Instituto de Física USP

Física V - Aula 37

Professora: Mazé Bechara

Aula 37 – Auto-estados de energia dos estados não ligadoss de potenciais unidimensionais .

1. Uma barreira de potencial unidimensional de largura a e altura V_o.
   (a) As equações e as auto-funções de energia. As condições físicas sobre as ato-funções, e as constantes não nulas das auto-funções.
   (b) Os fluxos de incidência, reflexão e transmissão da auto-função de energia para energias abaixo da altura da barreira. (Ufa! Haja conta!!!)
   (c) Os coeficientes de reflexão e transmissão da partícula pela barreira e a relação da conservação da partícula!
   (d) O limite dos coeficientes de reflexão e de transmissão para largura a $\rightarrow \infty$: o resultado do potencial degrau!

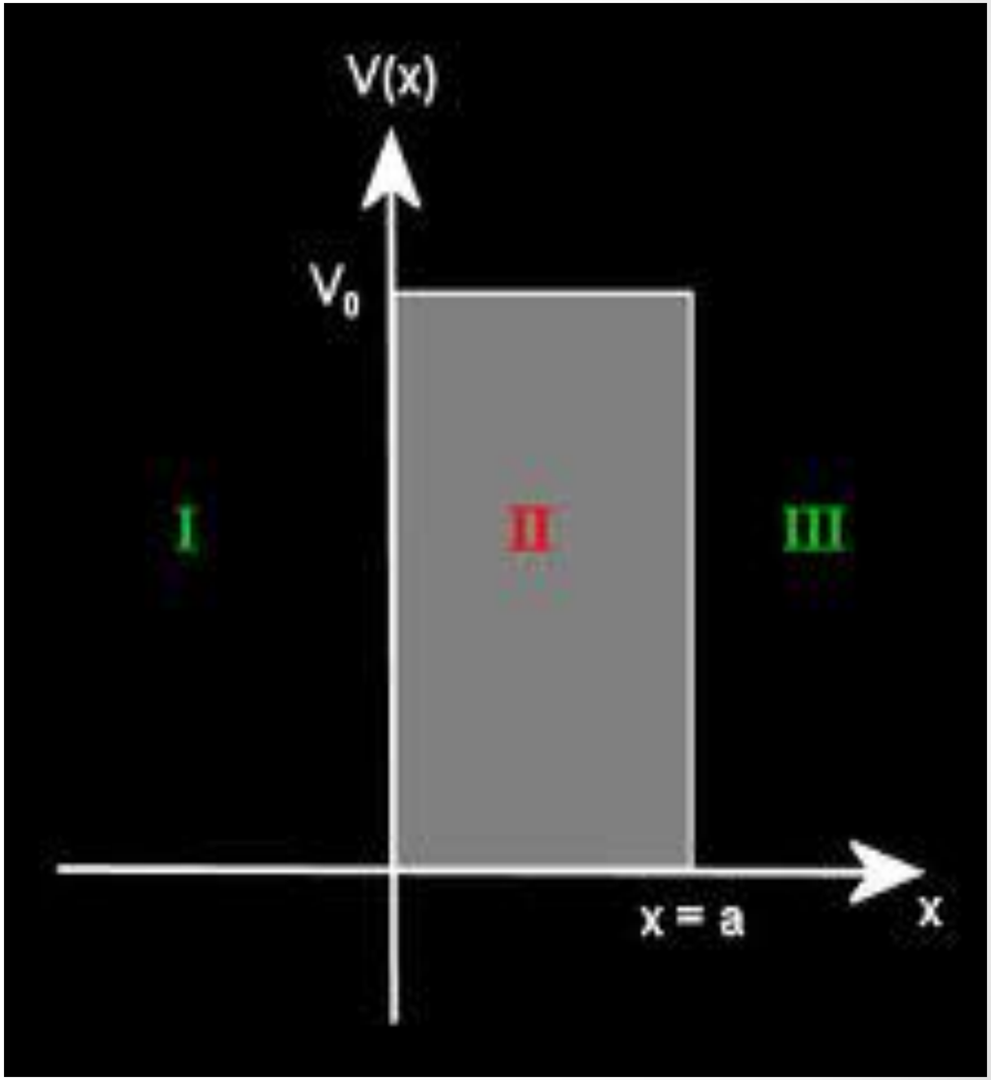
2. Idem para energias acima da altura da barreira.

3. De novo: exemplos e características das densidades de probabilidade de estados ligados e não ligados nos movimentos unidimensionais na mecânica quântica.

Barreira de potencial: *análise qualitativa para $0 < E < V_o$*

Física Clássica:

Se a partícula incidir na barreira na região I, ela o faz com velocidade no sentido positivo de x, bate em x=0 e retorna, com velocidade em sentido oposto, movendo-se na região de x negativo até - ∞, em trajetória infinita. Não passa pelo barreira.



Analogamente: se a partícula incidir na barreira pela região III, o faz com velocidade no sentido negativo de x, bate em x=a e retorna, indo necessariamente para + ∞, em trajetória infinita. Não passa pela barreira.

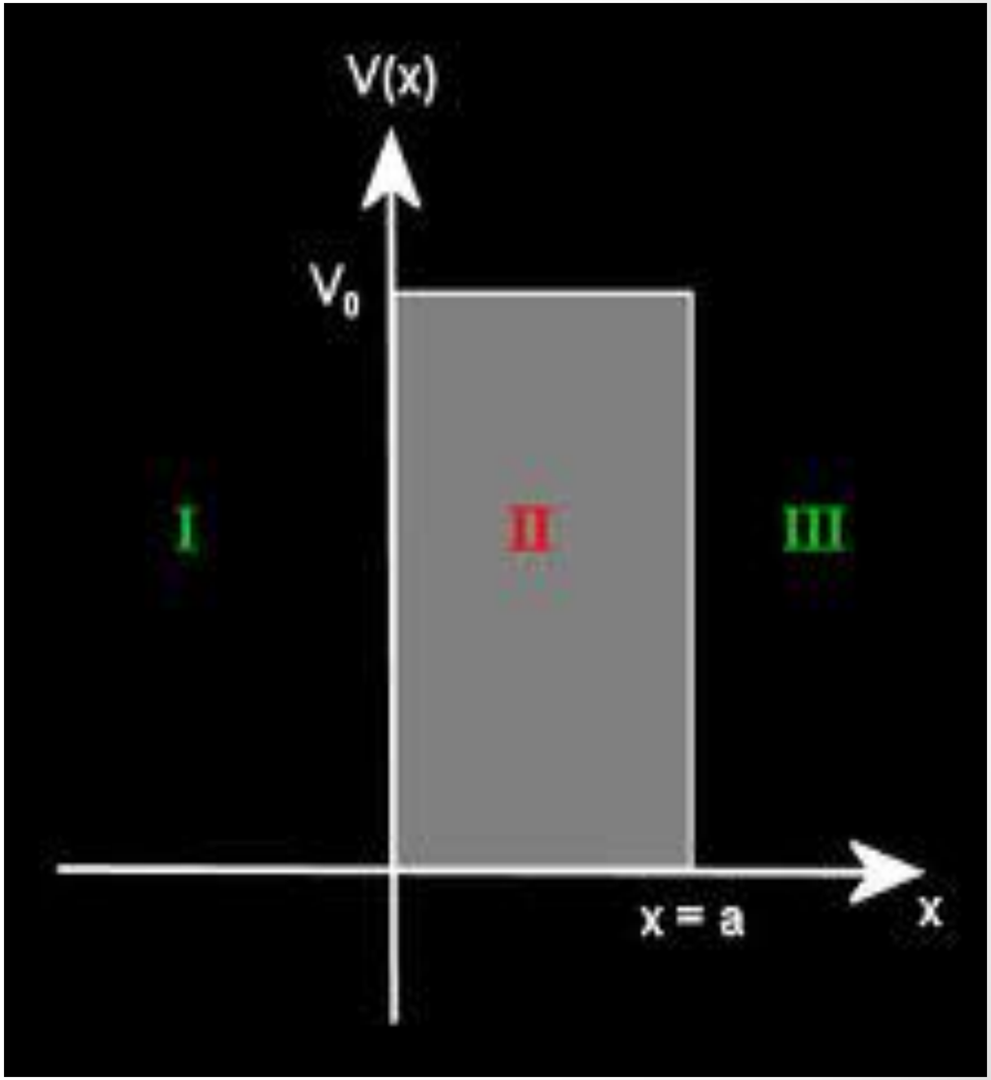
Em Quântica são estados não ligados.

Barreira de potencial - análise qualitativa para $E > V_o$

Física Clássica:

Se a partícula incidir na barreira na região I, com velocidade no sentido positivo de x, ela sofre uma força impulsiva desaceleradora em x=0, continua com menor energia cinética na região II, e sofre outra força impulsiva em x=a, agora aceleradora, e continua na região III até + ∞, em trajetória infinita.

Analogamente: se a partícula incidir na barreira pela região III, o faz com velocidade no sentido negativo de x, ela sofre em x=a uma força desaceleradora impulsiva, e entra na região II com menor energia cinética, continuando na região I até - ∞, em trajetória infinita.



Em Quântica são estados não ligados.

Equações da parte espacial dos auto-estados de energia

As auto-funções de energia:

$$\psi(x,t)=\varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

As equações, nas várias regiões do espaço, para a parte espacial da funções de onda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi_I(x\leq 0)=E\varphi_I(x\leq 0)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{II}(0\leq x\leq a)+V_o\varphi_{II}(0\leq x\leq a)=E\varphi_I(0\leq x\leq a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{III}(x\geq a)=E\varphi_{III}(x\geq a)$$

Equações da parte espacial dos auto-estados de energia

Nas regiões I e III para qualquer valor de E

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_I(x\le 0)=-\frac{\hbar^2 E}{2m}\varphi_I(x\le 0)\Rightarrow \varphi_I(x\le 0)=A_I e^{ikx}+B_I e^{-ikx}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{III}(x\ge a)=-\frac{\hbar^2 E}{2m}\varphi_{III}(x\ge a)\Rightarrow \varphi_{III}(x\ge a)=A_{III} e^{ikx}+B_{III} e^{-ikx}$$

$$k^2=\frac{\hbar^2 E}{2m}>0$$

Na região II, para E < V$_o$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{II}(0\le x\le a)=\frac{\hbar^2}{2m}(V_o-E)\varphi_{II}(0\le x\le a)$$

$$\Rightarrow \varphi_{II}(0\le x\le a)=A_{II} e^{k'x}+B_{II} e^{-k'x}$$

$$k'^2=\frac{\hbar^2}{2m}(V_o-E)>0$$

Soluções dos auto estados de energia para 0< E<Vo (em classe)

As funções de onda nas várias regiões do espaço:

$$\varphi_I(x \le 0) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$\varphi_{II}(0 \le x \le a) = A_{II} e^{k'x} + B_{II} e^{-k'x}$$

$$k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

- $$\varphi_{III}(x \ge a) = A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx}$$

- **Possibilidade 1: no instante inicial a partícula está 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).**

- **Posisibilidade 2:** ***instante inicial na região de x>a: A_I=0 (não haveria em x<0 variação de potencial que refletisse a onda)***

Barreira de potencial - análise qualitativa para$E < V_o$

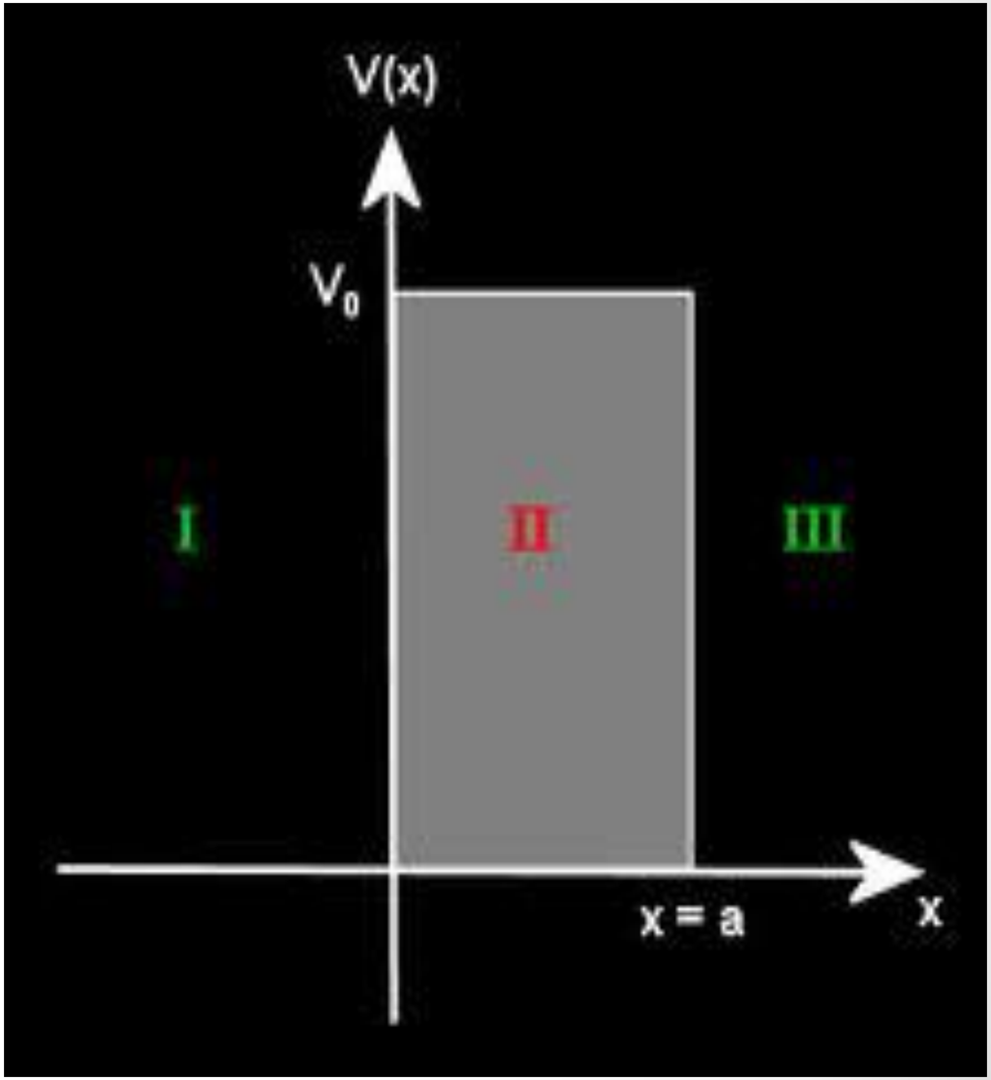
Física Quântica:

Se a **partícula incidir na região I,** **nesse região haverá uma onda no sentido póstivo de x (onda incidente), e também uma onda refletida na barreira** em x=0, ou seja, no **sentido negativo de x;** o que é classicamente permitido). Mas a onda não só **passa por II como é transmitida em III, região classicamente proibido para** E<V_o , daí o nome de **EFEITO TÚNEL.**

Quando está na região II, ou seja, ela fez "um túnel" na barreira, e poderá estar nesta região, e ainda "passar" para a **região III.**

Quando a partícula está na região III, ela que incidiu de I, chega com velocidade no sentido positivo de x. E como ela não tem mudança de potencial em nenhum ponto, então só lhe resta ser "transmitida", sem chance de reflexão nesta região, indo no sentido positivo de x até o + ∞.

Para haver conservação de partícula, o fluxo de incidência + fluxo de reflexão = fluxo de transmissão.



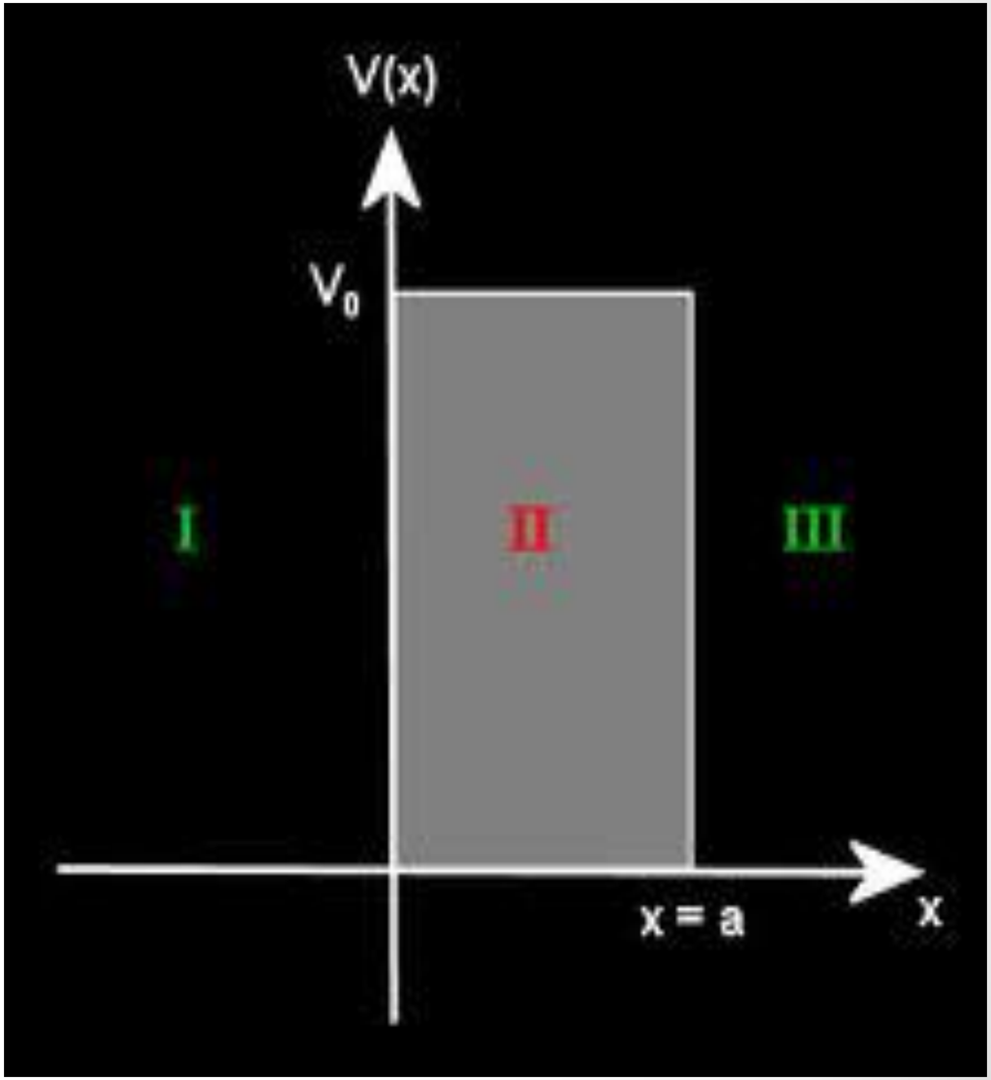
Barreira de potencial - análise qualitativa para$E < V_o$

Física Quântica:

oSIMETRICAMENTE: se a **partícula incidir na região III,** nesse região havaerá uma onda no sentido negativo de x (onda incidente), e também uma onda refletida na barreira em x=a, ou seja, no sentido positivo de x; o que é classicamente permitido). Mas a onda não só passa por II como é transmitida em I, região classicamente proibido para $E<V_o$, daí o nome de EFEITO TÚNEL.

Quando está na região II, ou seja, ela fez "um túnel" na barreira, e poderá estar nessa região e ainda "passar" para a **região I.**

Quando a partícula está na região I, ela que incidiu de III, chega com velocidade no sentido negativo de x. E como ela não tem mudança de potencial em nenhum ponto em I, então só lhe resta ser "transmitida", sem chance de reflexão nesta região, indo no sentido negativo de x até o - ∞.



Para haver conservação de partícula, o fluxo de incidência + fluxo de reflexão = fluxo de transmissão.

Solução da barreira na mecânica de Schroedinger: 0 < E < Vo

As funções de onda quando a partícula incide no sentido negativo de x, ou seja, está na região III em t=0.

$$\varphi_I(x \le 0) = B_I e^{-ikx} \equiv \varphi_{trans}$$

$$\varphi_{II}(0 \le x \le a) = A_{II} e^{k'x} + B_{II} e^{-k'x}$$

$$\varphi_{III}(x \ge a) = A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx} = \varphi_{refl} + \varphi_{inc}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

$$k'^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} > 0$$

- As constantes devem ser escritas em termos da constante de incidência B_{III}.
- Devem ser colocadas as condições de continuidade na função de onda e em sua derivada.

Solução da barreira na mecânica de Schroedinger: 0 < E < Vo

As funções de onda quando a partícula incide no sentido positivo de x, ou seja, está na região I em t=0.

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

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

$$\varphi_{III}(x \ge a) = A_{III} e^{ikx} = \varphi_{trans}$$

- As constantes devem ser escritas em termos da constante de incidência A_I.
- Devem ser colocadas as condições de continuidade na função de onda e em sua derivada.

Condiões sobre as auto-funções de energia da barreira (E<V$_o$)

- Continuidade das funções de onda na incidência no sentido positivo de x:

$$\varphi_I(x=0)=\varphi_{II}(x=0)\Rightarrow A_I+B_I=A_{II}+B_{II}$$

$$\varphi_{III}(x=a)=\varphi_{II}(x=a)\Rightarrow A_{III}e^{ika}=A_{II}e^{k\acute{}a}+B_{II}{}^{-k\acute{}a}$$

- Continuidade das derivadas das funções de onda:

$$\varphi'_{I}(x=0)=\varphi'_{II}(x=0)\Rightarrow ik(A_I-B_I)=k\acute{}(A_{II}-B_{II})$$

$$\varphi'_{III}(x=a)=\varphi'_{II}(x=a)\Rightarrow ikA_{III}e^{ika}=k\acute{}(A_{II}e^{k\acute{}a}-B_{II}{}^{-k\acute{}a})$$

- Nada limita as constante k e k´, ou seja, E pode ser qualquer valor positivo menor do que V$_o$.

Constantes relevantes nas soluções da barreira (técnica explícitada em aula)

- O cálculo dos fluxos de reflexão e transmissão dependem dos coeficientes da "parte" da onda que representa reflexão e transmissão, respectivamente.

- Os coefcientes da onda no interior da barreira, nada tem com fluxo de incidência ou de transmissão. Devem ser "eliminados" em termos das outras constantes.

- Depois disto, se deve escrever os coeficientes das "partes" da função de onda referentes à onda refletida à transmitida, em termos do coeficiente da "parte" da função referente à onda incidente. Haja álgebra...

- Daí se determina "facilmente", o fluxos de reflexão, e de transmissão e de incidência; e a partir deles os coeficientes de reflexão e transmissão.

- As condições não impõem restrições aos valores de k e k´, ou seja, da energia E, a não ser que seja positiva e menor do que V_o.

Solução da barreira na mecânica de Schroedinger: E<Vo

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

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

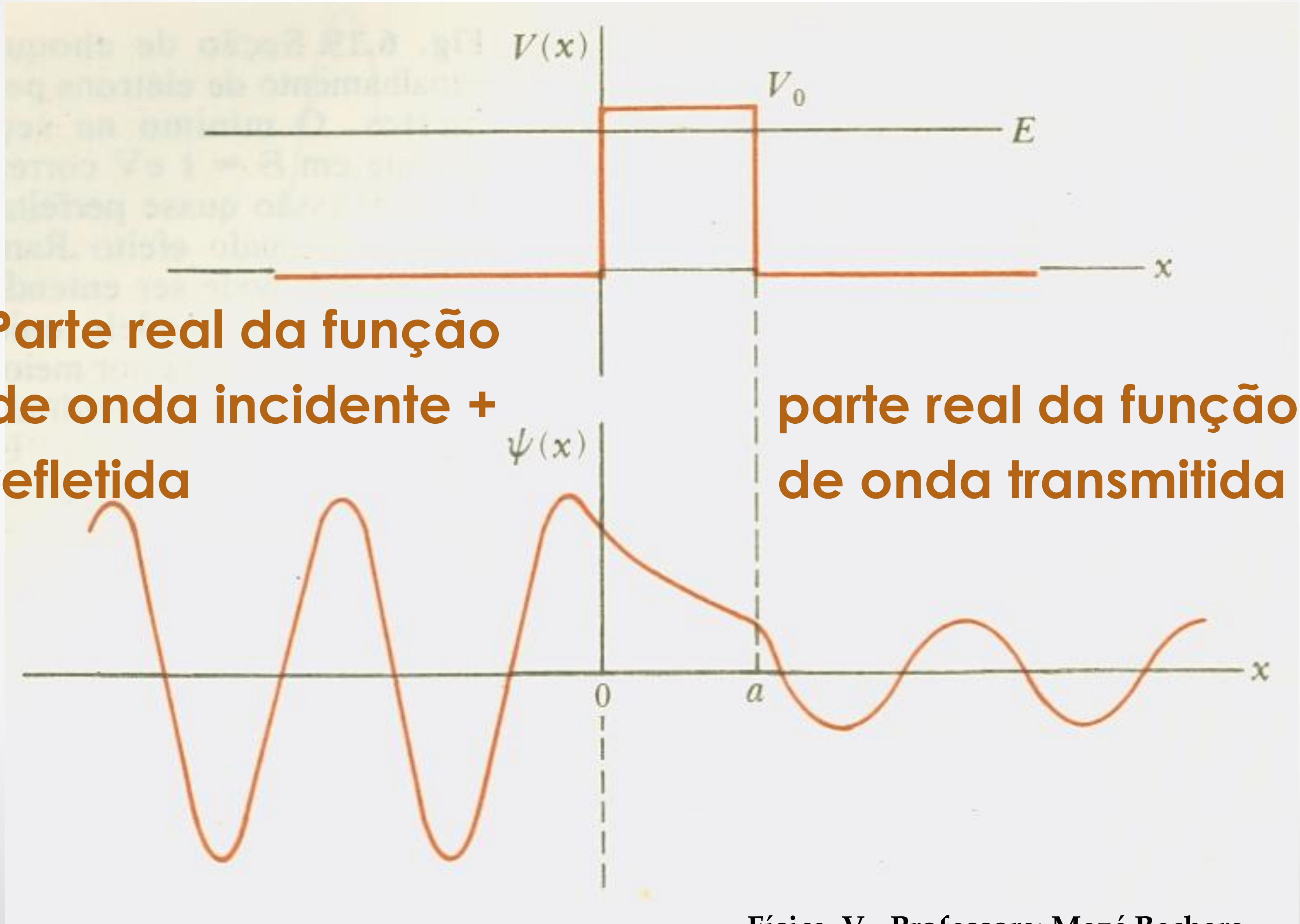
$$= \{1 + 4\frac{E}{V_o}(1 - \frac{E}{V_o})\frac{(e^{k'a} + e^{-k'a})^2}{(e^{k'a} - e^{-k'a})^2}\}^{-1}$$

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

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

$$= \{1 + \frac{1}{16\frac{E}{V_o}(1 - \frac{E}{V_o})}(e^{k'a} - e^{-k'a})^2\}^{-1}$$

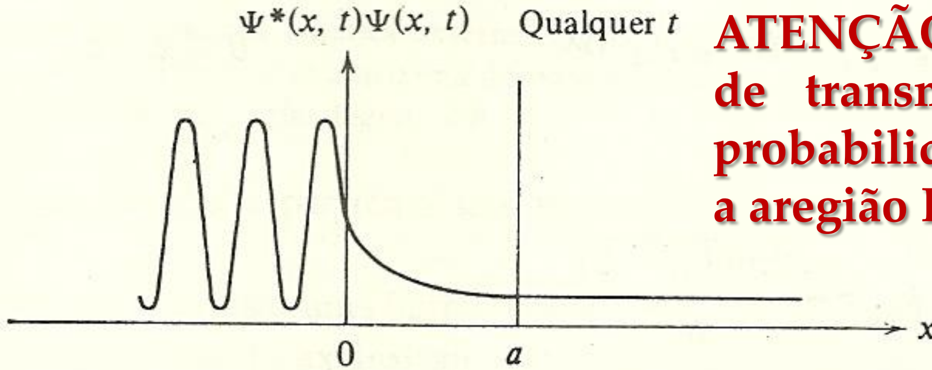
A barreira de potencial e a função de onda incidindo de - ∞ e E < Vo



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)



ATENÇÃO: na região assintótica de transmissão sempre se tem probabilidade constate. Aqui toda a aregião III é toda igual!

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

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

Observe que para $K_{II}a=k'a>>1$, $T=[16E/V_o][1-E/V_o]e^{-2ka}$, ou seja, a transmissão decai exponencialmente com k´, que depende da raiz quadrada de Vo-E.

Equações da parte espacial dos auto-estados de energia

Nas regiões I e III para qualquer valor de E

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_I(x\le 0)=-\frac{\hbar^2 E}{2m}\varphi_I(x\le 0)\Rightarrow \varphi_I(x\le 0)=A_I e^{ikx}+B_I e^{-ikx}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{III}(x\ge a)=-\frac{\hbar^2 E}{2m}\varphi_{III}(x\ge a)\Rightarrow \varphi_{III}(\ge a)=A_{III} e^{ikx}+B_{III} e^{-ikx}$$

$$k^2=\frac{\hbar^2 E}{2m}>0$$

Na região II, para E>V$_o$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{II}(0\le x\le a)=-\frac{\hbar^2}{2m}(E-V_o)\varphi_{II}(0\le x\le a)$$

$$\Rightarrow \varphi_{II}(0\le x\le a)=A_{II} e^{ik'x}+B_{II} e^{-ik'x}$$

$$k'^2=-\frac{\hbar^2}{2m}(E-V_o)>0$$

Soluções da barreira: E>V$_o$

- **Continuidade das funções de onda :**

$$\varphi_I(x=0)=\varphi_{II}(x=0)\Rightarrow A_I+B_I=A_{II}+B_{II}$$

$$\varphi_{III}(x=a)=\varphi_{II}(x=a)\Rightarrow A_{III}e^{ika}=A_{II}e^{ik´a}+B_{II}{}^{-ik´a}$$

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

$$\varphi_I^{´}(x=0)=\varphi_{II}^{´}(x=0)\Rightarrow ik(A_I-B_I)=ik´(A_{II}-B_{II})$$

$$\varphi_{III}^{´}(x=a)=\varphi_{II}^{´}(x=a)\Rightarrow ikA_{III}e^{ka}=ik´(A_{II}e^{ik´a}-B_{II}{}^{-ik´a})$$

- **Nada limita as constante k e k´, ou seja, E pode ser qualquer valor positivo maior do que V$_o$.**

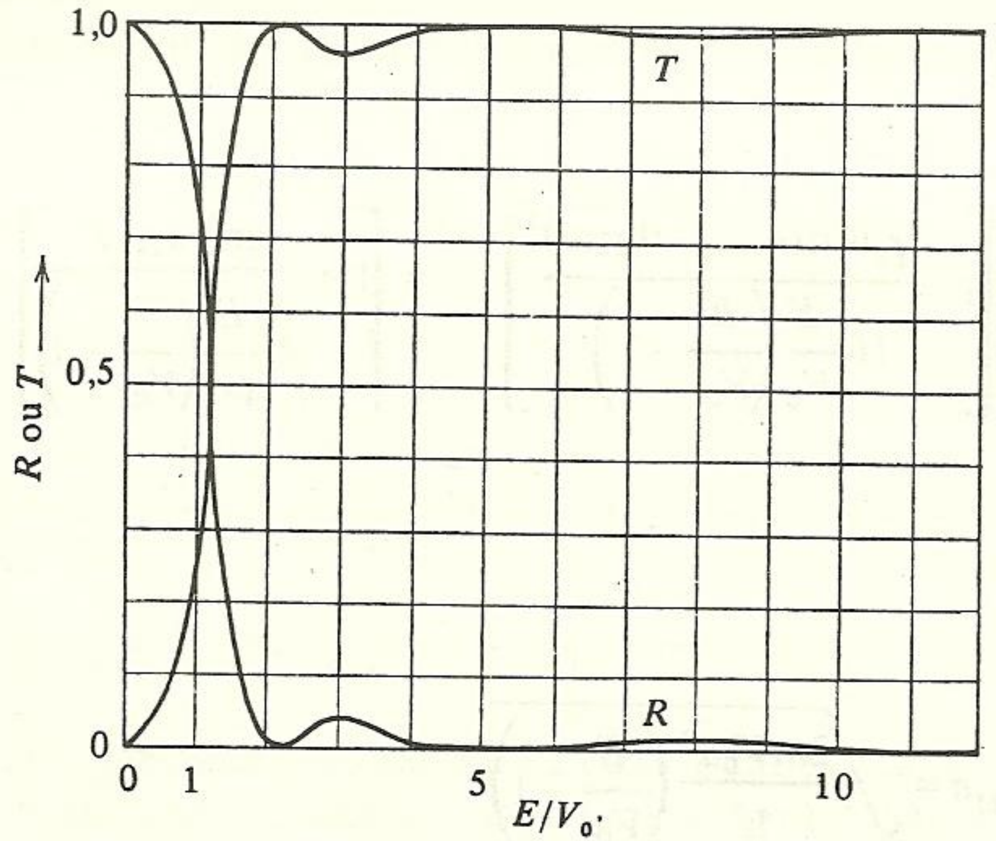
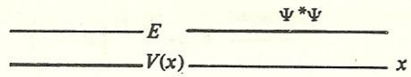
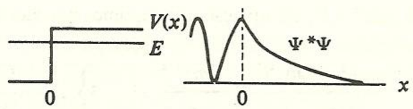
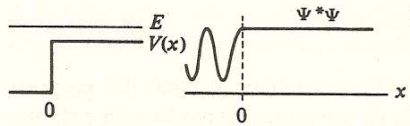
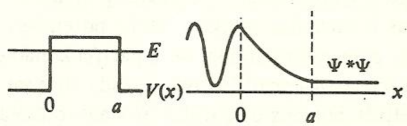
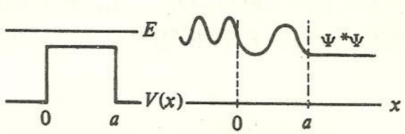
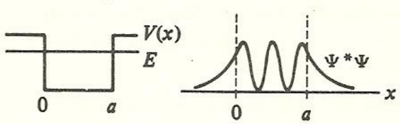
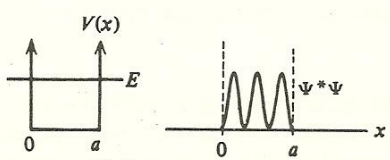
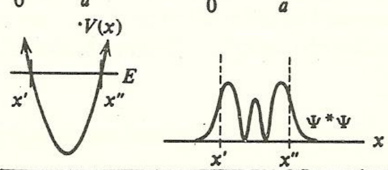


FIGURA 6-15. Os coeficientes de reflexão e transmissão R e T para uma partícula incidindo sobre uma barreira de potencial de altura V_0 e largura a, tal que $2mV_0a^2/\hbar^2 = 9$. A abscissa E/V_0 é a razão entre a energia total da partícula e a altura da barreira de potencial.

Os resultados de R e T.

Mostre!

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

Todos os estados ligados têm funções de onda normalizáveis, parte espacial real e oscilantes no entorno da origem do potencial, energias quantizadas, com densidades que vão a zero nas posições infinitamente longe do centro do potencial

Todos os estados não ligados têm "interferência" da incidência com reflexão, dando densidades oscilantes, e densidades constantes na região de transmissão. As funções de onda são não normalizáveis, mas há conservação do fluxo de partícula, e não há quantização da energia.

Figura do Eisberg

Aplicação: faça!

- Um elétron em um dispositivo semicondutor é acelerado por um potencial de 5V. O semicondutor lhe oferece uma barreira de 8 angstrons de largura e 10 eV de altura. Determine o coeficiente de transmissão neste semicondutor.

- Sugestão: determine o ka e use a aproximação conveniente para realizar este cálculo.