

Sistemas em uma dimensão: estados não ligados

Sistemas em uma dimensão: estados não ligados

METAS:

- Introduzir o conceito de pacote de ondas.
- Mostrar como este conceito é usado na descrição de uma partícula livre na mecânica quântica.
- Introduzir alguns conceitos básicos da teoria de espalhamento.

OBJETIVOS:

Ao fim da aula os alunos deverão ser capazes de:

- explicar o que é um pacote de ondas;
- explicar o comportamento do pacote;
- explicar o espalhamento de partículas por um potencial degrau;
- explicar o espalhamento por uma barreira de potencial;
- resolver problemas simples.

PRÉ-REQUISITOS:

- equação de Schrödinger;
- equação de Schrödinger independente do tempo;
- observáveis.

7.1 Introdução

Na mecânica quântica, a forma do espectro do hamiltoniano determina as características dos estados do sistema. Em particular, estados não-ligados não existem se o hamiltoniano não possui espectro contínuo. Problemas envolvendo espectro contínuo exigem, geralmente, aplicação de técnicas mais avançadas para resolvê-los. Um exemplo importante é a partícula livre que vai ser tratada na primeira parte desta aula.

Um problema importante na física clássica - o problema de espalhamento, é, talvez, mais importante ainda na física quântica.

7.2 Partícula livre

A partícula livre ($V(x) = 0$ para todo x) é o sistema mais simples possível na mecânica clássica. O sistema é simples na mecânica quântica também. Porém, o espectro do hamiltoniano é contínuo e precisamos de ferramentas matemáticas mais sofisticadas para um estudo detalhado.

7.2.1 Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger para uma partícula livre com massa m ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \quad (7.1)$$

é a mesma equação que já temos resolvido no problema do poço infinito. No entanto, a partícula agora não está presa num intervalo finito, mas está se movendo no espaço infinito (de dimensão um). Não há condições de contorno análogas às condições (6.6). Por causa disso e, também, lembrando as ondas de de Broglie, vamos buscar soluções da eq. (7.1) de tipo onda progressiva e não ondas estacionárias como no problema do poço infinito.

Substituindo

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad (7.2)$$

Sistemas em uma dimensão: estados não ligados

na equação de Schrödinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (7.3)$$

obteremos a equação

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E. \quad (7.4)$$

Esta equação possui duas soluções reais,

$$k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (7.5)$$

para todo valor positivo de E , logo, a equação (7.3) possui duas soluções (linearmente independentes) da forma (7.2) para cada valor positivo²⁴ de E . Então, a cada valor positivo de E associamos duas soluções separáveis da equação de Schrödinger, a saber

$$\Psi_k(x, t) = \exp \left[i \left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \right], \quad k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (7.6)$$

Estas soluções são ondas progressivas: a onda com $k > 0$ se propaga para a direita e a onda com $k < 0$ se propaga para a esquerda. Concretizando a hipótese de de Broglie, poderíamos associar ondas desse tipo aos movimento de uma partícula livre. Com efeito, aplicando o operador do momento à uma função da forma (7.6), temos

$$\hat{p}\Psi_k(x, t) \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_k(x, t) = \hbar k \Psi_k(x, t), \quad (7.7)$$

logo, a onda (7.6) associamos com o movimento²⁵ de uma partícula com momento linear $p = \hbar k$. Porém, enfrentamos duas dificuldades.

- A função $\Psi_k(x, t)$ não é normalizável, portanto, não é uma função de onda.

²⁴As referidas soluções existem para qualquer valor não nulo de E , porém, se E não for positivo, o módulo de uma solução da forma (7.2) cresce ilimitadamente quando x cresce, ou quando x decresce.

²⁵O momento linear $p = \hbar k$ e a energia $E = \frac{\hbar k^2}{2m}$ satisfazem a relação energia-momento para uma partícula não-relativística, como já mostramos na Aula 3.

- A velocidade de propagação da onda é duas vezes maior que a velocidade de uma partícula clássica com momento p . Com efeito, a frequência angular da onda é

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

e o número de onda é igual a $|k|$. Logo, o módulo da velocidade de propagação de onda é igual a

$$v = \frac{\omega}{|k|} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m}. \quad (7.8)$$

Mas a velocidade de uma partícula clássica com momento m é

$$v_{\text{clássica}} = \frac{p}{m}.$$

Ambas as dificuldades são resolvidas, se considerar, em vez de uma única função $\Psi_k(x, t)$, uma superposição apropriada de funções da família (7.5).

7.2.2 Pacote de onda

O pacote de onda como uma função de onda

Um *pacote de onda* é uma função da forma

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \Psi_k(x, t) dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk, \end{aligned} \quad (7.9)$$

onde $\phi(k)$ é uma função de valores complexos, quadrado-integrável. O coeficiente $1/\sqrt{2\pi}$ foi colocado por conveniência.

Sendo $\Psi(x, t)$ uma superposição de funções $\Psi_k(x, t)$, ela é uma solução da equação de Schrödinger (7.1).

Da eq. (7.9) obteremos, no instante $t = 0$,

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk. \quad (7.10)$$

A função $\Psi(x, 0)$ é a transformada de Fourier²⁶ da função $\phi(k)$, enquanto $\phi(k)$ é a transformada inversa de $\Psi(x, 0)$. O teorema de Plancherel estabelece que, se $\phi(k)$ for quadrado-integrável²⁷, então $\Psi(x, 0)$ é quadrado-integrável e, além disso, vale

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(k)|^2 dk. \quad (7.11)$$

Deste modo, quando $\phi(k)$ na eq. (7.9) é uma função normalizada, a função $\Psi(x, t)$ é normalizada também.

Exemplo 7.1. Consideremos o pacote gaussiano

$$\phi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk. \quad (7.12)$$

A função $\phi(k)$ é dada por

$$\phi(k) = A e^{-\alpha(k-k_0)^2}, \quad \alpha > 0.$$

Determinaremos A de tal modo que $\phi(k)$ seja normalizada. Calculando a integral,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(k)|^2 dk = \frac{|A|^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha(k-k_0)^2} dk = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}.$$

Se tomar $A = (2\alpha/\pi)^{1/4}$, obteremos a função normalizada

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{\alpha}{2\pi^3}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk. \quad (7.13)$$

Velocidade de fase e velocidade de grupo

A velocidade v da onda harmônica é chamada *velocidade de fase* porque é igual a velocidade do movimento de um ponto caracterizado por um determinado valor da fase $kx - \omega t$. Para as ondas $\Psi_k(x, t)$, esta velocidade depende de k , segundo eq. (7.8). Mas, se a velocidade de cada onda harmônica é diferente,

²⁶Ver, por exemplo, ARFKEN, G; WEBER, H. *Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física* Rio de Janeiro: Campus, 2007.

²⁷E se, além disso, existir a integral do módulo $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(k)| dk$.

qual é a velocidade do pacote “como um todo”? Esta velocidade, a velocidade de um “grupo” de ondas, é chamada *velocidade de grupo*²⁸.

A “velocidade do pacote como um todo” é bem definida para pacotes que não mudam rapidamente de forma. As mudanças na forma do pacote são lentas, quando as velocidades das ondas harmônicas na composição do pacote são próximas. A velocidade de fase é uma função contínua do número de onda $|k|$. Portanto, quando um pacote é formado por ondas harmônicas com comprimentos de onda próximos, ele muda de forma lentamente e a velocidade de grupo está bem definida.

Consideremos um pacote (7.9) deste tipo, isto é, um pacote para o qual o módulo de $\phi(k)$ é desprezivelmente pequeno fora de um pequeno intervalo contendo o ponto k_0 . A frequência angular ω da onda harmônica varia lentamente com k . Portanto, na integral (7.9) podemos manter apenas os primeiros dois termos da série de Taylor para $\omega(k)$,

$$\omega \approx \omega_0 + \omega'_0(k - k_0),$$

onde

$$\omega_0 = \omega \Big|_{k=k_0}, \quad \omega'_0 = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0}.$$

Desse modo, obtemos que, para t pequeno,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx - i\omega t} dk \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{-i\omega_0 t} e^{i[kx - i\omega'_0(k - k_0)t]} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\omega_0 t + ik_0 \omega'_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega'_0 t)} dk \\ &= e^{i(k_0 \omega'_0 - \omega_0)t} \Psi(x - \omega'_0 t, 0). \end{aligned}$$

O pacote é deslocado em $\omega'_0 t$ e multiplicado pelo número complexo $e^{i(k_0 \omega'_0 - \omega_0)t}$.

²⁸Dependendo da natureza das ondas, a velocidade de grupo pode ser maior ou menor da velocidade de fase das ondas harmônicas que formam o grupo.

Para a velocidade de grupo encontramos

$$v_{\text{grupo}} = \frac{\omega'_0 t}{t} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}, \quad (7.14)$$

logo

$$v_{\text{grupo}} = v_{\text{clássica}}, \quad (7.15)$$

onde $v_{\text{clássica}}$ é a velocidade de uma partícula com momento $p = \hbar k_0$ segundo a mecânica clássica.

7.2.3 O movimento da partícula livre

Na mecânica clássica, uma partícula livre se move com velocidade constante. O que caracteriza o movimento de uma partícula livre na mecânica quântica? Primeiro, podemos analisar a evolução dos valores esperados do momento e da coordenada.

Exemplo 7.2. O valor esperado do momento não depende do tempo. Usando a equação de Schrödinger, mostraremos que a taxa de variação de $\langle p \rangle$ se anula para todo t . Com efeito,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle p \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{p} \Psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x, t) \hat{p} \Psi(x, t) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{p} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(x, t) \right]^* \hat{p} \Psi(x, t) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{p} \left[\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(x, t) \right] dx \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{H} \hat{p} \Psi(x, t) dx + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{p} \hat{H} \Psi(x, t) dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) [\hat{p}, \hat{H}] \Psi(x, t) dx = 0. \end{aligned} \quad (7.16)$$

De modo análogo, podemos mostrar que

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}. \quad (7.17)$$

Portanto, para uma partícula livre

$$\langle x \rangle = \langle x \rangle \Big|_{t=0} + \frac{\langle p \rangle}{m} t. \quad (7.18)$$

A evolução do pacote de onda tem uma característica interessante: propagando-se no espaço o pacote de onda sofre um *alargamento*. É fácil de entender como isso acontece. O pacote contém ondas harmônicas com números de onda diferentes e a velocidade de fase de uma onda harmônica depende do número de onda. Propagando-se com velocidades diferentes, as ondas harmônicas causam uma mudança na forma e o alargamento do pacote.

7.3 Potencial degrau

Consideremos o movimento de uma partícula em um potencial da forma

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0, \\ V_0 & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (7.19)$$

onde V_0 é positivo. Suponhamos que em um experimento partículas são dispa-

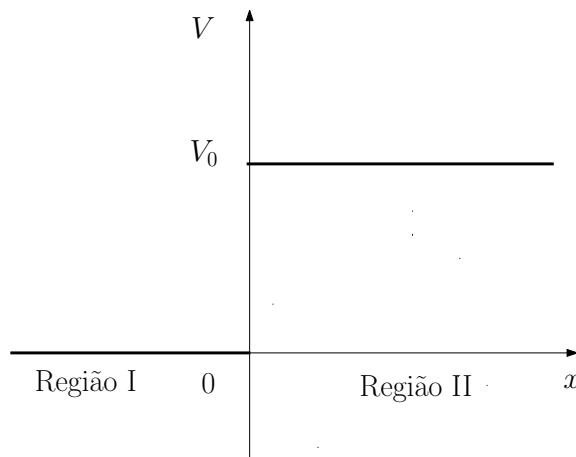


Figura 7.1: Potencial degrau.

radas da esquerda. Na Figura 7.19 dividimos a reta em duas regiões: a Região I é a semi-reta $x < 0$ e a semi-reta $x > 0$ é a Região II.

O que vai acontecer com as partículas lançadas da região I?

A resposta da mecânica clássica é conhecida:

Sistemas em uma dimensão: estados não ligados

- quando a energia E da partícula é menor que V_0 , a partícula é refletida para esquerda;
- se $E > V_0$, a partícula continuará movendo-se para a direita, mas com uma velocidade menor do que a velocidade que ela tinha na Região I.

Uma partícula com energia menor que V_0 não pode penetrar na Região II. Por outro lado, uma partícula com energia maior que V_0 nunca vai voltar para a Região I.

O problema do potencial degrau na mecânica quântica Usaremos o método já usado no problema da partícula livre. A equação de Schrödinger independente do tempo tem a forma na Região I,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x), \quad x < 0, \quad (7.20)$$

e na Região II,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x), \quad x > 0. \quad (7.21)$$

Exigimos que a função $\psi(x)$ e a primeira derivada $\frac{d}{dx}\psi(x)$ sejam funções contínuas em $x = 0$. A solução geral da equação (7.20) é dada por

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad x < 0, \quad (7.22)$$

onde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

e A, B são constantes arbitrárias. A forma da solução geral depende da relação entre E e V_0 . Consideremos primeiro o caso $0 < E < V_0$. A solução geral da equação (7.21) é dada por

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, \quad x > 0, \quad (7.23)$$

onde

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

sendo C e D constantes arbitrárias. As condições de continuidade de ψ e $\frac{d}{dx}\psi$ em $x = 0$ implicam em

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik_1(A - B) &= \kappa(C - D). \end{aligned} \quad (7.24)$$

Antes de prosseguir, temos que admitir que $C = 0$. Com efeito, se $C \neq 0$, o módulo da função ψ cresce exponencialmente quando $x \rightarrow \infty$. Uma tal função não poderia ser usada na composição de pacotes normalizáveis. Pondo $C = 0$ e resolvendo o sistema (7.24), obtemos

$$A = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\kappa}{k_1} \right) D, \quad B = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\kappa}{k_1} \right) D, \quad (7.25)$$

logo, para cada cada valor positivo temos uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\kappa}{k_1} \right) D e^{ik_1 x} + \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\kappa}{k_1} \right) D e^{-ik_1 x} & \text{se } x < 0, \\ D e^{-\kappa x} & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad (7.26)$$

onde D é uma constante arbitrária não-nula. As funções obtidas não são

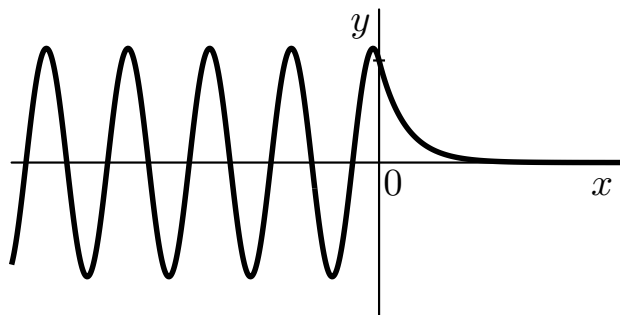


Figura 7.2: Uma solução aceitável da equação de Schrödinger independente do tempo ($E < V_0$).

normalizáveis e as soluções da equação de Schrödinger

$$\Psi_E(x, t) = \psi_E(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (7.27)$$

não são funções de onda pois não admitem a interpretação de Born. Estados do sistema (com energia menor que V_0) são representados por superposições normalizadas das funções $\Psi_E(x)$ e as funções de onda são pacotes de onda,

$$\Psi(x, t) = \int_0^E f(E)\psi_E(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dE.$$

Porém, conclusões sobre as propriedades físicas do sistema podemos tirar sem construir as superposições explicitamente. Com efeito, os módulos das amplitudes A e B , eq. (7.25), são iguais. Isto significa que toda partícula que vem da esquerda será refletida para a direita. Outra propriedade da função Ψ_E também chama atenção: a função não se anula a direita da origem. Portanto, partículas disparadas da esquerda com energia *menor* que V_0 poderiam ser detectadas a direita da origem, isto é, na região classicamente proibida! A *distância de penetração*

$$\Delta x = \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (7.28)$$

determina a região à direita da origem para a qual a probabilidade de encontrar a partícula é apreciável. Comumente, a distância de penetração é muito pequena, como mostra o exemplo a seguir.

Exemplo 7.3. Um elétron com energia $E = 3,0$ eV é disparado da esquerda para um potencial degrau com $V_0 = 6,0$ eV. Determine a distância de penetração.

Solução.

$$\Delta x = \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} = 1,9 \times 10^{-10} \text{ m.}$$

Suponhamos agora que $E > V_0$. A solução geral da equação de Schrödinger independente do tempo na Região I tem a forma (7.22), porem, na Região II

$$\psi(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, \quad x > 0, \quad (7.29)$$

onde

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

e C, D são constantes. As condições de continuidade da função e da primeira derivada implicam em

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik_1(A - B) &= ik_2(C - D). \end{aligned} \quad (7.30)$$

O primeiro termo na expressão (7.29) corresponde a um fluxo de partículas da esquerda para a direita e o segundo - a um fluxo de partículas no sentido contrário. Estamos considerando um experimento no qual partículas são disparadas pela esquerda. Não há partículas propagando-se para esquerda na Região II e temos que admitir que $D = 0$. Resolvendo o sistema de equações (7.30), encontramos

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A, \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A, \quad (7.31)$$

logo

$$\psi_E(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} Ae^{-ik_1x} & \text{se } x < 0, \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} Ae^{ik_2x} & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad E > V_0. \quad (7.32)$$

A função $\psi_E(x)$ e a solução da equação de Schrödinger

$$\begin{aligned} \Psi_E(x, t) &= \psi_E(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= \begin{cases} Ae^{ik_1x - i\frac{E}{\hbar}t} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} Ae^{-ik_1x - i\frac{E}{\hbar}t} & \text{se } x < 0, \\ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} Ae^{ik_2x - i\frac{E}{\hbar}t} & \text{se } x > 0, \end{cases} \quad E > V_0. \end{aligned} \quad (7.33)$$

não são normalizáveis, portanto $\psi_E(x, t)$ não é uma função de onda. Porém, analisando a forma da função $\psi(x, t)$, é fácil identificar na Região I duas ondas:

- uma onda com amplitude A que se propaga da esquerda para a direita;

Sistemas em uma dimensão: estados não ligados

- uma onda com amplitude $\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A$ que se propaga da direita para a esquerda.

A primeira onda é a *onda incidente* associada com as partículas disparadas da esquerda. A segunda é a *onda refletida* associada às partículas refletidas pelo degrau. Na Região II encontramos uma onda com amplitude $\frac{2k}{k + k_2} A$ propagando-se da esquerda para a direita. Esta é a *onda transmitida* associada às partículas que passam pelo degrau.

Um cálculo direto mostra que o fluxo de probabilidade²⁹ na Região I é igual a

$$j_1 = \frac{k_1}{m} (|A|^2 - |B|^2). \quad (7.34)$$

É fácil de entender essa relação, pois os dois termos no segundo membro da equação são o fluxo relativo à onda incidente,

$$j_{\text{incidente}} = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2, \quad (7.35)$$

e o fluxo relativo a onda refletida

$$j_{\text{refletida}} = -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \quad (7.36)$$

Deste modo,

$$j_1 = j_{\text{incidente}} + j_{\text{refletida}}. \quad (7.37)$$

O quociente dos módulos

$$R = \frac{|j_{\text{refletida}}|}{|j_{\text{incidente}}|}, \quad (7.38)$$

chamado *coeficiente de reflexão*, representa a probabilidade para que uma partícula incidente seja refletida pelo potencial. Para o potencial degrau encontramos, usando a primeira das equações (7.31),

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2. \quad (7.39)$$

²⁹Eq. (4.81).

Na Região II o fluxo de probabilidade se deva a onda transmitida e é igual a

$$j_2 = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2. \quad (7.40)$$

O quociente

$$T = \frac{|j_2|}{|j_{\text{incidente}}|} \quad (7.41)$$

é igual à probabilidade para uma partícula passar para a Região II e é chamado *coeficiente de transmissão*. Substituindo na eq. (7.41) a expressão para C encontramos que, para o potencial degrau,

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (7.42)$$

As condições de continuidade em $x = 0$ para a função $\psi_E(x)$ e para a primeira derivada garantem que

$$j_1 = j_2. \quad (7.43)$$

Usando essa equação e, também, as equações (7.37), (7.38), (7.41), encontramos um resultado natural e esperado: a soma das probabilidades de reflexão e transmissão é igual a um,

$$R + T = 1. \quad (7.44)$$

Voltando para o caso $E < V_0$, encontramos que o fluxo na Região II é igual a zero, portanto $T = 0$. O fluxo total na Região I também é igual a zero,

$$j_{\text{incidente}} + j_{\text{refletida}} = 0,$$

logo $R = 1$ e a relação (7.44) é válida.

7.4 Barreira de potencial

Uma barreira de potencial impede, na mecânica clássica, uma partícula com energia insuficiente que se encontre em um dos lados da barreira de atravessar para o outro lado. A Figura 7.3 mostra o gráfico do potencial de uma barreira.

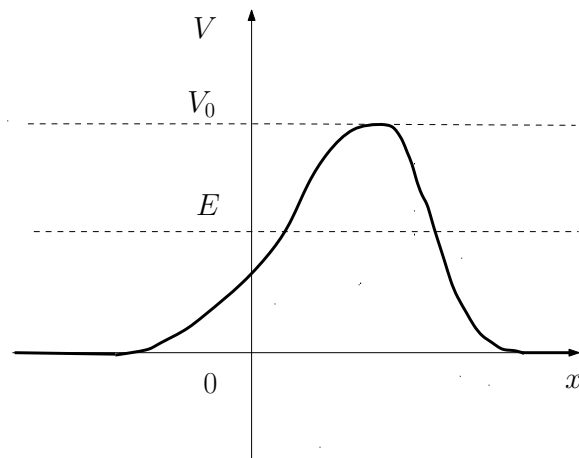


Figura 7.3: Na mecânica clássica, uma partícula com energia $E < V_0$ não pode passar para o outro lado da barreira.

Consideremos uma barreira retangular de largura a e “altura” V_0 ,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0, \\ V_0 & \text{se } 0 < x < a, \\ 0 & \text{se } x > a. \end{cases} \quad (7.45)$$

Na Região I ($x < 0$, ver a Figura 7.4) como também na Região III ($x > a$) a

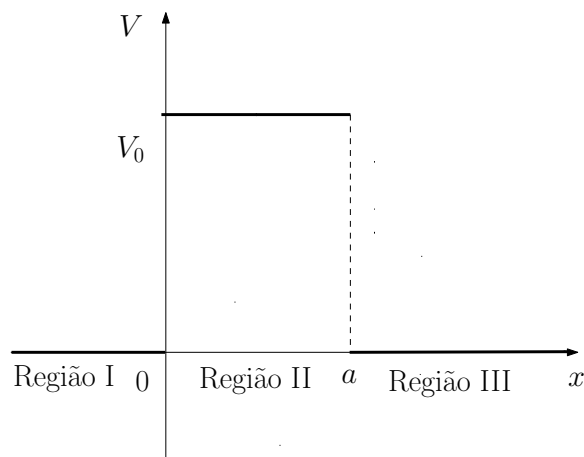


Figura 7.4: Barreira retangular.

equação de Schrödinger independente do tempo implica em

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x), \quad x < 0 \text{ ou } x > a, \quad (7.46)$$

enquanto na Região II ($0 < x < a$) temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x), \quad 0 < x < a. \quad (7.47)$$

Exigiremos continuidade da solução $\psi(x)$ e da primeira derivada $\frac{d}{dx}\psi(x)$ nos pontos $x = 0$ e $x = a$. Convém tratar os casos $E < V_0$ e $E > V_0$ separadamente.

$E < V_0$ Para valores negativos de E o módulo de toda solução não nula da equação de Schrödinger independente de tempo (e que satisfaz as condições de continuidade nos pontos 0 e a) cresce exponencialmente quando x cresce, ou quando x decresce ilimitadamente. Portanto consideremos o intervalo $0 < E < V_0$. A solução geral é dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & \text{se } x < 0, \\ Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x} & \text{se } 0 < x < a, \\ Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} & \text{se } x > a, \end{cases} \quad (7.48)$$

onde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

e os coeficientes satisfazem equações decorrentes das condições de continuidade da função ψ e da primeira derivada. As condições de continuidade no ponto $x = 0$ implicam em

$$\begin{aligned} A + B &= F + G \\ ik_1(A - B) &= \kappa(F - G) \end{aligned} \quad (7.49)$$

e as do ponto $x = a$ implicam em

$$\begin{aligned} Fe^{\kappa a} + Ge^{-\kappa a} &= Ce^{ik_1a} + De^{-ik_1a} \\ \kappa(Fe^{\kappa a} + Ge^{-\kappa a}) &= ik_1(Ce^{ik_1a} - De^{-ik_1a}). \end{aligned} \quad (7.50)$$

Sistemas em uma dimensão: estados não ligados

Considerando um experimento no qual partículas são disparadas pela esquerda, temos $D = 0$. O fluxo de probabilidade na Região III é associado à onda transmitida,

$$j_{\text{trans}} = \frac{\hbar k}{m} |C|^2.$$

O fluxo de probabilidade na Região I é uma soma,

$$j_1 = j_{\text{incidente}} + j_{\text{refletida}}$$

onde os fluxos

$$j_{\text{incidente}} = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2, \quad j_{\text{refletida}} = -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2$$

se referem a onda incidente e a onda refletida, correspondentemente. Os coeficientes T (probabilidade de de transição) e R (probabilidade de reflexão) definimos do mesmo modo como no caso do potencial degrau,

$$T = \frac{|j_{\text{trans}}|}{|j_{\text{incidente}}|} = \frac{|C|^2}{|A|^2}, \quad R = \frac{|j_{\text{refletida}}|}{|j_{\text{incidente}}|} = \frac{|B|^2}{|A|^2}.$$

Eliminando os coeficientes F e G das equações (7.49), (7.50), encontramos

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2 \kappa a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}, \quad R = \left[1 + \frac{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)}{\sinh^2 \kappa a} \right]^{-1}. \quad (7.51)$$

Verifica-se facilmente que $T + R = 1$.

Sendo T positivo, uma partícula com energia E menor que V_0 pode atravessar a barreira! O fenômeno é chamado *efeito túnel*. Experimentalmente comprovado, o efeito é usado em dispositivos como o *diodo túnel* e o *microscópio eletrônico de varredura por tunelamento*.

Quando $\kappa a \gg 1$, podemos usar a fórmula aproximada

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2\kappa a}, \quad \kappa a \gg 1. \quad (7.52)$$

$E > V_0$ Neste caso, na Região II a solução da Equação de Schrödinger independente do tempo tem a formado

$$\psi(x) = Fe^{ik_2x} + Ge^{-ik_2x},$$

onde

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}.$$

As condições de continuidade implicam em equações para os coeficientes A , B , C , F , G . Dessas equações podemos determinar os quocientes C/A e B/A , e, finalmente, determinar os coeficientes de transição e de reflexão:

$$T = \left[1 + \frac{\text{sen}^2 k_2 a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}, \quad R = \left[1 + \frac{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)}{\text{sen}^2 k_2 a} \right]^{-1}. \quad (7.53)$$

Como a equação mostra, o valor do coeficiente de transmissão T é, geralmente, menor que um. Na mecânica quântica, uma partícula com energia $E > V_0$ pode passar pela barreira, mas, com uma certa probabilidade, pode ser, também, refletida pela barreira.

7.5 Resumo

Estudamos estados não ligados e processos de espalhamento. Introduzimos o conceito do pacote de onda no contexto da descrição dos estados de uma partícula livre. Estudamos o comportamento de uma partícula que enfrenta um potencial degrau e, em particular, o efeito de penetração da partícula na região classicamente proibida. Fizemos um estudo teórico do espalhamento de partículas por uma barreira de potencial. Deduzimos fórmulas para os coeficientes de reflexão e de transmissão. Mostramos que a mecânica quântica explica o efeito túnel.

7.6 Conclusões

- O espectro da energia de uma partícula livre é contínuo.

Sistemas em uma dimensão: estados não ligados

- As soluções da equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula livre não são funções normalizáveis. Estas soluções não representam estados do sistema.
- Os estados do sistema são representados por superposições apropriadas das soluções da equação de Schrödinger independente do tempo.
- A evolução dos estados é representada por pacotes de onda.
- O valor esperado do momento linear para uma partícula livre não depende do tempo. O valor esperado da coordenada é uma função linear do tempo.
- Evoluindo no tempo, o pacote sofre um alargamento.
- Uma partícula de energia $E < V_0$ sempre será refletida por um degrau de altura V_0 .
- Uma partícula de energia $E > V_0$ pode passar no degrau, mas também pode ser refletida. (Na mecânica quântica uma partícula com energia $E > V_0$ nunca é refletida.)
- A mecânica quântica explica processos de tunelamento.

7.7 Resumo

7.8 Glossário

- coeficiente de reflexão
- coeficiente de transmissão
- efeito túnel (tunelamento)
- pacote de onda

- penetração na região classicamente proibida
- velocidade de fase
- velocidade de grupo

7.9 Atividades

ATIV. 7.1. Mostre que a função $\psi(x, t)$, definida na equação (7.9), é uma solução da equação de Schrödinger (7.1).

ATIV. 7.2. Mostre que, para um potencial degrau, o fluxo de probabilidade na Região II é dado pela eq. (7.40).

ATIV. 7.3. Mostre que, para um potencial degrau, o fluxo de probabilidade na Região I é dado pela eq. (7.34).

ATIV. 7.4. Ache os coeficientes de reflexão e transmissão do potencial degrau para uma partícula com energia $E = 3V_0$.

7.10 Referências

1. EISBERG, R.; RESNICK, R. *Física Quântica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. Rio de Janeiro: Campus, 1979.
2. GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. São Paulo: Pearson, 2011.
3. GREINER, W. *Quantum Mechanics: An Introduction*. Berlin: Springer-Verlag, 2000.