Aproximação WKB
Tunelamento

Marina Nielsen

WKB - Wentzel, Kramers, Brillouin
útil para achar soluções da equação de Schrödinger independente do tempo em regiões onde V(x) não varia muito

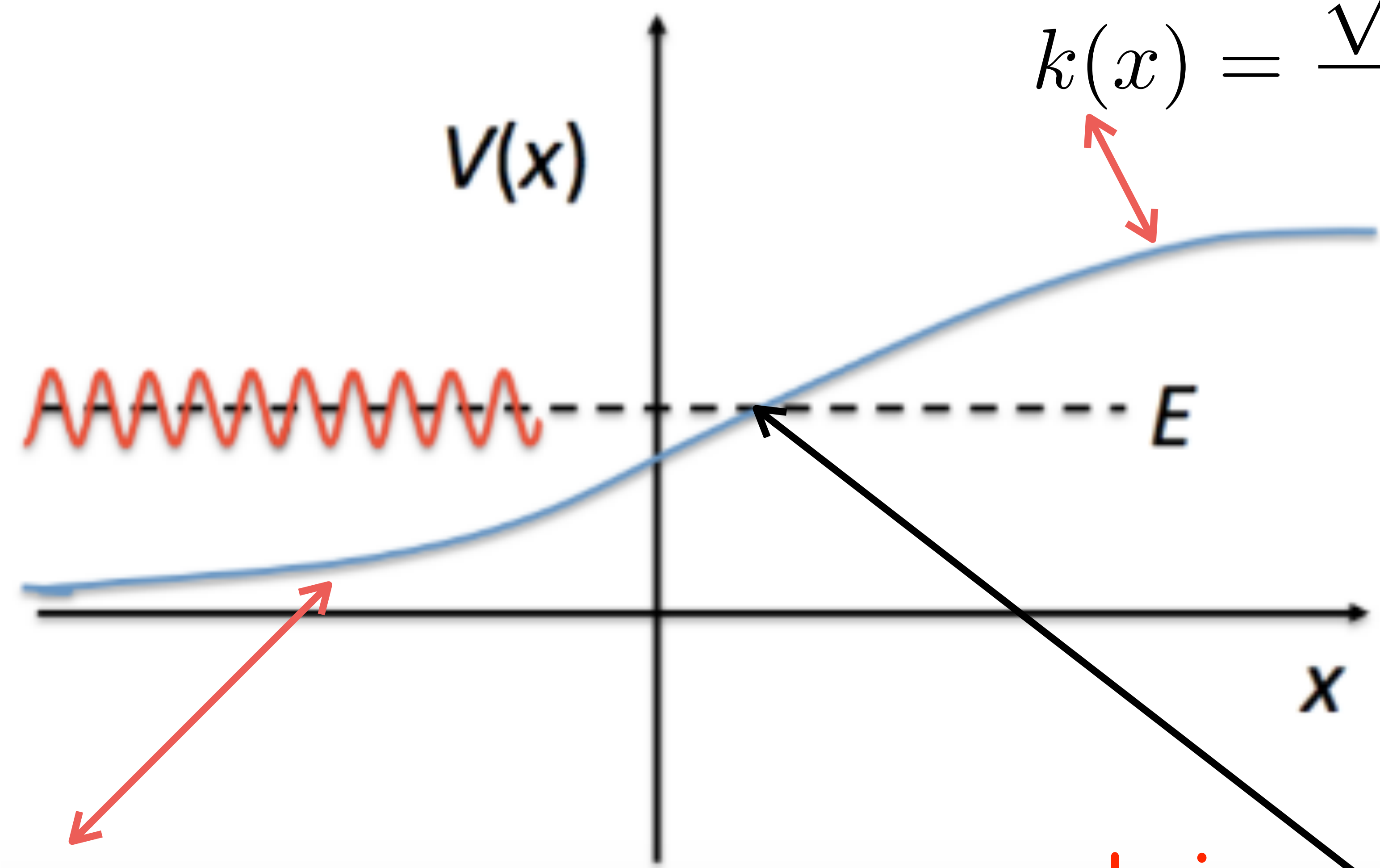
Se V(x) é constante e E>V

$$\psi(x) = A\, e^{\pm ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$$

e se E<V

$$\psi(x) = A\, e^{\pm kx}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$$

Se V(x) não for constante, mas variar lentamente com x na região considerada, podemos ainda dizer que as soluções serão aproximadamente as anteriores, só que com A→A(x) e kx→k(x) (WKB)



$$k(x) = \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar}$$

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m(E-V(x))}}{\hbar}$$

obviamente essa aproximação não vale perto do ponto de retorno

Região Clássica $\rightarrow$ E>V(x)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p(x)^2}{\hbar^2}\psi(x)$$

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

usando $\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}$ temos que $\dfrac{d\psi}{dx} = (A' + iA\phi')e^{i\phi(x)}$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2)e^{i\phi(x)}$$ e portanto

$$A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A$$

como p² é real, temos: $\begin{cases} A'' = A\left[(\phi')^2 - \dfrac{p^2}{\hbar^2}\right] \\ 2A'\phi' + A\phi'' = 0 \Rightarrow (A^2\phi')' = 0 \end{cases}$

$$(A^2\phi')' = 0 \Rightarrow A^2\phi' = C^2 \Rightarrow A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}}$$

a outra equação: $A'' = A\left[(\phi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\right]$, não é, em geral, solúvel.

Entretanto, se supormos que A(x) varia lentamente com x tal que $A'' \simeq 0$, então temos: $\phi' = \pm\frac{p}{\hbar} \Rightarrow \phi(x) = \pm\frac{1}{\hbar}\int dx\ p(x)$

Assim, a função de onda na aproximação de WKB é dada por:

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} \quad \text{com} \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

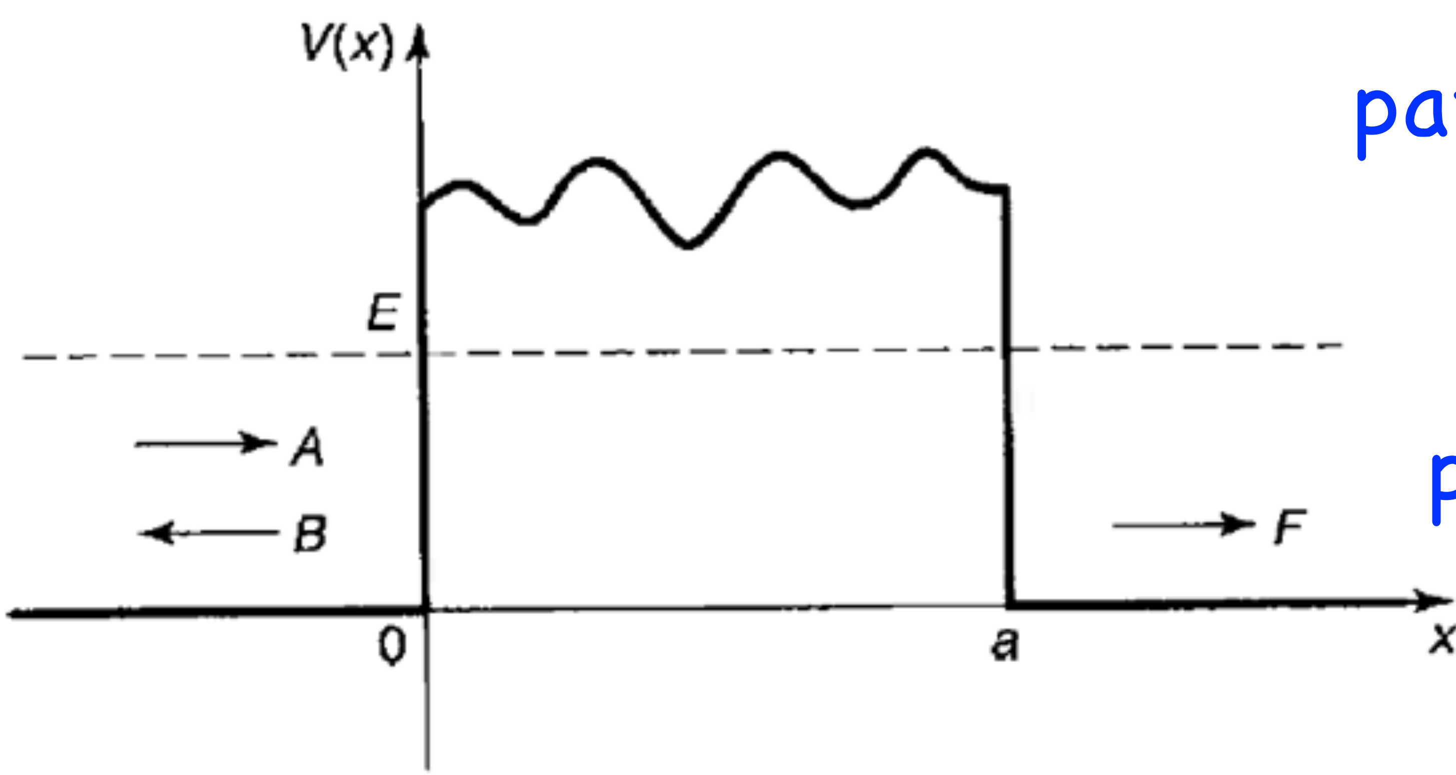
a solução geral será uma superposição dessas 2 soluções

Tunelamento

até aqui tratamos a região clássica onde E>V(x), mas a extensão para a região onde E<V(x) é automática, onde só precisamos considerar p imaginário. Assim:

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx} \quad \text{com} \quad |p(x)| = \sqrt{2m(V(x) - E)}$$

Considere agora o problema do espalhamento numa barreira retangular como a da figura



para x<0: $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

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

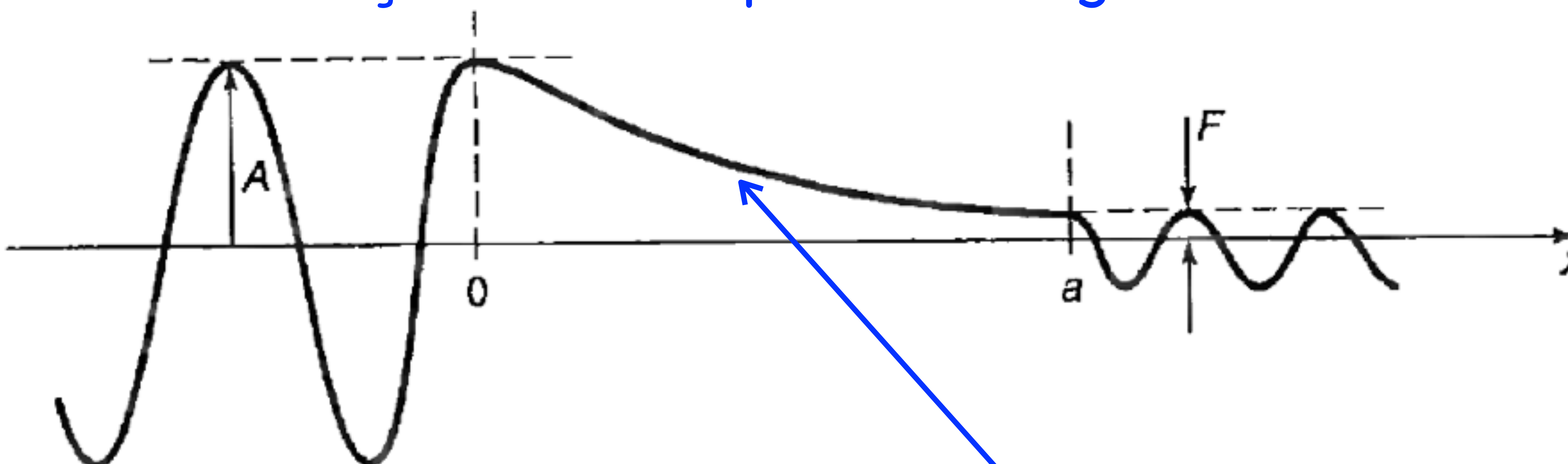
para x>0: $\psi(x) = Fe^{ikx}$

onde F é a amplitude transmitida

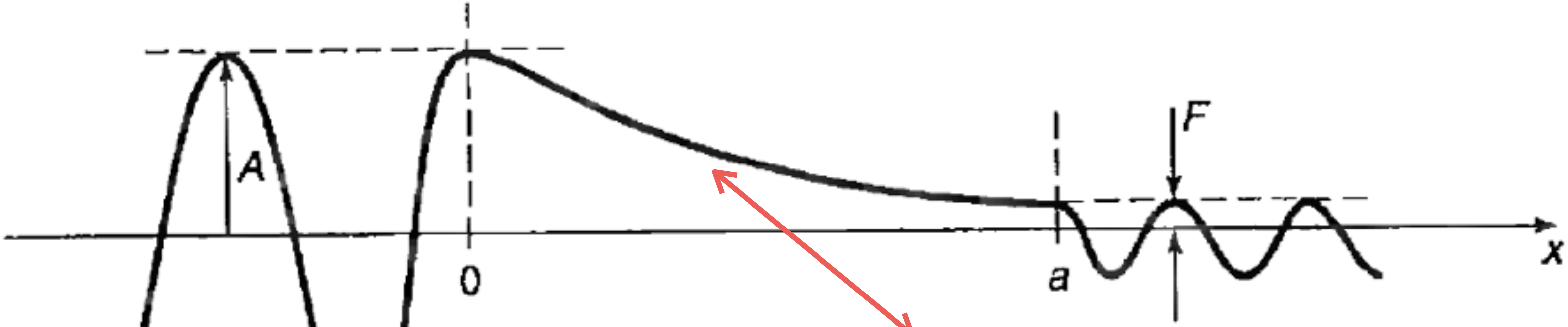
para 0<x<a a função de onda na aproximação de WKB é:

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^x dx' \; |p(x')|} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x dx' \; |p(x')|}$$

se a barreira for bem alta, o que significa que a probabilidade de tunelamento é pequena, C≃0, e nesse caso a função de onda parecerá algo como:



a amplitude relativa das ondas incidentes (A) e transmitida (F) será determinada pela redução da exponencial na região clássica

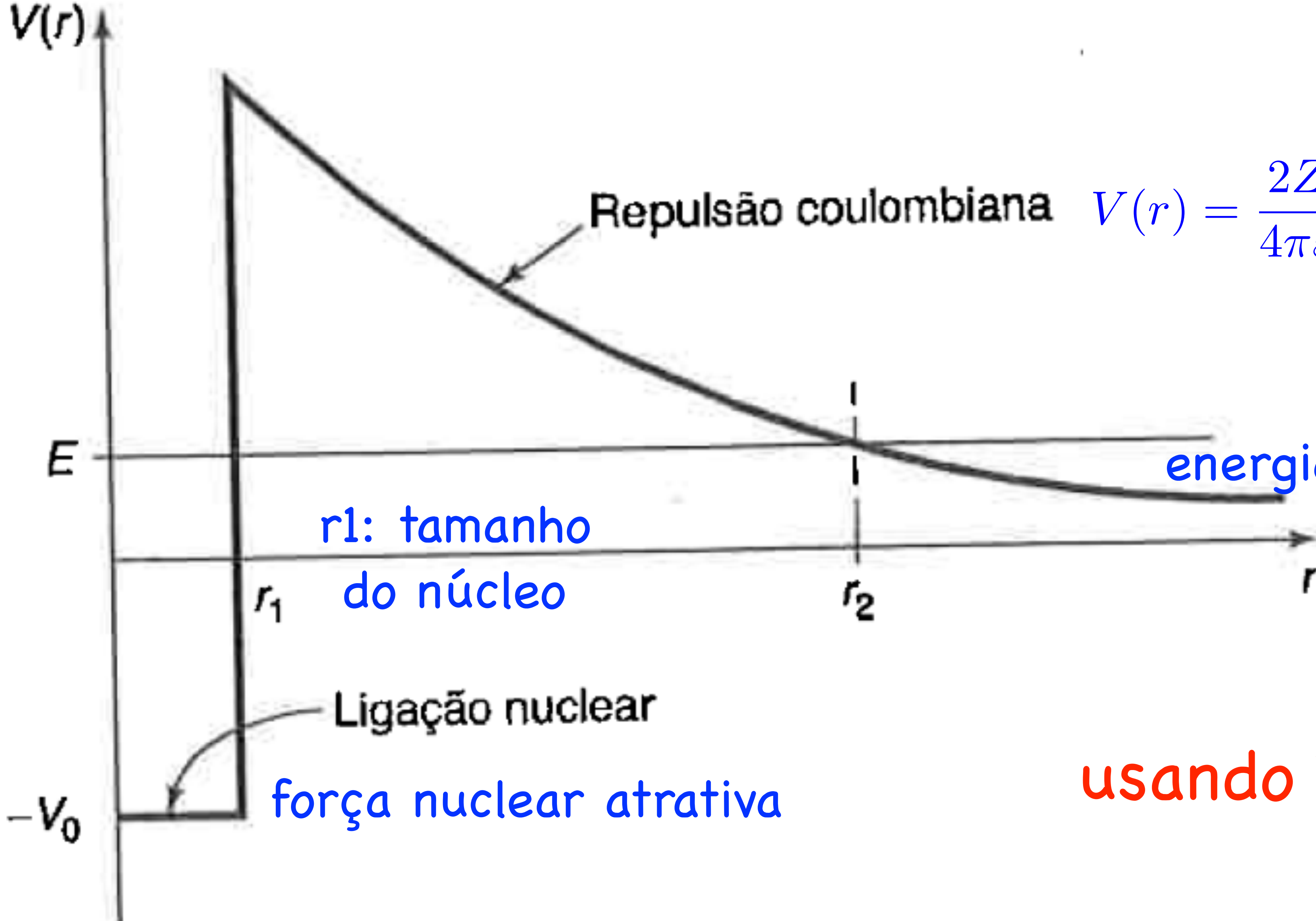


$$\frac{|F|}{|A|} \sim e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a dx\ |p(x)|}$$

assim, o coeficiente de transmissão será dado por:

$$T = \left(\frac{|F|}{|A|}\right)^2 \simeq e^{-2\gamma}, \ \ \gamma = \frac{1}{\hbar}\int_0^a dx\ |p(x)|$$

Teoria de Gamov para o decaimento α (1928)



$V(r) = \dfrac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

energia da partícula α emitida

$E = \dfrac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}$

r1: tamanho do núcleo

força nuclear atrativa

usando $T = e^{-2\gamma}$ com:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2} dr\ \sqrt{2m(V(r)-E)} = \frac{1}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2} dr\ \sqrt{2mE\left(\frac{r_2}{r}-1\right)}$$

obtemos

$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[r_2\left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) - \sqrt{r_1(r_2-r_1)}\right]$$

para $r_1 \ll r_2$ $\quad \sin^{-1}\sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \simeq \sqrt{\frac{r_1}{r_2}}$, e com isso

$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[r_2\left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)}\right] \simeq \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[r_2\left(\frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) - \sqrt{r_1 r_2}\right]$$

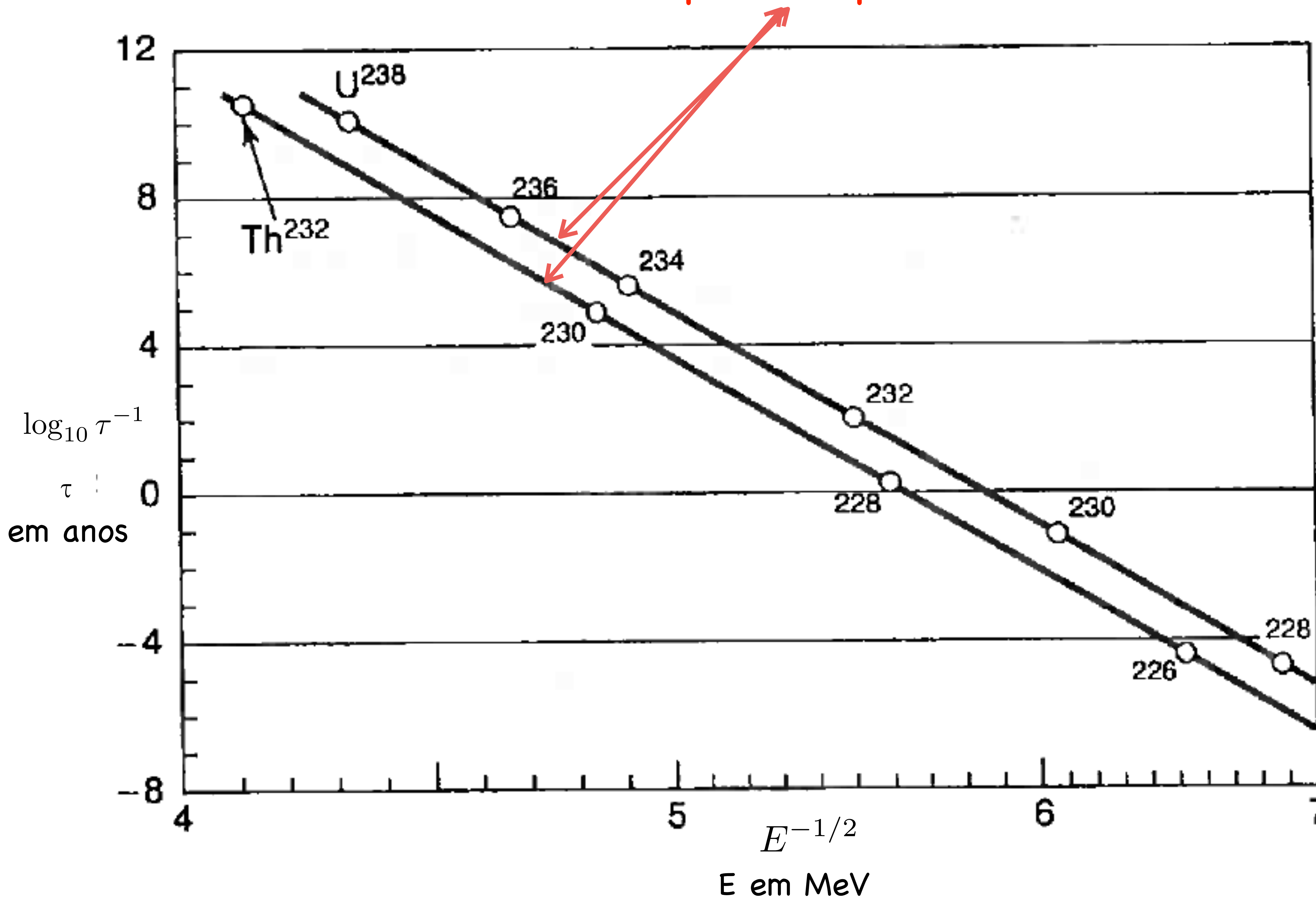
$$\gamma \simeq \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[\frac{\pi}{2}r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2}\right] = K_1\frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2\sqrt{Z r_1}$$

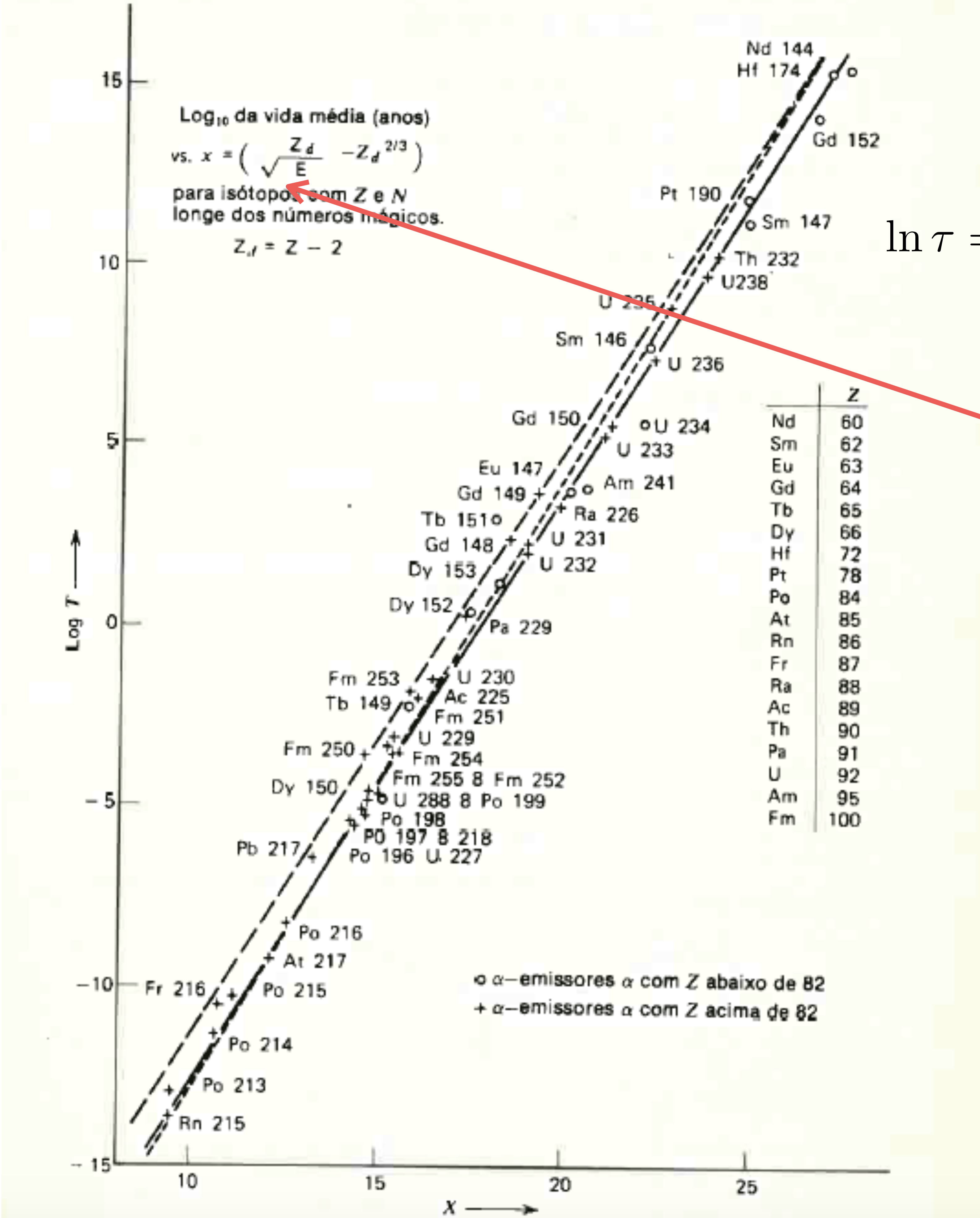
com: $$\begin{cases} K_1 = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} = 1.980\ \mathrm{MeV}^{1/2} \\ K_2 = \sqrt{\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{4\sqrt{m}}{\hbar}} = 1.485\ \mathrm{fm}^{-1/2} \end{cases}$$

a vida média de decaimento do núcleo radioativo é proporcional a T^{-1}, ou seja, $\tau = cte\ e^{2\gamma}$. Com isso

$$\ln\frac{1}{\tau} = C_1 - 2\gamma = C_1 - 2K_1\frac{Z}{\sqrt{E}} + 2K_2\sqrt{r_1}\sqrt{Z} = B_1 - \frac{B_2}{\sqrt{E}}$$ para um Z fixo

exatamente o esperado para um Z fixo!





$$\ln \tau = C_1 + 2K_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - 2K_2 \sqrt{r_1}\sqrt{Z}$$

$$r \to Z^{1/3} \Rightarrow \sqrt{r} \to Z^{1/6}$$

$$\ln \tau = C_1 + C_2 \left(\frac{Z}{\sqrt{E}} - Z^{2/3} \right)$$