AULA 9

O degrau de potencial. Caso II: energia maior que o degrau

Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico ao caso de uma partícula quântica que incide sobre o degrau de potencial, definido na Aula 8. Vamos considerar agora o caso em que a energia da partícula é maior que a altura do degrau.

objetivos

Ao final desta aula, você deverá ser capaz de:

- verificar que, no caso de a energia E da partícula ser maior do que a altura do degrau (V_0), a partícula poderá passar (ser transmitida) pelo degrau ou ser refletida por ele;
- usar as regras da mecânica quântica para calcular as probabilidades de transmissão e reflexão.

Pré-requisitos

Para uma melhor compreensão desta aula, é importante que você revise a Aula 8 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).

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

Dando seqüência ao nosso estudo sobre o degrau de potencial, iniciado na Aula 8, vamos agora analisar a situação em que uma partícula quântica de massa m, vinda da esquerda, incide sobre o degrau de potencial com energia maior que a altura do degrau ($E > V_0$). Esta situação está mostrada na **Figura 9.1**:

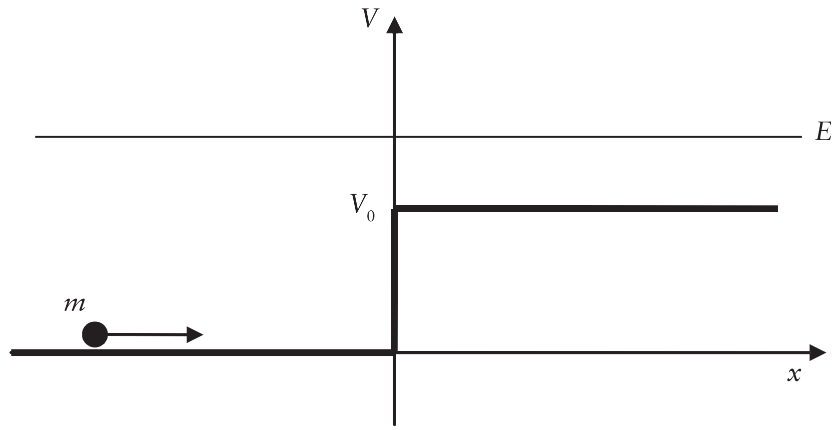

Figura 9.1: Uma partícula quântica de massa *m* que incide sobre um degrau de potencial com energia maior que a altura do degrau ($E > V_0$).

O que deveríamos esperar nesse caso, se valessem as leis da Física Clássica? A resposta é simples: na ausência de atrito ou de outras forças, a partícula deveria simplesmente vencer a barreira de potencial e continuar seu movimento para a direita, até o infinito. Certamente, haveria uma redução em sua velocidade, que poderíamos calcular através da conservação da energia. Mas a partícula nunca poderia inverter o sentido de seu movimento, retornando para a esquerda, ou seja, a probabilidade de ser "refletida" seria nula. Veremos, mais uma vez, que na Mecânica Quântica as coisas são diferentes.

Como fizemos na aula anterior, vamos encontrar as soluções da equação de Schrödinger. Do lado esquerdo do degrau ($x < 0$), a função de onda terá a mesma forma que no caso $E < V_0$:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad x < 0 \qquad (9.1)$$

em que, novamente, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Já do lado direito do degrau ($x > 0$), a equação de Schrödinger pode ser reescrita na forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k'^2\,\psi(x) = 0, \quad x > 0, \qquad (9.2)$$

com $k' = \sqrt{2m\left(E - V_0\right)}/\hbar$. A solução dessa equação será análoga à Equação (9.1), ou seja,

$$\psi(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, \; x > 0 \; . \qquad (9.3)$$

A interpretação física das funções de onda (9.1) e (9.3) é exatamente a mesma da aula passada. O termo Ae^{ikx} pode ser associado a uma onda se movimentando para a direita na região $x < 0$, correspondendo, portanto, à *onda incidente*. Já o termo Be^{-ikx} é uma onda que se propaga para a esquerda nessa mesma região ($x < 0$), ou seja, é a onda refletida pelo degrau. Da mesma forma, o termo $Ce^{ik'x}$, que corresponde a uma onda se propagando para a direita em $x > 0$, pode ser considerado como uma *onda transmitida*. O termo restante $De^{-ik'x}$ poderia ser associado a uma onda incidente adicional, vinda do lado direito. No entanto, a situação física mais comum é aquela em que as partículas incidem apenas a partir de um dos lados da barreira. Portanto, vamos descartar este termo, fazendo $D = 0$ na Equação (9.3):

$$\psi(x) = Ce^{ik'x}, \quad x > 0 \; . \qquad (9.4)$$

Podemos encontrar relações entre as constantes A, B, C a partir das condições de continuidade de $\psi(x)$ e da sua derivada, como fizemos na aula passada. A continuidade de $\psi(x)$ em $x = 0$ nos dá a relação:

$$A + B = C. \qquad (9.5)$$

Já a continuidade de $d\psi/dx$ implica:

$$ik\left(A - B\right) = ik'C \, . \qquad (9.6)$$

De forma idêntica ao caso discutido na Aula 8, essas duas relações nos permitem determinar B e C em termos de A, que seria determinada pela condição de normalização. Assim, combinando as Equações (9.5) e (9.6), obtemos finalmente:

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'} \;, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} \,. \tag{9.7}$$

ANÁLISE FÍSICA DA SOLUÇÃO E COEFICIENTES DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO

Vamos interpretar fisicamente a solução de nosso problema. Inicialmente, vamos calcular a densidade de probabilidade de encontrarmos a partícula do lado direito e do lado esquerdo do degrau.

ATIVIDADE

1. Obtenha a densidade de probabilidade $p(x)$ de encontrar a partícula em uma posição x. Considere separadamente as regiões $x < 0$ e $x > 0$. Por simplicidade, use $k = 2k'$. Faça um esboço do resultado obtido.

____
____
____

RESPOSTA COMENTADA

Usando $k = 2k'$, obtemos, pela Equação (9.7):

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'} = \frac{1}{3}\,; \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} = \frac{4}{3}.$$

Substituindo esses resultados nas soluções (9.1) e (9.4), obtemos:

$$\begin{cases} \psi(x) = A\left(e^{ikx} + \dfrac{1}{3}e^{-ikx}\right), & x < 0 \\[2ex] \psi(x) = \dfrac{4A}{3}e^{ik'x}, & x > 0 \end{cases}$$

Calcularemos agora a densidade de probabilidade $p(x) = \psi^*(x)\psi(x)$

$$\begin{cases} p(x) = |A|^2\left(\dfrac{10}{9} + \dfrac{2}{3}\cos(2kx)\right), & x < 0 \\[2ex] p(x) = \dfrac{16|A|^2}{9}, & x > 0 \end{cases}$$

Podemos agora fazer um esboço desse resultado:

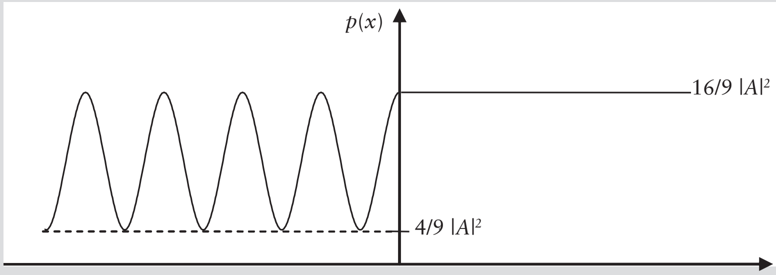

Figura 9.2: Densidade de probabilidade para uma partícula sob ação do degrau potencial, para o caso especial $k = 2k'$.

Perceba que a densidade de probabilidade é constante na região $x > 0$. Já na região $x < 0$, ela mostra oscilações resultantes da interferência das ondas incidente e refletida. No entanto, note que essas oscilações nunca levam a densidade de probabilidade a se anular nessa região. Isso ocorre porque as amplitudes das ondas incidente e refletida não são iguais.

Podemos também calcular as densidades de corrente de probabilidade, como fizemos na aula passada, obtendo

$$j = v_g\left(|A|^2 - |B|^2\right), \quad x < 0 \qquad (9.8)$$
$$j = v'_g |C|^2, \quad x > 0$$

em que a velocidade de grupo $v_g = \hbar k / m$, do lado esquerdo, e $v'_g = \hbar k' / m$ do lado direito.

ATIVIDADE

2. Substituindo a Equação (9.7) na Equação (9.8), mostre que a densidade de corrente de probabilidade tem o mesmo valor para $x < 0$ e $x > 0$.

____
____
____

RESPOSTA COMENTADA

Fazendo a substituição sugerida, obtemos, para $x < 0$:

$$j = \frac{\hbar k}{m}|A|^2\left[1 - \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2\right] = \frac{4\hbar k^2 k'}{m(k+k')^2}|A|^2 .$$

Já para $x > 0$, obtemos: $j = \dfrac{\hbar k'}{m}|A|^2\left(\dfrac{2k}{k+k'}\right)^2 = \dfrac{4\hbar k^2 k'}{m(k+k')^2}|A|^2$,
como queríamos demonstrar.

O coeficiente de reflexão R, definido anteriormente como a razão entre as densidades de corrente de probabilidade das ondas refletida e incidente (veja a Equação (8.11) da Aula 8), terá, neste caso, o valor:

$$R = \frac{|A|^2}{|B|^2} = \frac{(k - k')^2}{(k+k')^2} = \frac{\left[1-\sqrt{1-V_0/E}\right]^2}{\left[1+\sqrt{1-V_0/E}\right]^2}. \qquad (9.9)$$

Podemos também calcular o *coeficiente de transmissão* T, definido como a razão entre as densidades de corrente de probabilidade das ondas transmitida e incidente, ou seja,

$$T = \frac{v'_g|C|^2}{v_g|A|^2} = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4\sqrt{1-V_0/E}}{\left[1+\sqrt{1-V_0/E}\right]^2}\;. \qquad (9.10)$$

ATIVIDADE

3. Mostre que $R + T = 1$.

____
____
____

RESPOSTA COMENTADA

Usando as Equações (9.9) e (9.10), obtemos:

$$R + T = \frac{\left[1-\sqrt{1-V_0/E}\right]^2 + 4\sqrt{1-V_0/E}}{\left[1+\sqrt{1-V_0/E}\right]^2}$$

$$= \frac{1-2\sqrt{1-V_0/E}+(1-V_0/E)+4\sqrt{1-V_0/E}}{\left[1+\sqrt{1-V_0/E}\right]^2} = \frac{\left[1+\sqrt{1-V_0/E}\right]^2}{\left[1+\sqrt{1-V_0/E}\right]^2} = 1$$

A condição R + T = 1 aparece também na ótica ondulatória clássica, no contexto da reflexão e da transmissão (refração) de uma onda luminosa pela interface entre dois meios. Na física clássica, essa condição expressa a conservação da energia, ou seja, não há acúmulo de energia na interface entre os dois meios, de modo que a intensidade da luz incidente deve ser a soma das intensidades refletida e transmitida. Já na Física Quântica, como estamos lidando com correntes de probabilidade, essa mesma condição expressa a conservação da probabilidade, ou seja, como não há aumento de probabilidade de se encontrar a partícula em x = 0, o fluxo de probabilidade incidente deve ser igual à soma dos fluxos refletido e transmitido.

Na **Figura 9.3**, mostramos o comportamento dos coeficientes de reflexão e transmissão como função de E/V_0. A região $E/V_0 < 1$ corresponde à situação que estudamos na aula passada, em que a energia da partícula incidente é menor que a altura do degrau. Naquele caso, obtivemos reflexão completa, ou seja, $R = 1$ e $T = 0$. Para $E/V_0 > 1$, o coeficiente de reflexão R diminui e o coeficiente de transmissão T aumenta. Isto ocorre gradativamente, de modo que, no limite de energias muito altas, o coeficiente de trasmissão aproxima-se do valor assintótico igual a 1.

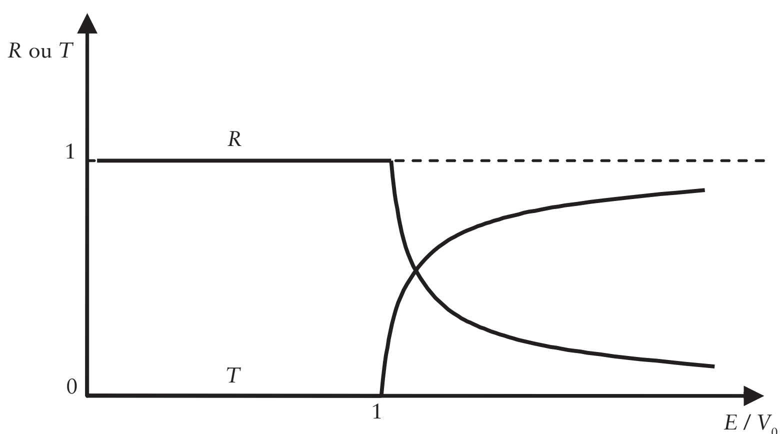

Figura 9.3: Coeficientes de reflexão e transmissão de uma partícula quântica que incide sobre um degrau de potencial, em função da energia da mesma.

O fato de o degrau de potencial refletir partículas para as quais $E > V_0$, que classicamente seriam transmitidas, é mais uma manifestação das propriedades ondulatórias das partículas quânticas. O fenômeno que acabamos de estudar é completamente análogo ao que acontece na ótica ondulatória clássica, da reflexão parcial da luz na fronteira de duas regiões com índice de difração diferente. No meio à esquerda o comprimento de onda de de Broglie é $\lambda = 2\pi/k$, enquanto à direita é $\lambda' = 2\pi/k'$. Portanto, a razão entre os índices de refração n' do meio à direita e n do meio à esquerda, definida como razão inversa entre os comprimentos de onda, será:

$$\frac{n'}{n} = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{k'}{k} = \sqrt{1 - V_0/E} \ . \qquad (9.11)$$

Usando essa definição em conjunto com a Equação (9.9), podemos obter uma expressão para o coeficiente de reflexão R em função dos índices de refração:

$$R = \left(\frac{n - n'}{n + n'} \right)^2 . \qquad (9.12)$$

Essa é precisamente a expressão para a refletividade de uma onda eletromagnética com incidência normal sobre a interface entre dois meios de índices de refração diferentes, que você obteve em Física 4A (Equação (6.36) daquela disciplina). A refletividade clássica é a razão entre as intensidades da onda refletida e da onda incidente. Portanto, o resultado quântico coincide com o resultado da ótica ondulatória clássica, se fizermos, mais uma vez, a analogia entre "intensidade clássica" e "probabilidade quântica".

É tentador explicar o fenômeno que acabamos de descrever da seguinte forma: "A partícula quântica é parcialmente refletida e parcialmente transmitida pelo degrau de potencial." Afinal, na ótica ondulatória, dizemos algo semelhante com relação às ondas. No entanto, essa explicação não é muito precisa quando nos referimos ao fenômeno quântico; é preciso esclarecer que a partícula não se fragmenta quando incide no degrau. O que acontece é que, numa dada colisão da partícula com o degrau de potencial, ela pode ser refletida com probabilidade R e transmitida com probabilidade T. Sendo assim, em um único evento, não podemos medir os valores de R e T. Esses só poderiam ser determinados se realizássemos um número muito grande de colisões idênticas, de modo que R e T seriam proporcionais ao número de eventos de reflexão e transmissão, respectivamente.

ATIVIDADE FINAL

Repita o cálculo do degrau de potencial, considerando agora a partícula vindo da região $x > 0$, em que $V(x) = V_0$, e se movendo no sentido decrescente de x em direção ao ponto $x = 0$, em que o potencial cai ao valor $V(x) = 0$. Mostre que os coeficientes de reflexão e transmissão são os mesmos (Eisberg-Resnick, Problema 2, Capítulo 6).

RESPOSTA COMENTADA

Como o perfil de potencial não muda em relação ao caso que estudamos no início desta aula, a forma da equação de Schrödinger também permanece a mesma. Portanto, as soluções são também idênticas. A única diferença é que devemos agora considerar uma onda refletida na região $x > 0$, e haverá apenas uma onda propagando-se para a esquerda na região $x < 0$. Assim, a função de onda será:

$$\begin{cases} \psi(x) = Be^{-ikx}, & x < 0 \\ \psi(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, & x > 0 \end{cases} .$$

Aplicando as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada em $x = 0$, obtemos:

$$B = C + D, - kB = k'(C - D).$$

Assim, podemos relacionar as constantes B, C e D:

$$\frac{C}{D} = \frac{k' - k}{k + k'}, \quad \frac{B}{D} = \frac{2k'}{k + k'}.$$

O coeficiente de reflexão será dado por:

$$R = \frac{|C|^2}{|D|^2} = \frac{(k' - k)^2}{(k + k')^2},$$

que é idêntico ao resultado que encontramos quando a partícula incide da esquerda. Como a relação R + T = 1 deve ser obedecida, o coeficiente de transmissão também deve ser idêntico.

Há muitos *sites* na internet em que você pode visualizar as soluções da equação de Schrödinger do degrau de potencial e de outros potenciais em uma dimensão. Por exemplo, visite o *site*:
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 2. Assim, você poderá selecionar os valores da energia potencial nas regiões $x > 0$ e $x < 0$. Você pode também variar a energia total da partícula. Nos painéis inferiores, serão mostradas a função de onda e a densidade de probabilidade. Brinque um pouco com esse programa, explorando as diversas situações que discutimos nesta aula e na aula passada.

RESUMO

Se uma partícula incide sobre um degrau de potencial com energia maior que a altura do degrau, ela pode ser refletida ou transmitida, com probabilidades dadas pelos coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente. Esses coeficientes são funções da razão entre a energia da partícula e a altura do degrau.

INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, vamos exercitar o que aprendemos nas Aulas 4 a 9 desta disciplina.