

A barreira de potencial: casos $E < V_0$ e $E > V_0$

Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico ao caso de uma partícula que incide sobre uma barreira de potencial, em que a energia potencial tem um valor 0 para $x < 0$ e para $x > a$, e um valor $V_0 > 0$ para $0 < x < a$.

objetivos

Esperamos que, após esta aula, você seja capaz de:

- mostrar que, no caso de a energia E da partícula ser menor do que a altura da barreira, existe a possibilidade de a partícula atravessar a barreira (*efeito túnel*), em contraste com o comportamento de uma partícula clássica;
- comprovar que, no caso de a energia E da partícula ser maior do que a altura da barreira, existe a possibilidade de a partícula ser refletida, o que também está em contraste com as previsões clássicas;
- aplicar as regras da mecânica quântica para calcular as probabilidades de reflexão e transmissão em cada caso.

Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise as Aulas 8 e 9 desta disciplina e, também, os conceitos de reflexão e transmissão de ondas na interface entre duas regiões com índices de refração diferentes (Aula 6 de Física 4A).

A BARREIRA DE POTENCIAL

Barreiras de potencial são muito comuns no dia-a-dia. Pense em um carro de montanha-russa prestes a subir uma ladeira. Ele somente chegará ao cume se tiver energia cinética suficiente para vencer a barreira de energia potencial gravitacional imposta pela ladeira. Caso contrário, será *refletido* pela barreira, movimentando-se no sentido oposto ao inicial. Na Física Quântica, a transmissão e a reflexão de partículas por barreiras de potencial são também muito importantes, sendo responsáveis por diversos fenômenos interessantes e aplicações práticas.

Trataremos o caso de uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira, definida pelo seguinte perfil de energia potencial:

$$\begin{aligned} V(x) &= 0, & x < 0 \\ V(x) &= V_0, & 0 < x < a \\ V(x) &= 0, & x > a \end{aligned} \quad (11.1)$$

em que o valor de V_0 é positivo. Esta barreira está mostrada na **Figura 11.1**. A energia potencial V_0 define a altura da barreira e a distância a define sua largura. Trata-se de um modelo bastante simplificado para as barreiras reais, conhecido como “barreira retangular”. No entanto, veremos que é possível extrair deste modelo simples todos os comportamentos físicos mais relevantes, e que são comuns a todas as barreiras de potencial existentes na natureza, com a vantagem de que a barreira retangular apresenta uma simplicidade matemática muito maior.

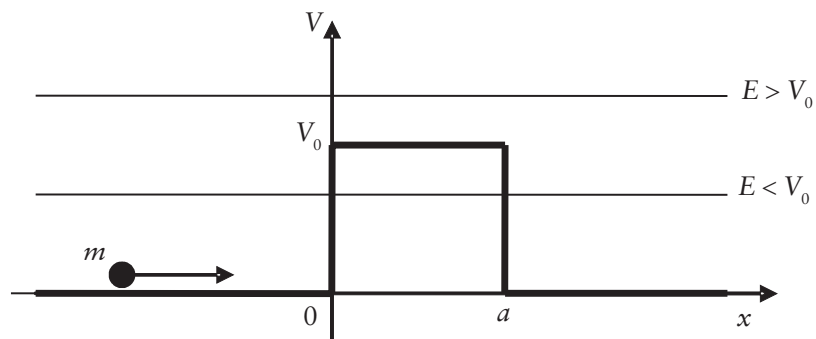


Figura 11.1: Uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira de potencial. A figura mostra os dois casos possíveis: $E < V_0$ (energia menor que a altura da barreira) e $E > V_0$ (energia maior que a altura da barreira).

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER NAS REGIÕES $x < 0$ E $x > a$

Pelos mesmos argumentos utilizados para a partícula livre e para o degrau de potencial, sabemos que não existe solução se a energia total da partícula for negativa. Portanto, podemos considerar apenas a situação em que $E > 0$. Nas regiões $x < 0$ e $x > a$, a partícula se movimenta livremente, de modo que a solução geral da equação de Schrödinger nessas duas regiões é dada por:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0 \\ \psi(x) &= Ce^{ikx} + De^{-ikx}, & x > a\end{aligned}\quad (11.2)$$

em que A , B , C e D são constantes, em geral complexas, e, da mesma forma que nas Aulas 8 e 9, o vetor de onda é $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

Também como nas Aulas 8 e 9, vamos considerar a situação em que a partícula incide sobre a barreira de potencial pelo lado esquerdo, como indicado na **Figura 11.1**. Nesse caso, do lado direito, não teremos uma onda se propagando para a esquerda, e portanto $D = 0$ na Equação (11.2). Como no caso do degrau de potencial, o coeficiente A representa a amplitude da onda de probabilidade incidente, B a da refletida e C a da transmitida, todas com o mesmo valor do vetor de onda k e, portanto, o mesmo valor do comprimento de onda de de Broglie.

A densidade de corrente de probabilidade j será constante, como em todos os casos estacionários, e terá como valor:

$$j = v_g (|A|^2 - |B|^2) = v_g |C|^2, \quad (11.3)$$

em que, como definido anteriormente, $v_g = \hbar k / m$ é a velocidade da partícula, ou velocidade de grupo. De forma análoga ao caso do degrau de potencial, podemos definir os coeficientes de reflexão R e de transmissão T como:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|C|^2}{|A|^2}, \quad (11.4)$$

em que foi utilizado o fato de v_g ser a mesma do lado direito e do esquerdo da barreira, diferentemente do que aconteceu no estudo do degrau de potencial.

Até agora, estudamos a solução da equação de Schrödinger nas regiões $x < 0$ e $x > a$, e tudo que dissemos é válido tanto para o caso da energia total da partícula ser menor do que a altura da barreira, $E < V_0$, ou maior do que a mesma, $E > V_0$. Para completar nosso estudo, teremos de buscar as soluções também na região interna à barreira, $0 < x < a$. Para tanto, será necessário considerar separadamente os casos $E < V_0$ e $E > V_0$.

Antes de iniciarmos, vamos lembrar mais uma vez o que acontece no domínio da Física Clássica, ou seja, para sistemas macroscópicos. No primeiro caso (energia menor que a barreira), a partícula clássica deveria ser simplesmente refletida pela barreira. Já no segundo caso (energia maior que a barreira), a partícula clássica passaria sem ser refletida, diminuindo sua energia cinética quando estivesse na região da barreira, mas recuperando sua velocidade inicial depois de atravessá-la. Mais uma vez, veremos que a Física Quântica nos leva a resultados diferentes dos previstos classicamente.

SOLUÇÃO COMPLETA NO CASO $0 < E < V_0$

Lembrando que em $0 < x < a$ a energia potencial vale $V(x) = V_0$ e definindo, como na Aula 8, $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, escrevemos a solução da equação de Schrödinger na região da barreira:

$$\psi(x) = Fe^{Kx} + Ge^{-Kx}, \quad 0 < x < a \quad (11.5)$$

Combinando as Equações (11.2) e (11.5), podemos relacionar as constantes A, B, C, F e G pelas condições de continuidade de $\psi(x)$ e de sua derivada nos pontos $x = 0$ e $x = a$. Para $x = 0$, encontramos:

$$\begin{aligned} A + B &= F + G \\ ik(A - B) &= K(F - G) . \end{aligned} \quad (11.6)$$

Já para $x = a$, temos:

$$\begin{aligned} Ce^{ika} &= Fe^{Ka} + Ge^{-Ka} \\ ikCe^{ika} &= K(Fe^{Ka} - Ge^{-Ka}) . \end{aligned} \quad (11.7)$$

Podemos eliminar F e G das Equações (11.6) e (11.7) e calcular as relações B/A e C/A . O resultado, cuja obtenção sugerimos como uma exercício opcional, nos leva aos seguintes coeficientes de reflexão e transmissão:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4k^2 K^2}{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(Ka)} \right]^{-1}$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(k^2 + K^2)^2 \sinh^2(Ka)}{4k^2 K^2} \right]^{-1} \quad (11.8)$$

ATIVIDADES



1. Verifique, a partir da Equação (11.8), que $R + T = 1$.

RESPOSTA COMENTADA

Note que as expressões para R e T são da forma $R = \left[1 + \frac{a}{b} \right]^{-1}$ e $T = \left[1 + \frac{b}{a} \right]^{-1}$

em que, nesse caso em particular, $a = 4k^2 K^2$ e $b = (k^2 + K^2)^2 \sinh^2(Ka)$.

Efetuada a soma de R e T , temos:

$$R + T = \left[1 + \frac{a}{b} \right]^{-1} + \left[1 + \frac{b}{a} \right]^{-1} = \frac{b}{a+b} + \frac{a}{a+b} = 1.$$

2. Mostre que, no limite em que $Ka \gg 1$, o coeficiente de transmissão

se simplifica: $T = \frac{16k^2 K^2}{(k^2 + K^2)^2} e^{-2Ka}$.

RESPOSTA COMENTADA

Partindo da Equação (10.8) e usando o resultado $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$,

de modo que $\lim_{x \rightarrow \infty} \sinh(x) = \frac{e^x}{2}$, obtemos:

$$T \approx \left[1 + \frac{(k^2 + K^2)^2 e^{2Ka}}{16k^2 K^2} \right]^{-1} \approx \frac{16k^2 K^2}{(k^2 + K^2)^2} e^{-2Ka}.$$

Note, portanto, que o coeficiente de transmissão, nessas condições, apresenta um decaimento exponencial com a largura da barreira. Perceba a relação entre esse resultado e o decaimento exponencial da probabilidade no degrau de potencial que discutimos na Aula 8 (veja a Equação (8.14)).

Podemos, esquematicamente, mostrar a densidade de probabilidade correspondente à função de onda definida pelas Equações (11.2) e (11.5). O resultado pode ser visto na **Figura 11.2**. Na região à esquerda da barreira, vêem-se as oscilações resultantes da interferência entre as ondas incidente e refletida. Dentro da barreira, a densidade de probabilidade decai de forma aproximadamente exponencial com a distância. Finalmente, na região à esquerda, a densidade de probabilidade é constante, correspondendo à onda transmitida que se propaga nessa região.

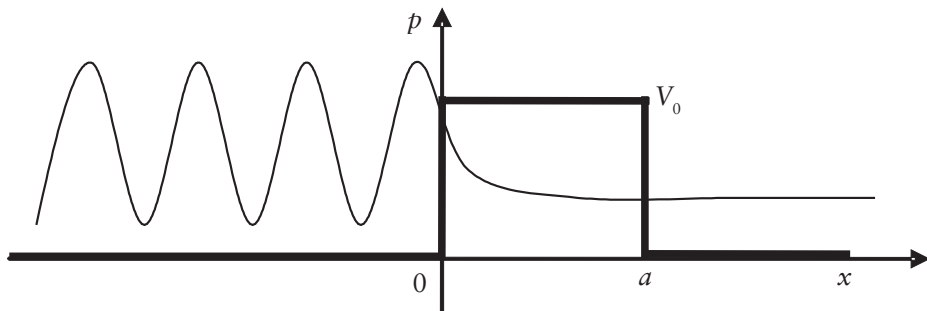


Figura 11.2: Densidade de probabilidade para uma partícula quântica incidente em uma barreira de potencial, vinda da esquerda com energia $E < V_0$.

O fato de o coeficiente de transmissão ter um valor diferente de zero demonstra que uma partícula pode atravessar uma barreira de potencial que seria completamente intransponível se prevalecesse o ponto de vista da Mecânica Clássica! Esse fenômeno, que já foi mencionado no estudo do degrau de potencial, é chamado de *penetração de barreira*, ou *efeito túnel*, e aparece com frequência em vários ramos da Física, como veremos na próxima aula.

SOLUÇÃO COMPLETA NO CASO $E > V_0$

Neste caso, na região interna, a solução da equação de Schrödinger é dada por

$$\psi(x) = Fe^{ik'x} + Ge^{-ik'x}, \quad 0 < x < a, \quad (11.9)$$

em que, como no estudo do degrau de potencial, $k' = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar$. Repetindo o tratamento de impor a continuidade de $\psi(x)$ e da sua derivada nos pontos $x = 0$ e $x = a$, determinamos as constantes A , B , C , F e G . Eliminando F e G , calculamos B/A e C/A e podemos, a partir deles, calcular os coeficientes de reflexão e transmissão:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)} \right]^{-1}$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)}{4k^2 k'^2} \right]^{-1}. \quad (11.10)$$

ATIVIDADE



3. Verifique que os valores de R e T da Equação (11.10) satisfazem a relação de conservação da densidade de fluxo de probabilidade, $R + T = 1$.

RESPOSTA COMENTADA

As expressões para R e T no caso $E > V_0$ também são da forma $R = \left[1 + \frac{a}{b}\right]^{-1}$

e $T = \left[1 + \frac{b}{a}\right]^{-1}$, exatamente como no caso $E < V_0$, de modo que a

relação $R + T = 1$ fica automaticamente demonstrada.

A Equação (11.10) mostra que o coeficiente de transmissão T é em geral menor do que 1, o que difere do resultado clássico em que $T = 1$ quando $E > V_0$. Em outras palavras, uma partícula quântica que incide sobre uma barreira de potencial com uma energia maior que a altura da barreira pode ser refletida! Por outro lado, vemos que $T = 1$ ocorre quando $k'a = n\pi$, em que n é um número inteiro positivo. Assim, a partícula é transmitida com 100% de probabilidade, quando a espessura da barreira é igual a um múltiplo inteiro da metade do comprimento de onda para a partícula dentro da barreira, $\lambda' = 2\pi/k'$. Esse é um fenômeno de interferência quântica análogo ao que acontece na ótica ondulatória com lâminas de espessura igual a meio comprimento de onda (ou múltiplos deste valor) da radiação eletromagnética incidente: toda a radiação é transmitida nesse caso. Esse fenômeno está relacionado ao efeito Ramsauer, que discutiremos futuramente.

A Figura 11.3 mostra a densidade de probabilidade no caso $E > V_0$. Note que, além do padrão de interferência entre as ondas incidente e refletida na região $x < 0$ (que já aparecia no caso $E < V_0$), também surgem oscilações desse tipo na região da barreira, porém com um comprimento de onda maior.

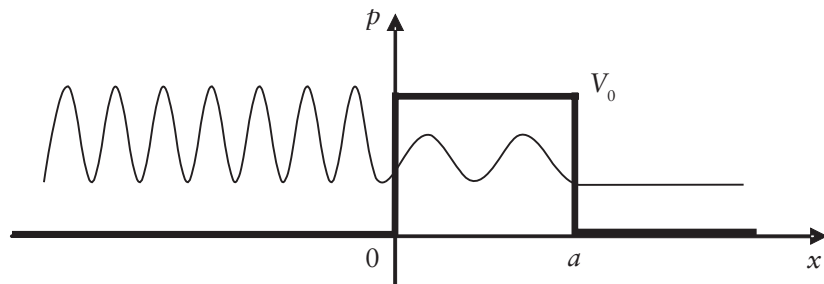


Figura 11.3: Densidade de probabilidade para uma partícula quântica incidente em uma barreira de potencial, vinda da esquerda com energia $E < V_0$.

Vale a pena verificar que, para $E = V_0$, as expressões (11.8) e (11.10) coincidem, o que significa que o gráfico de R ou T como função da energia é contínuo. Vamos verificar este resultado na Atividade 4.

ATIVIDADE



4. Mostre que, na situação limite $E = V_0$, tanto a Equação (11.8) como a

(11.10) levam a $T = \left(1 + \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}\right)^{-1}$.

RESPOSTA COMENTADA

Partindo da Equação (11.8), observamos que o limite $E = V_0$ corresponde a $K = 0$. Assim, precisamos inicialmente tomar o limite:

$$\lim_{Ka \rightarrow 0} \sinh^2(Ka) = \lim_{Ka \rightarrow 0} \left(\frac{e^{Ka} - e^{-Ka}}{2} \right)^2 = (Ka)^2.$$

Substituindo esse resultado na Equação (11.8) com $K = 0$, temos:

$$T = \left[1 + \frac{k^4 K^2 a^2}{4k^2 K^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{k^2 a^2}{4} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} \right]^{-1}.$$

Partindo agora da Equação (11.10), o limite $E = V_0$ corresponde agora a $k' = 0$. Sabendo também o limite $\lim_{k'a \rightarrow 0} \sinh^2(k'a) = (k'a)^2$, obtemos o valor limite para o coeficiente de transmissão:

$$T = \left[1 + \frac{k^4 k'^2 a^2}{4k^2 k'^2} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{k^2 a^2}{4} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} \right]^{-1}.$$

Observe que o número adimensional $\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}$ mede a opacidade da barreira. Quanto maior esse número, menor será o fluxo de probabilidade que atravessar a barreira. Perceba como é razoável que esse número seja tanto maior quanto maior for a altura da barreira V_0 , sua largura a e a massa da partícula m .

Na **Figura 11.4**, mostramos, de forma esquemática, o comportamento dos coeficientes de transmissão e reflexão como função de E/V_0 . Perceba a existência de probabilidade de transmissão para $E < V_0$ (tunelamento). Note ainda as oscilações no coeficiente de transmissão para $E > V_0$, dando $T = 1$ para alguns valores bem precisos de energia, como discutimos anteriormente.

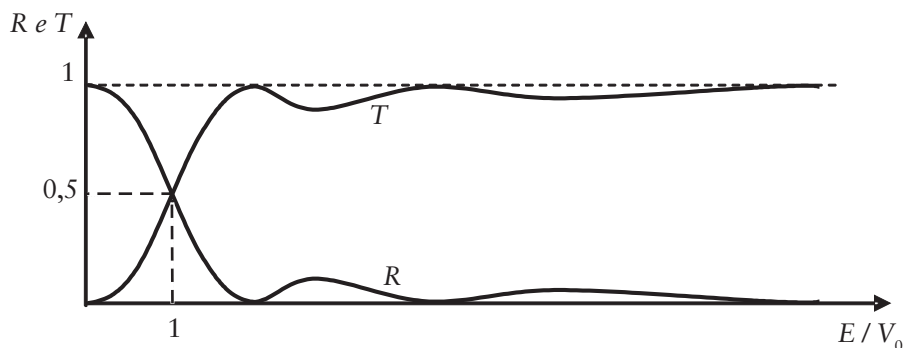


Figura 11.4: Coeficientes de transmissão e reflexão de uma partícula quântica por uma barreira de potencial. Consideramos $\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} = 1$, o que dá um coeficiente de transmissão igual a 0,5 quando $E = V_0$.

CONCLUSÃO

Vimos nesta aula, de maneira formal, como se comporta uma partícula quântica que incide sobre uma barreira de potencial. Mas nosso estudo desse assunto não termina aqui. Como dissemos, a Física é rica em exemplos, e os fenômenos descritos aqui são importantes e podem, inclusive, ser usados em aplicações práticas, como veremos na próxima aula.

ATIVIDADES FINAIS

1. No caso considerado na **Figura 11.4**, ou seja, uma barreira de potencial em que $\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} = 1$, calcule os valores de E/V_0 para os quais a probabilidade de transmissão é igual a 1.

RESPOSTA COMENTADA

Para que o coeficiente de transmissão seja igual a 1, a relação $k'a = n\pi$ deve

ser satisfeita. Como $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$, temos:

$$k' = a\sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar = n\pi \Rightarrow \frac{E}{V_0} = 1 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mV_0a^2}.$$

Usando a condição $\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} = 1$, obtemos:

$$\frac{E}{V_0} = 1 + \frac{n^2\pi^2}{4}, \text{ em que } n = 1, 2, 3 \text{ etc.}$$

2. (a) Calcule o coeficiente de transmissão para um elétron de energia total igual a 2 eV, incidente sobre uma barreira de potencial de altura 4 eV e largura 10^{-10} m, usando a Equação (11.8) e, depois, usando a fórmula aproximada demonstrada na Atividade 2 desta aula. (b) Repita o cálculo para uma barreira com largura de 10^{-9} m.

(Eisberg-Resnick, Problema 8, Capítulo 6).

RESPOSTA COMENTADA

(a) Substituindo os valores numéricos nas fórmulas indicadas e lembrando que a massa do elétron vale $9,1 \times 10^{-31}$ kg, obtemos $T = 62\%$, usando a Equação (11.8), e $T = 94\%$, usando a expressão aproximada obtida na Atividade 2. Note que, nesse caso, a barreira é bastante estreita, de modo que a probabilidade de tunelamento é alta. É por isso que não estamos no limite de validade da expressão da Atividade 2 desta aula (decaimento exponencial).

(b) Já no caso de uma largura 10 vezes maior, o valor obtido com ambas as fórmulas é de $T = 2,02 \times 10^{-6}$. Veja como esse aumento na largura da distância causa uma redução drástica na probabilidade de tunelamento! Nesse caso, a expressão aproximada obtida na Atividade 2 é certamente válida. Esse exemplo tem conexões com o mecanismo de funcionamento do microscópio de tunelamento, que discutiremos na próxima aula.



Vamos agora explorar a barreira de potencial no *síte* <http://perg.phys.ksu.edu/vqm/AVQM%20Website/WFEApplet.html>

Selecione o modo Explorer no botão superior esquerdo (*Mode*). Escolha o número de regiões do potencial (*Number of Regions*) igual a 3. Escolha a largura da região central igual a 0,3 nm e o valor da energia potencial igual a 2,0 eV nessa região. Mantenha o potencial nas duas outras regiões igual a zero. Escolha 1,5 eV para a energia da partícula, assim você estará observando o efeito túnel. Selecione ainda as opções *Connect from right to left*, *Right eigenfunction*: $C\exp(ikx) + D\exp(-ikx)$ e os coeficientes $C = 1$ e $D = 0$. Assim, estaremos simulando exatamente as situações descritas nesta aula. Outra opção interessante é clicar em *Run*, para observar a evolução temporal da função de onda e da densidade de probabilidade. Explore as diversas situações discutidas nesta aula.

RESUMO

Se uma partícula incide sobre uma barreira de potencial com energia menor ou maior que a altura do degrau, ela pode ser refletida ou transmitida. A transmissão no caso de energia menor que a barreira (efeito túnel) e a reflexão no caso de energia maior que a barreira são situações não previstas pela Mecânica Clássica. As probabilidades de transmissão e reflexão em cada caso são obtidas pelas leis da Mecânica Quântica.

INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, vamos explorar diversos exemplos e aplicações da barreira de potencial, entre eles o microscópio de tunelamento, o diodo túnel, a emissão de partículas alfa e a fusão nuclear.