Instituto de Física
USP

Física V - Aula 32

Professora: Mazé Bechara

Aula 32 – O degrau de potencial. De volta a estados ligados em potenciais não unidimensionais.

1. **Os auto estados de energia e seus auto-valores para um potencial "degrau" (continuação da aula anterior).**

- **(a) O fluxo e o coeficiente de reflexão e o de transmissão.**
- **(b) As densidades de probabilidades e as energias. Interpretações.**

2. **Uma barreira de potencial. Demonstração formal das funções de onda a partir da equação de auto-estados de energia.**

   (a) Os fluxos de incidência, reflexão e transmissão, a partir das condições físicas de continuidade da função de onda e de sua derivada. (Ufa! Haja conta!!!)

   (b) Os coeficientes de reflexão e transmissão da partícula pela barreira e a relação da conservação da partícula!

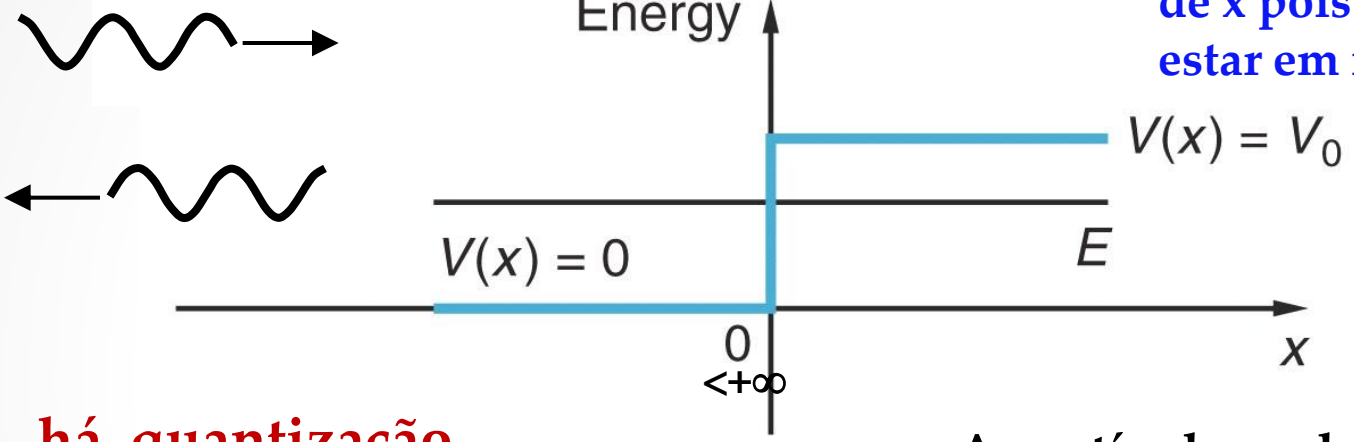
   (c) O limite dos coeficientes de reflexão e de transmissão para largura a $\rightarrow\infty$: o resultado do potencial degrau!

3. **Características gerais dos potenciais ligados e não ligados.**

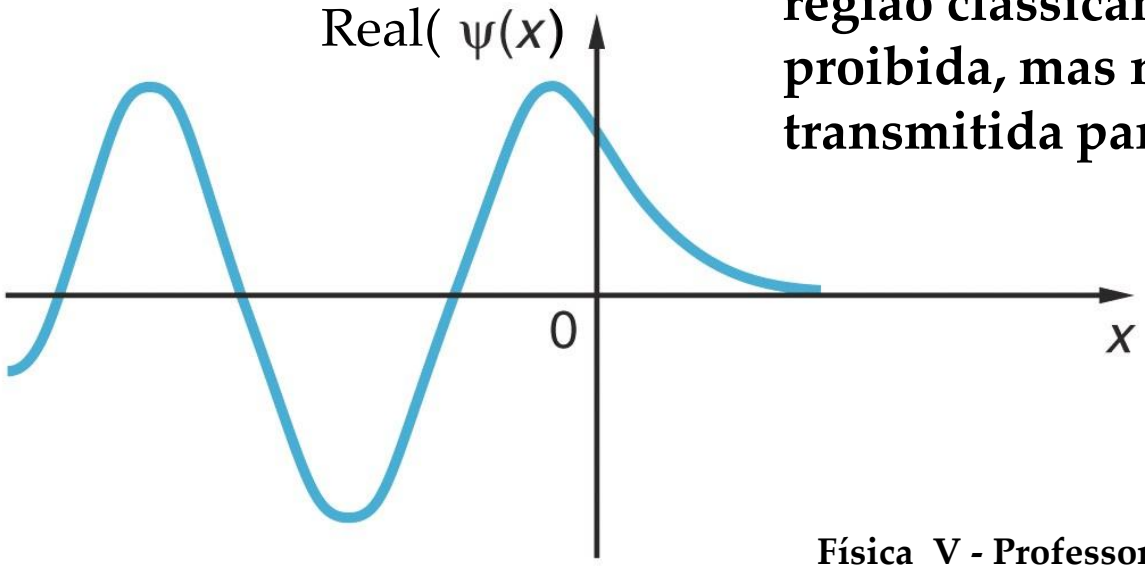
A função de onda

Cuidado!

Não tem como incidir no sentido negativo de x pois nunca pode estar em $x \rightarrow +\infty$



Não há quantização da energia



A partícula pode entrar na região classicamente proibida, mas não será transmitida para +∞!

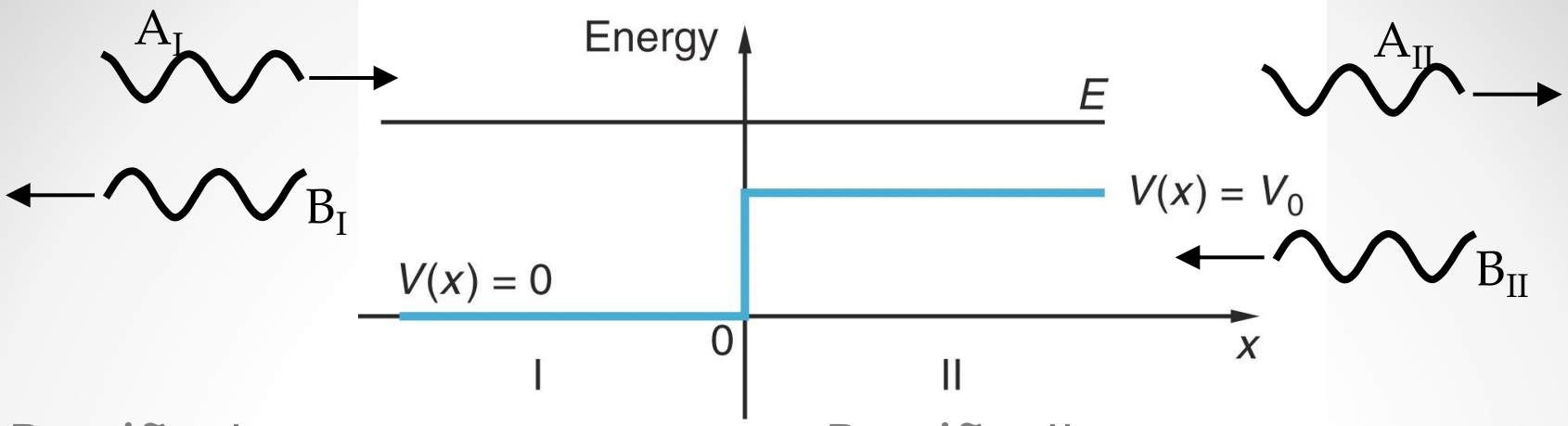
Solução do degrau na mecânica de Schroedinger: E<Vo

As funções de onda (aula anterior):

$$\varphi_I(x \le 0) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(x \ge 0) = B_{II} e^{-k'x} \qquad k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

- **No instante inicial a partícula está necessariamente na região de x<0, pois para x → +∞, a função de onda seria infinita, o que exige que A_{II}=0.**
- **Função de onda real na região II ⇒ S_{transm}=0 ⇒ T=0**
- **Colocando as condições físicas (*3 constantes*):**
- $\varphi_I(x=0) = \varphi_{II}(x=0)$ **e** $\varphi'_I(x=0) = \varphi'_{II}(x=0)$
- **Chega-se à:** $B_I = -A_I \dfrac{1 + i\frac{k}{k'}}{1 - i\frac{k}{k'}}$ **⇒ R=-1**



Região I:

$$\frac{d^2\varphi_I(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_I(x) \qquad \frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$$

$$\varphi_I(x) = \underbrace{A_I \exp(ikx)}_{\text{Onda no sentido positivo de x}} + \underbrace{B_I \exp(-ikx)}_{\text{Onda no sentido negativo de x}}$$

Região II:

$$\frac{d^2\varphi_{II}(x)}{dx^2} = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\varphi_{II}(x) \qquad \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = k'^2$$

$$\varphi_{II}(x) = \underbrace{A_{II} \exp(ik'x)}_{\text{Onda no sentido positivo de x}} + \underbrace{B_{II} \exp(-ik'x)}_{\text{Onda no sentido negativo de x}}$$

Possibilidades neste caso:

a) **Para termo com A_I como onda incidente (no sentido de x positivo), então termo com B_I é a refletida, e termo com A_{II} a transmitida, B_{II}=0 (não tem onde refletir!)**

b) **Para termo com B_{II} incidente (no sentido de x negativo), o termo com A_{II} é a onda refletida, e B_I a onda transmitida, A_I = 0 (não tem como refletir.)**

Solução do degrau na mecânica de Schroedinger: E>Vo

Colocando as condições físicas de continuidade na função de onda e na sua derivada em x. De novo: três constantes e duas equações físicas (feito em aula. REFAÇA!):

$$\varphi_I(x=0)=\varphi_{II}(x=0) \qquad \varphi'_I(x=0)=\varphi'_{II}(x=0)$$

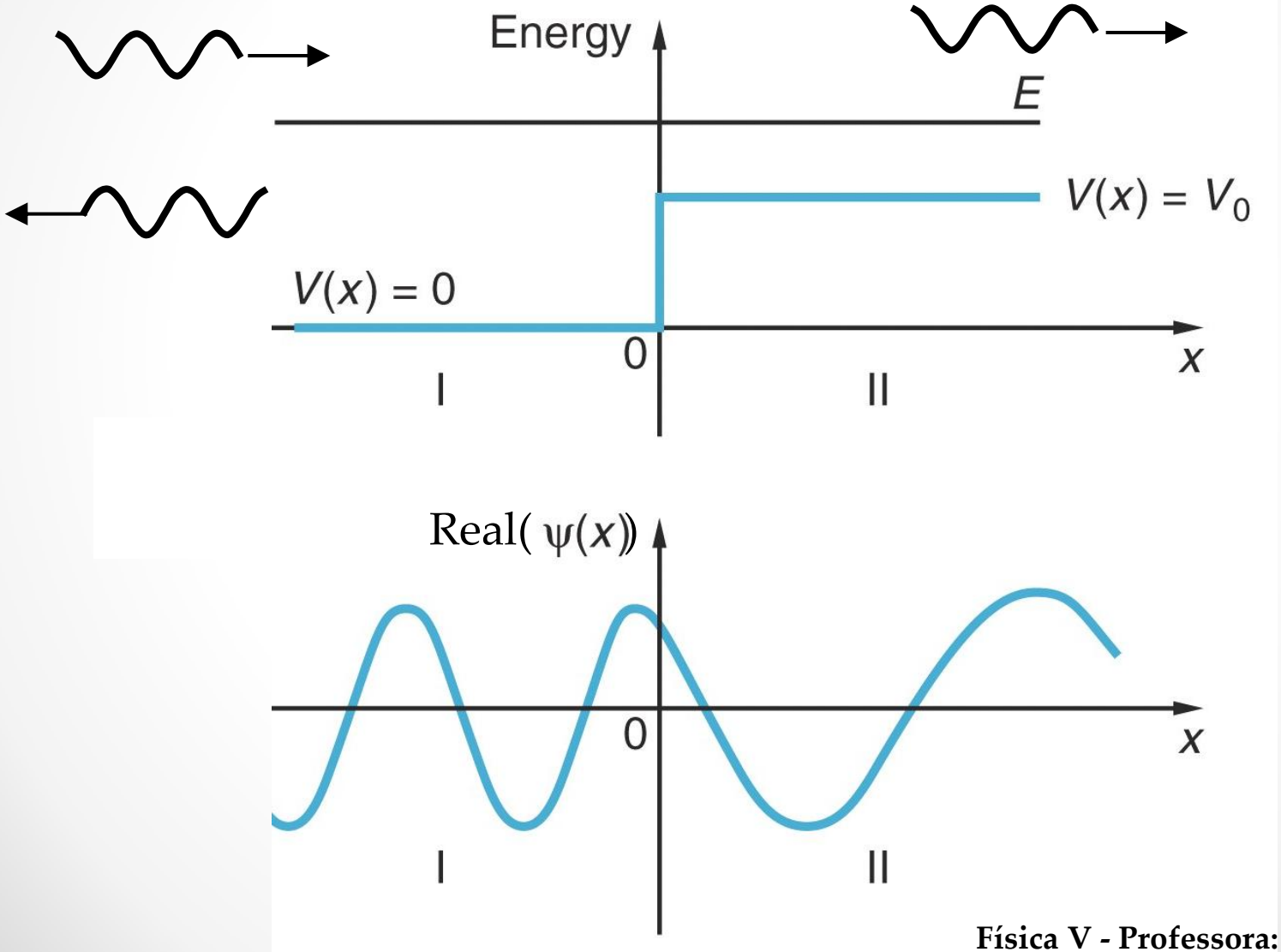
- **Chega-se nos valores para as constantes em termos de uma delas (a constante do termo de incidência):**

$$B_I = A_I \frac{1-\frac{k}{k'}}{1+\frac{k}{k'}} \qquad A_{II} = A_I\left[1+\frac{1-k'}{1+k'}\right]$$

- **Donde resultou:**

$$R = -\frac{(k-k')^2}{(k+k')^2} \qquad T = \frac{4kk'}{(k+k')^2}$$

Função de onda da partícula incidindo no sentido positivo de x



A densidade de probabilidade para E>Vo e incidência no sentido de x positivo.

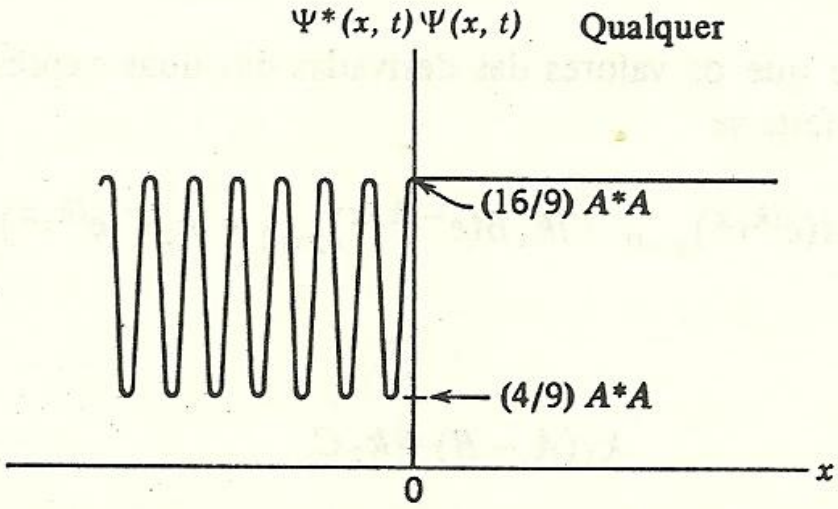
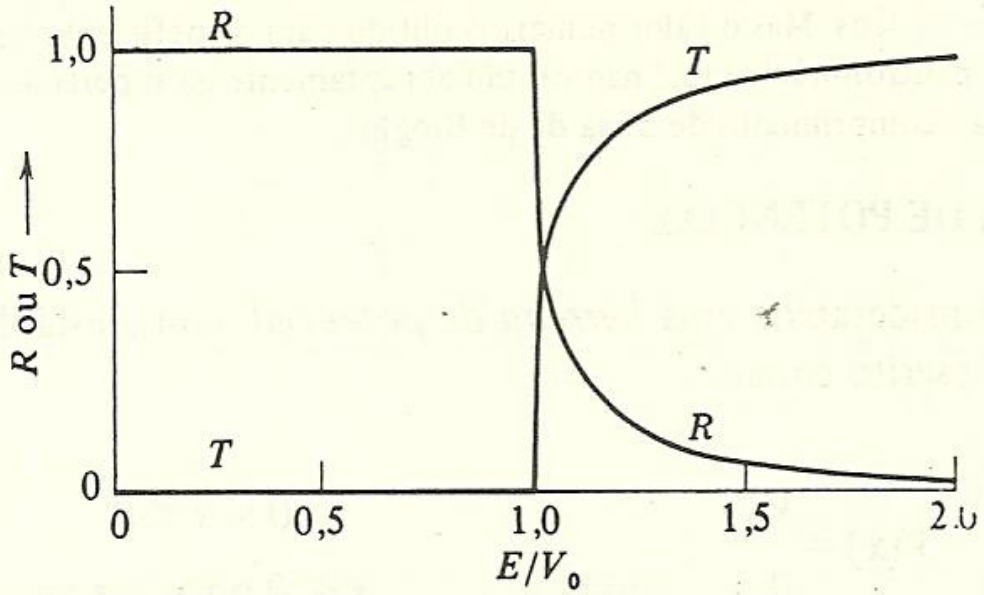


FIGURA 6-10. A densidade de probabilidade $\Psi^*\Psi$ para a autofunção de (6-39), quando $k_1 = 2k_2$.

Os coeficientes de reflexão e transmissão em função da relação E/V_o – demonstração em aula

região.



E<V_o

R=1
T=0
1+R=T

E>V_o

$R = (k-k')^2/(k+k')^2$
$T = 4kk'/(k+k')^2$

FIGURA 6-11. Os coeficientes de reflexão e transmissão R e T para uma partícula incidente sobre um potencial degrau. A abscissa E/V_0 é a razão entre a energia total da partícula e o aumento em sua energia de potencial no degrau. O caso $k_1 = 2k_2$, ilustrado na figura 6-10, corresponde a $E/V_0 = 1{,}33$.

Figura do Física Quântica – Eisberg - Resnick

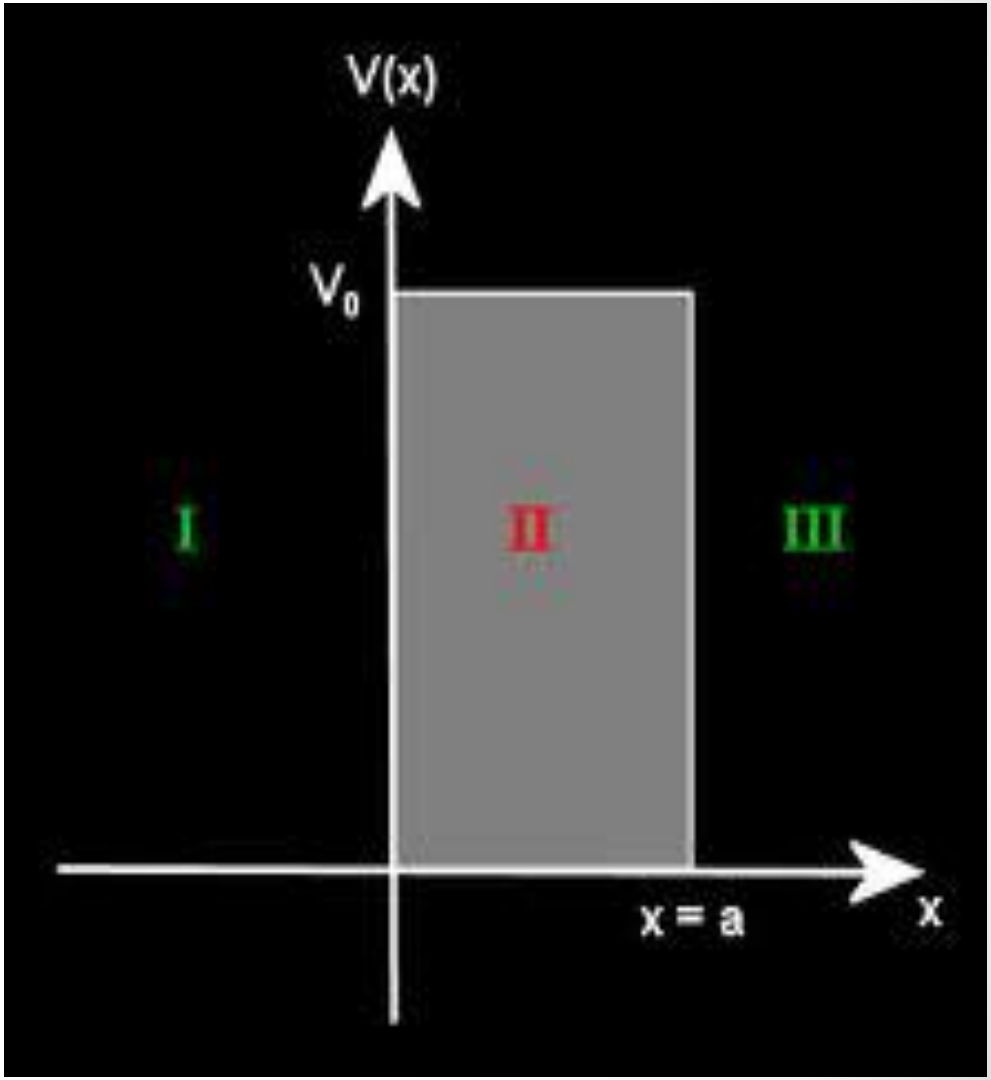
Cuidado: No Eisberg R e T são definidos como positivos sempre. Assim a lei de conservação da partícula é: R+T=1

Barreira de potencial

Se a partícula incidir na região I nesse região há onda refletida na barreira (em x=0 - classicamente permitido), e onda transmitida em III (classicamente proibido para $E<V_o$)).

Se a partícula incidir em III, nessa região haverá onda incidente e refletida (em x=a - classicamente permitido), e terá onda transmitida em I (classicamente proibido proibida para $E<V_o$) – daí o nome EFEITO TÚNEL!

Para haver conservação de partícula, a probabilidade de incidência deve ser igual a probabilidade de reflexão mais a de transmissão *(probabilidade é grandeza positiva)*



Solução da barreira na mecânica de Schroedinger: E>Vo

As funções de onda:

$$\varphi_I(x \le 0) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(x \ge 0) = A_{II} e^{ik'x} + B_{II} e^{-ik'x} \qquad k'^2 = \frac{2m(E - V_o)}{\hbar^2} > 0$$

-
- **No instante inicial a partícula pode estar na região de x<0 ou x>a.**
- **Donde resulta (feito em aula. REFAÇA OU MELHOR, FAÇA NO OUTRO SENTIDO) para incidência no sentido positivo de x:**

Barreira de potencial
Física Clássica → Quântica

- **Para $T=E-V(x)>0$ → $E>V(x)$ para todo x**
- **$0<E<V_o$** →Física Clássica: $0<x$ ou $x>a$ dependendo das condições iniciais → trajetórias finitas
  - **Em Quântica são estados não ligados:** as densidades de probabilidades expressam a probabilidade de transmissão e de reflexão da partícula na barreira. **Como veremos há probabilidade de transmissão da partícula sob a barreira – daí o nome efeito túnel**
- **$E>V_o$** → Física Clássica $-\infty<x<+\infty$ → trajetórias infinitas
  - **Em Quântica são estados não ligados;** as densidades de probabilidades expressam a probabilidade de transmissão e de reflexão da partícula na barreira.

Solução da barreira na mecânica de Schroedinger: E<Vo

As funções de onda nas várias regiões do espaço:

$$\varphi_I(x \le 0) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \qquad k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(0 \le x \le a) = A_{II} e^{k_{II} x} + B_{II} e^{-k_{II} x} \qquad k_{II}^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{III}(x \le a) = A_{III} e^{ik_I x} + B_{III} e^{-ik_I x} \qquad k_{III}^2 = k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

- **instante inicial na região de x<0: B_{III}=0 (não tem mudança no potencial em x>a que permita a reflexão da onda da partícula nesta região).**
- **instante inicial na região de x>a: A_I=0 (não haveria em x<0 variação de potencial que refletisse a onda na região)**

Solução da barreira na mecânica de Schroedinger: E<Vo

As funções de onda quando a partícula incide no sentido positivo de x:

$$\varphi_I(x \le 0) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} \qquad k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(0 \le x \le a) = A_{II} e^{k_{II} x} + B_{II} e^{-k_{II} x} \qquad k_{II}^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{III}(x \le a) = A_{III} e^{ik_I x} \qquad k_{III}^2 = k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

- São 4 constantes e quatro condições. As constantes devem ser escritas em termos da constante deo termo de incidência A_I.

Soluções da barreira

Continuidade das funções de onda deslocadas para -a/2 para ficar com o potencial simético:

$$\varphi_I(x=0) = \varphi_{II}(x=0)$$

$$\varphi_{III}(x=a) = \varphi_{II}(x=a)$$

- **Continuidade das derivadas das funções de onda:**

$$\varphi_I'(x=0) = \varphi_{II}'(x=0)$$

$$\varphi_{III}'(x=a) = \varphi_{II}'(x=a)$$

Solução da barreira na mecânica de Schroedinger: E<Vo (feito em aula)

- O coeficiente de reflexão quando *a incidência é no sentido positivo de x* (em t=0 na região de x negativo):

$$R = \frac{S_{refl}}{S_{inc}} = \frac{-v_I |B_I|^2}{v_I |A_I|^2} = \frac{-k_I |B_I|^2}{k_I |A_I|^2} = \frac{-|B_I|^2}{|A_I|^2} =$$

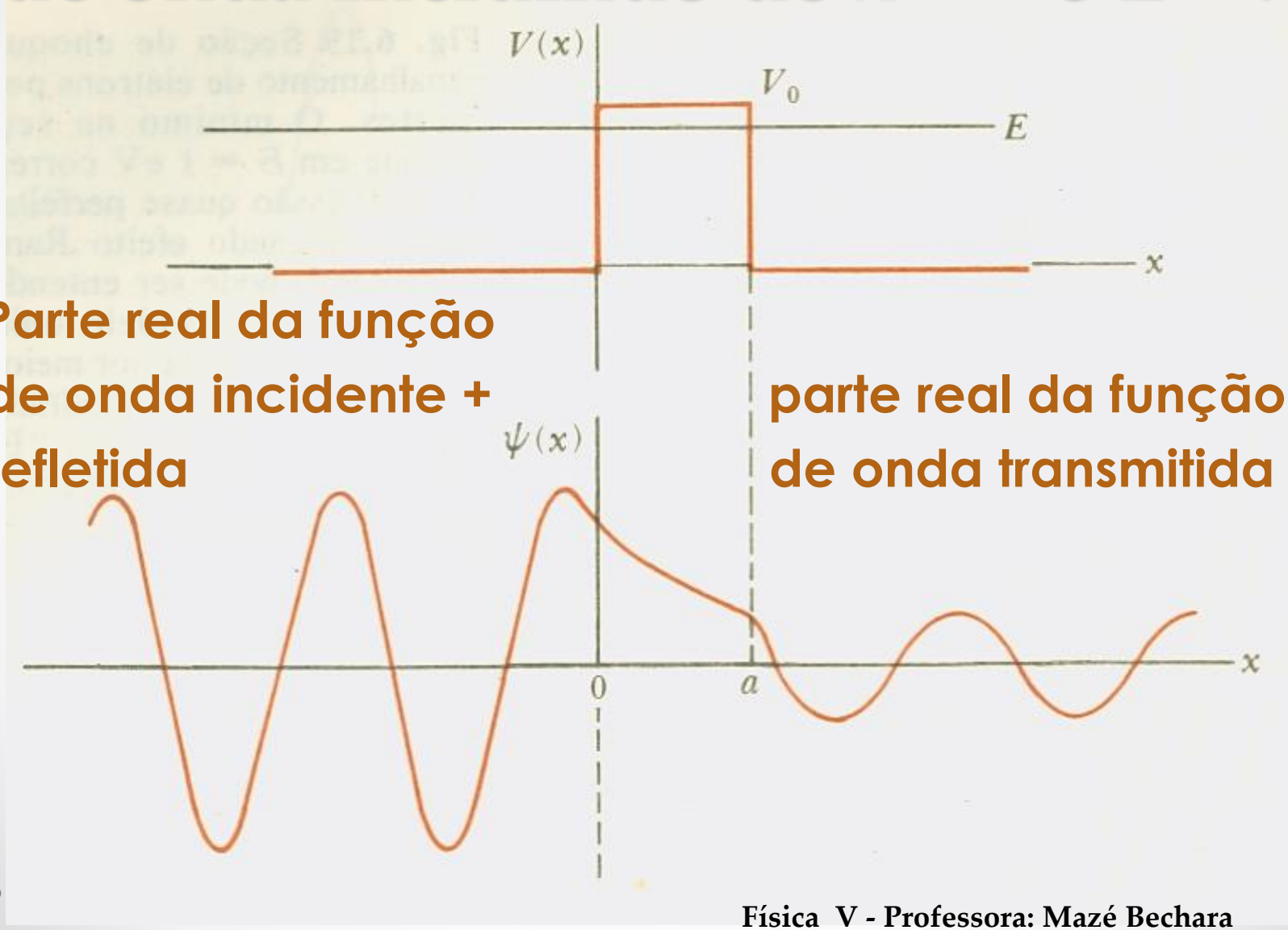
$$= -\{1 + 4\frac{E}{V_o}(1 - \frac{E}{V_o})\frac{(\exp k_{II}a + \exp -k_{II}a)^2}{(\exp k_{II}a - \exp -k_{II}a)^2}\}^{-1}$$

- O coeficiente de transmissão quando a incidência é no sentido positivo de x (região de x negativo):

$$T = \frac{S_{transm}}{S_{inc}} = \frac{v_I |A_{III}|^2}{v_I |A_I|^2} = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2} =$$

$$= \{1 + \frac{1}{16\frac{E}{V_o}(1 - \frac{E}{V_o})}(\exp k_{II}a - \exp -k_{II}a)^2\}^{-1}$$

A barreira de potencial e a função de onda incidindo de x=-∞ e E< Vo



Parte real da função de onda incidente + refletida

parte real da função de onda transmitida

A densidade de probabilidade e o coeficiente de transmissão (inc. -∞ e E< Vo)

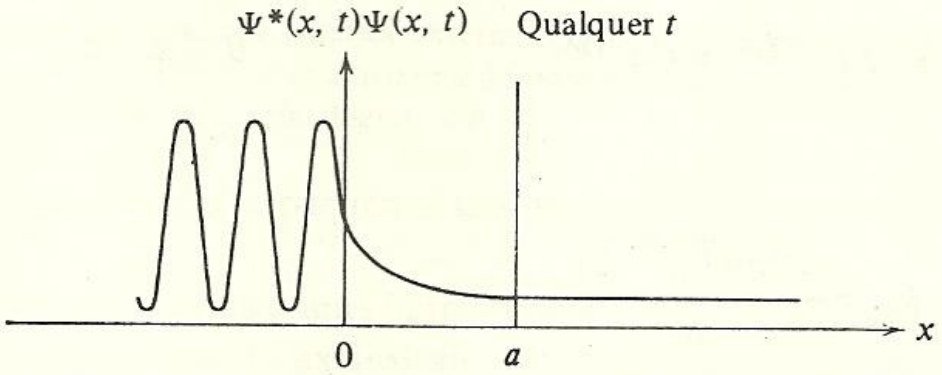


FIGURA 6-14. A função densidade de probabilidade $\Psi^*\Psi$ para uma situação típica de penetração de barreira.

O resultado mais interessante do cálculo é a razão T entre o fluxo de probabilidade transmitido através da barreira para a região $x > a$ e o fluxo de probabilidade incidente sobre a barreira. Obtemos que esse coeficiente de transmissão é

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 + \frac{(e^{k_{II}a} - e^{-k_{II}a})^2}{16\dfrac{E}{V_0}\left(1 - \dfrac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} = \left[1 + \frac{\operatorname{senh}^2 k_{II}a}{4\dfrac{E}{V_0}\left(1 - \dfrac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1} \qquad (6\text{-}49)$$

Figura do R. Eisberg e R. Resnick

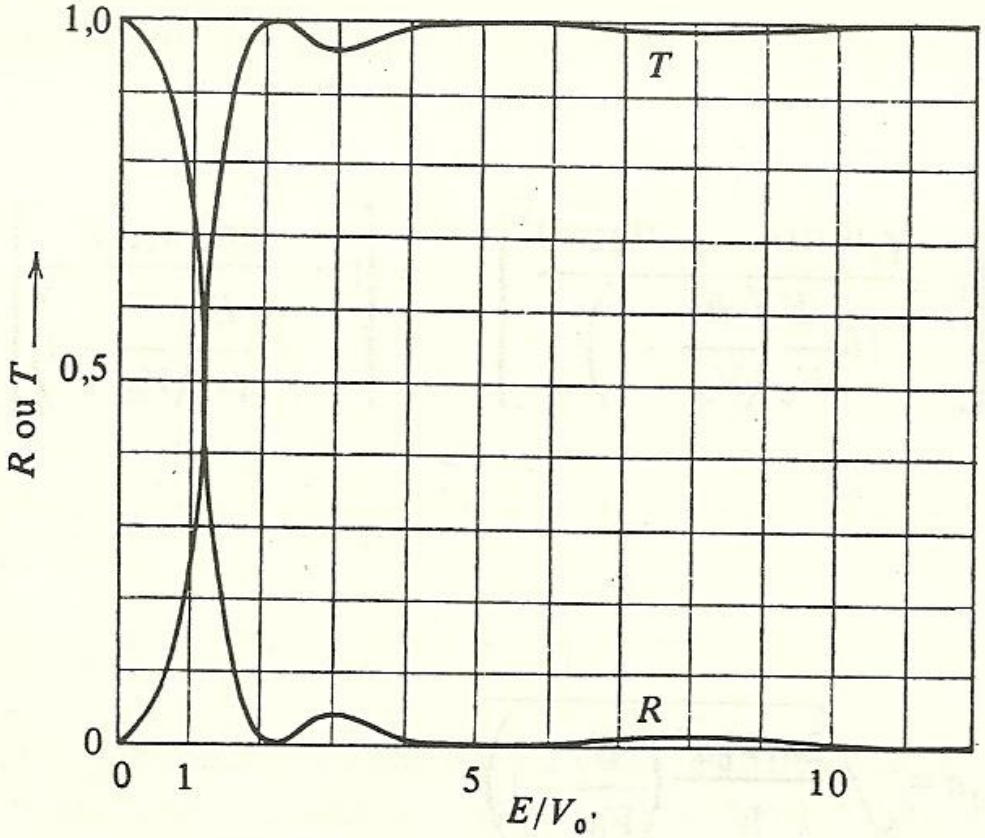


FIGURA 6-15. Os coeficientes de reflexão e transmissão R e T para uma partícula incidindo sobre uma barreira de potencial de altura V_0 e largura a, tal que $2mV_0a^2/\hbar^2 = 9$. A abscissa E/V_0 é a razão entre a energia total da partícula e a altura da barreira de potencial.

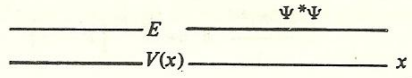
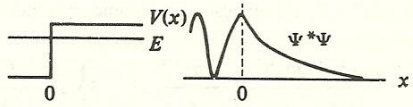
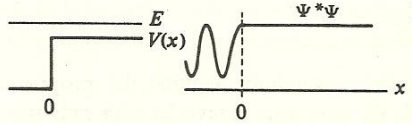
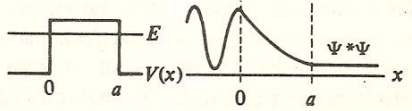
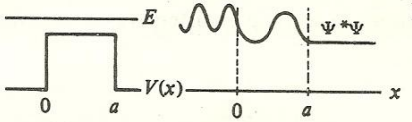
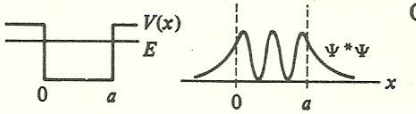
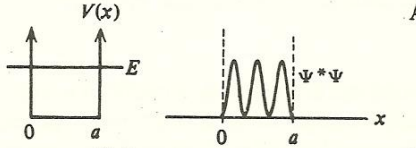
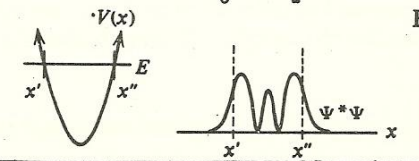
Observação:

Os resultados de R e T para largura da barreira tendendo a infinito coincidem com as soluções R=1 e T=0 para o potencial degrau. Mostre!

Figura do Física Quântica – Eisberg - Resnick

Cuidado: No Eisberg R e T são definidos como positivos sempre. Assim a lei de conservação da partícula é: R+T=1

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

Nome do Sistema	Exemplo Físico	Energias Total e Potencial	Densidade de Probabilidade	Característica Significativa
Potencial nulo	Próton em um feixe de um cíclotron			Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal			Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo			Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula α tentando escapar de barreira coulombiana			Efeito túnel
Barreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados			Nenhuma reflexão em certas energias
Poço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo			Quantização da energia
Poço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa			Aproximação para um poço de potencial finito
Potencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando			Energia de ponto zero

Localize nos potenciais ao lado quais permitem estados NÃO ligados e para que valores de energia.

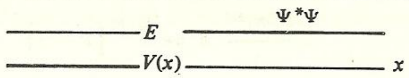
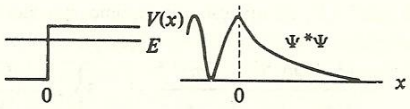
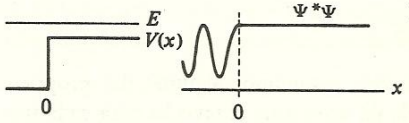
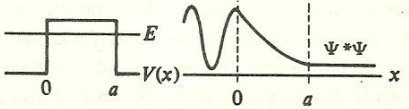
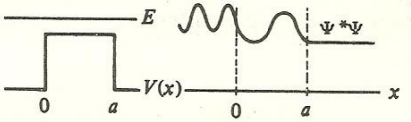
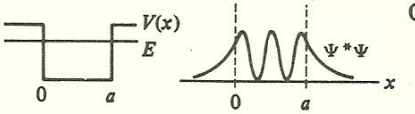
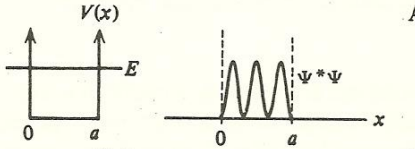
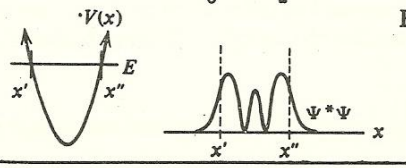
Observe **as características das densidades de probabilidade** destes potenciais, **em particular na região de incidência e de transmissão.**

Todos os estados NÃO ligados têm funções de onda NÃO normalizáveis e imaginárias nas regiões de reflexão e de transmissão. A conservação da partícula vem da relação: 1+R=T.

As energias NÃO são quantizadas.

Figura do Eisberg

TABELA 6-2. Um Resumo dos Sistemas Estudados no Capítulo 6.

Nome do Sistema	Exemplo Físico	Energias Total e Potencial	Densidade de Probabilidade	Característica Significativa
Potencial nulo	Próton em um feixe de um ciclotron			Resultados usados para outros sistemas
Potencial degrau (energia abaixo do topo)	Elétron de condução próximo à superfície do metal			Penetração na região proibida
Potencial degrau (energia acima do topo)	Nêutron tentando escapar de um núcleo			Reflexão parcial na descontinuidade do potencial
Barreira de potencial (energia abaixo do topo)	Partícula α tentando escapar de barreira coulombiana			Efeito túnel
Barreira de potencial (energia acima do topo)	Espalhamento de elétrons por átomos negativamente ionizados			Nenhuma reflexão em certas energias
Poço de potencial quadrado finito	Nêutron num estado ligado no núcleo			Quantização da energia
Poço de potencial quadrado infinito	Molécula estritamente confinada a uma caixa			Aproximação para um poço de potencial finito
Potencial do oscilador harmônico simples	Átomo de uma molécula diatômica vibrando			Energia de ponto zero

Localize nos potenciais ao lado quais permitem estados ligados e para que valores de energia.

Observe **as características das densidades de probabilidade** destes potenciais.

Todos os estados ligados têm funções de onda normalizáveis, parte espacial real e energias quantizadas

Figura do Eisberg