $x < 0$*. Substituindo agora* $B = Ae^{i\alpha}$ *na Equação (8.9), o resultado é:*

$$ik\left(A - Ae^{i\alpha}\right) = -KD \Rightarrow D = \frac{ikA\left(e^{i\alpha} - 1\right)}{K}.$$

Substituindo essa relação na Equação (8.5), temos:

$$\psi(x) = \frac{ikA\left(e^{i\alpha} - 1\right)}{K}e^{-Kx} = \frac{ikAe^{i\alpha/2}\left(e^{i\alpha/2} - e^{-i\alpha/2}\right)}{K}e^{-Kx} = \frac{-2k}{K}Ae^{i\alpha/2}\mathrm{sen}\left(\alpha/2\right)e^{-Kx}.$$

Sabendo ainda, conforme calculado na Atividade 2, que $-\frac{K}{k} = \tan\left(\alpha/2\right)$*, obtemos finalmente, para* $x > 0$*:*

$$\psi(x) = 2Ae^{i\alpha/2}\frac{\mathrm{sen}\left(\alpha/2\right)}{\tan\left(\alpha/2\right)}e^{-Kx} = 2Ae^{i\alpha/2}\cos\left(\alpha/2\right)e^{-Kx}$$

ANÁLISE FÍSICA DA SOLUÇÃO E O EFEITO DE PENETRAÇÃO DE BARREIRA

Estamos agora em condições de interpretar a função de onda $\psi(x)$ para o degrau de potencial no caso $E < V_0$. Veja que, para $x < 0$, a superposição das ondas de igual amplitude, propagando-se para a direita e para a esquerda, causa uma onda estacionária. A densidade de probabilidade do lado esquerdo, obtida a partir da expressão para a função de onda obtida na Atividade 3, será:

$$p(x) = 4|A|^2\cos^2\left(kx - \alpha/2\right),\ x < 0. \qquad (8.13)$$

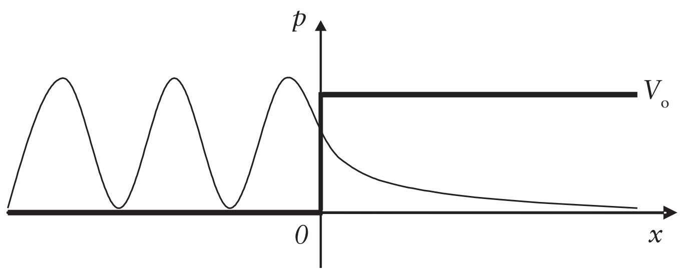

Figura 8.2: Densidade de probabilidade para uma partícula quântica em um degrau de potencial. A partícula incide da esquerda com E < V_0.

Essa função está mostrada esquematicamente na **Figura 8.2**, do lado esquerdo. Note que, nessa região, a amplitude de probabilidade apresenta um comportamento oscilatório que reflete o efeito de interferência entre as ondas incidente e refletida. Os máximos de $p(x)$ estão separados por intervalos $\Delta x = \pi/k$, que corresponde à metade do comprimento de onda de de Broglie da partícula de massa m e energia E incidente sobre o degrau de potencial. Vemos que a densidade de probabilidade é análoga à encontrada para a partícula livre na Atividade 4 da Aula 7. O efeito do potencial aparece apenas na defasagem associada à constante α.

Vamos agora considerar a função de onda na região $x > 0$. Vemos, a partir da Equação (8.5), que a densidade de probabilidade $p(x)$ será

$$p(x) = |D|^2 e^{-2Kx} = 4|A|^2 \cos^2(\alpha/2) e^{-2Kx}, \; x > 0. \quad (8.14)$$

Vemos aqui um efeito muito interessante: a probabilidade de encontrarmos a partícula dentro da região $x > 0$ é não-nula. Isto seria impossível pela Mecânica Clássica, pois, nessa região, a energia total da partícula, E, é menor do que o valor do potencial, V_0. Por este motivo, essa região é dita *classicamente proibida*. Perceba, pela **Figura 8.2**, que a probabilidade de encontrarmos a partícula em $x > 0$ decai exponencialmente à medida que nos afastamos da origem. Este fenômeno não-clássico é chamado *penetração de barreira* e será discutido várias vezes nas próximas aulas, por se tratar de um dos efeitos quânticos mais importantes. Note ainda que esse efeito não é inconsistente com o fato, expresso pela Equação (8.11), de que a partícula é refletida, com 100% de probabilidade, pela barreira. Poderíamos formular a seguinte analogia clássica para descrever o movimento da partícula: ela vem da esquerda, penetra um pouco na região proibida e, depois, com certeza, retorna para o lugar de onde veio.

Apesar de parecer bastante exótico pela visão da mecânica clássica, o efeito de penetração de barreira já era um velho conhecido da física ondulatória. Por exemplo, quando uma onda luminosa incide de um meio de índice de refração maior para outro com índice de refração menor, dependendo do ângulo de incidência, pode ocorrer o efeito de reflexão total da luz. Porém, em perfeita analogia com o efeito quântico de penetração de barreira, o campo eletromagnético ondulatório da luz penetra um pouco na região com índice de refração menor, decaindo exponencialmente quando a distância até a interface entre os dois meios aumenta. Essas ondas penetrantes são conhecidas como ondas evanescentes. Dessa forma, o efeito de penetração de barreira pode ser entendido como mais uma manifestação da natureza ondulatória da matéria.

ATIVIDADE

4. Mostre, a partir da Equação (8.5), que a densidade de corrente de probabilidade j é nula para $x > 0$.

____

____

RESPOSTA COMENTADA

Usamos a definição de j(x) no caso estacionário, obtida na Aula 6:

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi(x)\frac{d\psi^*(x)}{dx} - \psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}\right].$$

Substituindo nesta expressão a função de onda na região $x > 0$, $\psi(x) = De^{-Kx}$, obteremos:

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m}\left[De^{-Kx}(-K)D^*e^{-Kx} - D^*e^{-Kx}(-K)De^{-Kx}\right] = 0.$$

O resultado da Atividade 4 era de se esperar. De fato, como vimos na Aula 6, em qualquer situação estacionária (potencial independente do tempo), a densidade de corrente de probabilidade é constante para todo x. Como vimos anteriormente que a densidade de corrente probabilidade é nula do lado esquerdo da barreira, ela deverá ser também nula do lado direito. É importante notar que esse resultado (que a densidade de corrente de probabilidade é nula) é válido apenas no caso estudado nesta aula, em que $E < V_0$. No caso $E > V_0$, a ser estudado na Aula 9, a densidade de corrente de probabilidade será constante, mas não-nula.

ATIVIDADES FINAIS

1. Dissemos que a penetração de barreira é um fenômeno quântico. Será que ela não pode mesmo ocorrer com partículas macroscópicas, ainda que muito pequenas? Vamos considerar um grão de poeira, de massa $m = 1 \times 10^{-14}$ kg, com uma velocidade $v = 10^{-3}$ m/s. Essa é uma velocidade típica da agitação térmica de uma partícula desse tamanho. Suponha que a partícula incida sobre um degrau de potencial com altura duas vezes maior que sua energia cinética. Qual a distância de penetração na barreira em que a amplitude de probabilidade de se encontrar a partícula caiu para 1% de seu valor na origem?

___

___

RESPOSTA COMENTADA

A amplitude de probabilidade de se encontrar a partícula na região classicamente proibida é dada pela Equação (8.14): $p(x) = |D|^2 e^{-2Kx},\ x > 0.$ *A partir dela, podemos calcular a distância* Δx*, para que a amplitude de probabilidade caia a 1 % de seu valor em* $x = 0$*:*

$$\frac{p(\Delta x)}{p(0)} = \mathrm{e}^{-2K\Delta x} = 0,01 \Rightarrow$$

$$\Delta x = \frac{ln\,(100)}{2K}$$

Basta então calcularmos $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}\Big/\hbar$*. A partir dos dados do problema, a energia da partícula é* $E = \dfrac{1}{2}mv^2$*, e a altura do degrau é duas vezes maior,* $V_0 = 2E = mv^2$*. Assim, temos*

$$K = \sqrt{2m(V_0 - E)}\Big/\hbar = mv/\hbar = 9,5 \times 10^{16}\ m^{-1}$$

com o que podemos finalmente obter

$$\Delta x = 2,4 \text{ x } 10^{-17}\,\mathrm{m}\ !$$

Esta distância de penetração é 10^{-7} *vezes menor do que o tamanho de um átomo, de modo que não há qualquer esperança de que a penetração de partículas macroscópicas (clássicas) por barreiras de potencial seja verificada experimentalmente.*

2. Um elétron no interior de um metal pode, aproximadamente, ser descrito como uma partícula livre. Porém, ao tentar escapar do metal para o vácuo, este elétron sofre a atração das cargas positivas do metal, de modo que há uma barreira de energia para que isso aconteça. A energia adicional ($V_0 - E$) que o elétron teria de ganhar para superar a barreira nada mais é que a função trabalho do metal, nossa conhecida do efeito fotoelétrico (Aula 8 de Física 4B). No cobre, a função trabalho vale 4 eV. Estime, como na Atividade anterior, a distância de penetração de um elétron do cobre, para a região de vácuo, de modo que a amplitude de probabilidade caia para 1% de seu valor inicial.

RESPOSTA COMENTADA

Continuam valendo as mesmas relações encontradas na atividade anterior. Utilizando agora o valor da massa do elétron, $m = 9{,}11\times10^{-31}$ kg, encontramos a constante de decaimento K:

$$K = \sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}\Big/\hbar = 1{,}0\times10^{10}\,\mathrm{m}^{-1},$$

de modo que a amplitude de probabilidade cai para 1% a uma distância Δx dada por:

$$\Delta x = \frac{ln(100)}{2K} = 2{,}3\ \mathring{\mathrm{A}}.$$

Esta distância é da ordem das dimensões atômicas. Será que poderia ser medida? Veremos nas próximas aulas!

RESUMO

Um degrau de potencial é definido por uma energia potencial nula para $x > 0$ e igual a uma constante V_0 para $x > 0$. Se uma partícula incide a partir da esquerda com energia menor que a altura do degrau, essa partícula é refletida com 100% de probabilidade. Porém, consegue penetrar um pouco na região classicamente proibida.

INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, vamos resolver o segundo caso do degrau de potencial, em que a partícula incidente tem energia maior que a barreira. Veremos que, neste caso, a partícula poderá ser transmitida através do degrau, mas, em desacordo com a mecânica clássica, ainda restará uma probabilidade de que ela seja refletida!