

que é a mesma que resolvemos no problema do poço quadrado infinito, mas com uma diferença importante: não há restrição ao valor de  $x$  ( $x \in (-\infty, +\infty)$ ).

Consideremos primeiro a possibilidade de encontrarmos solução válida com  $E < 0$ :

$$\Rightarrow k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar},$$

$$\psi''(x) = k^2 \psi(x)$$

$\Rightarrow \psi(x) = A e^{kx} + B e^{-kx}$ , como no caso anterior.

Mas se  $x \rightarrow \infty$ ,  $e^{kx}$  cresce sem limite, o que não tem sentido físico  $\Rightarrow A = 0$ . De forma similar, se  $x \rightarrow -\infty$ ,  $e^{-kx}$  também "explode"  $\Rightarrow B = 0$ , e ficamos com uma solução identicamente nula,  $\psi(x) \equiv 0$ , que não tem sentido físico (porque?).

Este raciocínio acontece com frequência, e nos leva a considerar uma nova condição para que uma solução da eq. 5. tenha sentido físico:  $\psi(x)$  não pode "explodir" quando  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Resta-nos então examinar a possibilidade de encontrar soluções com  $E \geq 0$ .

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ e } \psi'' + k^2 \psi = 0,$$

com solução geral  $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$ , (que não explode quando  $x \rightarrow \pm\infty$ !)

Portanto, esta solução é aceitável para qualquer valor de  $k \Rightarrow E$  não é quantizada.

Uma outra forma de escrever a solução geral é usando as exponenciais complexas:

$$\sin kx = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i}$$

$$\cos kx = \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2}$$

(ou usar  $e^{\pm ikx}$  como base do espaço de soluções)

$$\Psi(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$$

Se escrevermos agora a função de onda dependente do tempo

$$\Psi(x, t) = \Psi(x) e^{-i\omega t}$$

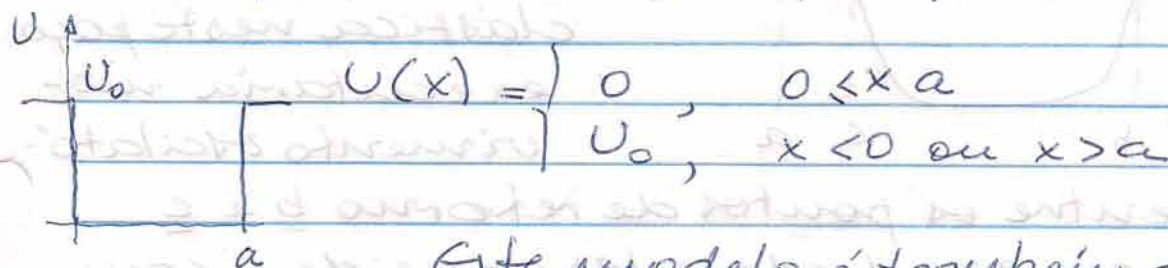
$$= C e^{i(kx - \omega t)} + D e^{-i(kx + \omega t)}$$

que é uma superposição de ondas progressivas, que se movem para a direita (termo em  $C$ ) ou para a esquerda. Se tivermos  $D=0$ , a solução representa partícula com momento  $\hbar k$  (e energia  $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ) no sentido positivo do eixo  $x$  (e se  $C=0$ ?).

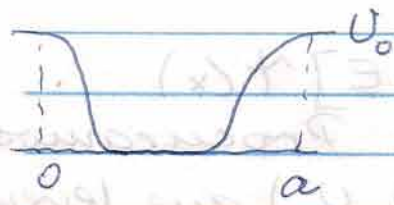
## 7.8 A caixa não rígida

Um modelo mais realista\* do que a caixa rígida pode ser traduzido numa  
\* comentário sobre quarks

caixa não rígida, na qual a partícula está sujeita a um poço de potencial de profundidade finita ("poço quadrado finito"); ela pode ser retirada da caixa se absorver uma quantidade finita (i.e.,  $\neq 0$  e  $< \infty$ ) de energia. A energia potencial é, neste caso, modelada pela função



Este modelo é também algo não realístico devido ao salto abrupto sofrido por  $U$  nos extremos da caixa, e pode ser melhorado por uma mudança contínua da energia nestas

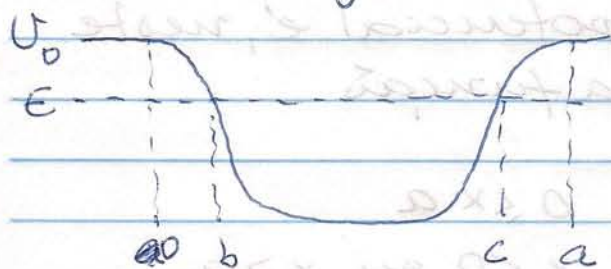


extremidades - simplificamos a matemática da discussão ao tomar

o valor igual ( $U_0$ ) da energia potencial nos dois lados da caixa. As propriedades destes 2 modelos são qualitativamente similares.

Assim como no poço infinito, não há solução fisicamente aceitável para  $E < 0$  (tomamos o fundo do poço como o zero de energia). Uma diferença importante entre os 2 poços é que neste último a partícula pode escapar do poço se  $E > U_0$ , e a função de onda neste caso é parecida

com a da partícula livre - em particular, as energias possíveis não são quantizadas se  $E > U_0$ . Nosso interesse principal aqui, no entanto, é nos estados ligados, com energias  $0 < E < U_0$ .



Uma partícula clássica neste poço executaria movimento oscilatório

entre os pontos de retorno  $b$  e  $c$ . (no poço quadrado estes coincidem com os seus limites  $0$  e  $a$ ), que são determinados pela condição  $E = U(x)$  ( $K = E - U(x) = 0$ ).

Considere agora a eq. 5.

$$\psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E] \psi(x)$$

Procuramos valores de  $E$  no intervalo  $(0, U_0)$  que levem a funções de onda fisicamente aceitáveis. Para compreender quando devemos esperar achar energias permitidas, é útil examinar o comportamento geral das soluções desta equação.

Podemos distinguir 2 regiões distintas em  $x$ : aquela na qual o fator  $[U(x) - E] > 0$  e a outra onde este fator é negativo. Estas regiões são determinadas pelos pontos de retorno clássicos ( $b$  e  $c$ ); a região onde  $[U(x) - E] > 0$  é a região classicamente

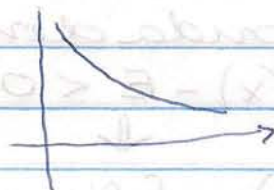
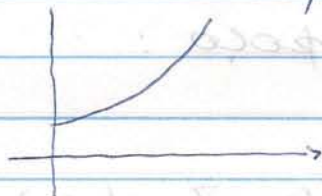
proibida. O comportamento da função de onda  $\psi(x)$  é bastante diferente nestas 2 regiões.

Função de onda fora do poço  
(região classicamente proibida)

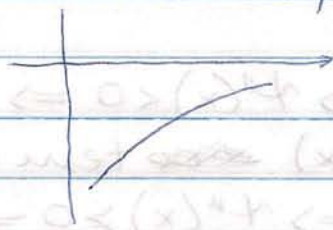
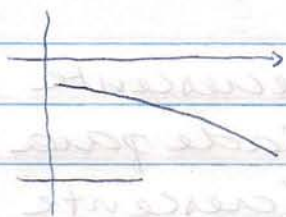
$$\psi''(x) = [\text{função positiva}] \cdot \psi(x)$$

$\psi''(x)$  e  $\psi(x)$  têm o mesmo sinal:

se  $\psi(x) > 0 \Rightarrow \psi''(x) > 0 \Rightarrow \psi'(x)$  é crescente  
 $\Rightarrow \psi(x)$  tem concavidade para cima



se  $\psi(x) < 0 \Rightarrow \psi''(x) < 0 \Rightarrow \psi'(x)$  é decrescente  
 $\Rightarrow \psi(x)$  tem concavidade para baixo



Este comportamento pode ser explicitado se olharmos para as regiões  $x < 0$  e  $x > a$  (nas quais  $U(x) = U_0 = \text{constante}$ ):

$$0 < \frac{2m}{\hbar^2} [U_0 - E] = +\alpha^2$$

$$\psi''(x) = +\alpha^2 \psi(x)$$

$$\psi(x) = A e^{\alpha x} + B e^{-\alpha x} \text{ é a solução geral.}$$

Uma função como esta ~~é~~ tem sua concavidade voltada para o lado oposto aquele onde está o eixo  $x$ .

À esquerda do poço ( $x < 0$ ),  $e^{-\alpha x}$  explode, e não é fisicamente aceitável

$$\Rightarrow \psi(x) = A e^{\alpha x}$$

À direita ( $x > a$ ),  $e^{\alpha x}$  explode

$$\Rightarrow \psi(x) = B e^{-\alpha x}$$

Portanto, nas regiões classicamente proibidas a função de onda (fisicamente aceitável) decai exponencialmente a zero quando  $x \rightarrow \pm \infty$

Função de onda dentro do poço:

$$U(x) - E < 0$$



$$\psi''(x) = [\text{função negativa}] \cdot \psi(x)$$



$\psi''(x)$  e  $\psi(x)$  têm sinais opostos:

se  $\psi(x) > 0 \Rightarrow \psi''(x) < 0 \Rightarrow \psi'(x)$  é decrescente

$\Rightarrow \psi(x)$  ~~tem~~ tem concavidade para baixo

se  $\psi(x) < 0 \Rightarrow \psi''(x) > 0 \Rightarrow \psi'(x)$  é crescente

$\Rightarrow \psi(x)$  tem concavidade para cima



Nos 2 casos,  $\psi(x)$  se curva em direção ao eixo  $x$ . Se o intervalo  $(b, c)$  for suficientemente grande (comparado com o

"comprimento de onda") a função que se curva em direção ao eixo vai conseguir cruzá-lo e começa imediatamente a se curvar para o outro lado: a função de onda tem comportamento oscilatório.

Se o fator negativo  $\frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E]$  tem módulo grande,

$\psi''(x)$  também terá módulo grande e  $\psi(x)$  se curva e oscila rapidamente (e inversamente: troque "grande" por "pequeno" e "rapidamente" por "lentamente"). Isto é fácil de entender:  $U(x) - E = -K$ , e, de acordo com de Broglie,  $K$  grande  $\Rightarrow$  comprimento de onda pequeno e oscilações rápidas (e inversamente:  $K$  pequeno, etc.)

No caso do poço quadrado finito,  $U(x) = 0$  se  $x \in (0, a)$  (que coincide com  $(b, c)$ ), e o fator negativo é  $-\frac{2mE}{\hbar^2} = -k^2$ . A eq. S. se torna

$\psi''(x) = -k^2 \psi(x)$ , com soluções gerais

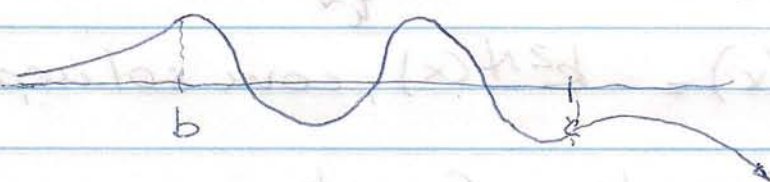
$$\psi(x) = F \sin kx + G \cos kx$$

Para resolver este problema, devemos impor a continuidade de  $\psi(x)$  e  $\psi'(x)$  na fronteira do poço, e com isto determinar as constantes  $A, B, F, G$  (impondo a normalização de  $\psi(x)$ ) e as energias  $E$  admissíveis. O problema não tem solução analítica e deve ser resolvido

numericamente. No entanto, vamos ver que é possível determinar o comportamento qualitativo em detalhe sem precisar fazer cálculos.

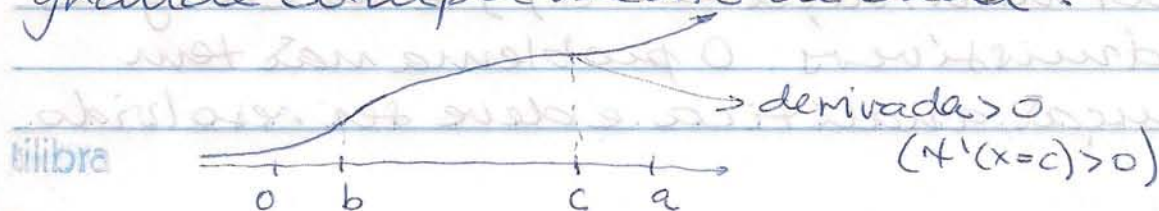
### Procura das energias permitidas

Vamos tentar inferir, a partir dos comentários acima, a forma da função de onda, começando por seu comportamento assintótico  $\psi(x) = Ae^{\alpha x}$  se  $x \leq 0$ . A solução deixa de ter esta forma simples quando  $U(x)$  começa a variar (a  $x$  entre  $0$  e  $b$ ), mas continua com concavidade para cima. Em  $x=b$ , ela começa a ter comportamento oscilatório, e continua assim até  $x=c$ , onde começa a se curvar para longe do eixo  $x$  outra vez.

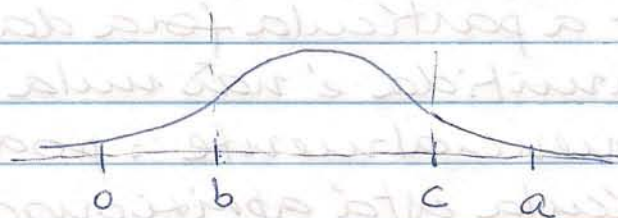


A figura mostra uma tentativa fracassada:  $\psi(x)$  explode quando  $x \rightarrow +\infty$ !

Vamos tentar uma busca mais sistemática, começando com  $E$  perto de zero (i.e., grande comprimento de onda):

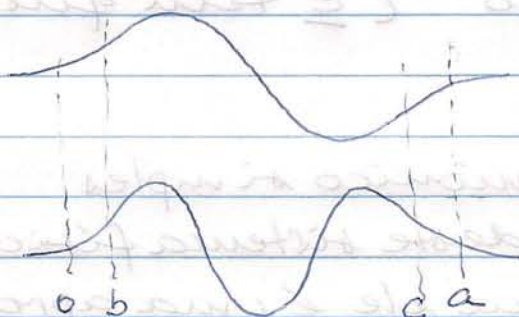


Aumentando o valor de  $E$  paulatinamente (diminuindo  $\lambda$ ) podemos chegar a uma situação onde  $\psi'(c) < 0$  e  $\psi(c) > 0$ :



Valores maiores de  $E$  podem levar a termos  $\psi'(c) < 0$ , mas  $\psi(c) < 0 \Rightarrow \psi(x \rightarrow +\infty)$  também explode.

Se continuarmos aumentando  $E$ , podemos chegar a ter  $\psi'(c) > 0$  e  $\psi(c) < 0$ , o que pode nos levar a outra função de onda fisicamente aceitável:



Vemos que as funções de onda aceitáveis muito se assemelham a suas análogas no problema do poço infinito - mas as energias do poço finito são um pouco menores que suas análogas no poço infinito (porque? pense nos  $\lambda$ !).

Assim como no poço infinito, a função de onda do nível  $n$  tem  $n-1$  nós, o que era fácil de prever: energias maiores

correspondem a funções de onda de menor comprimento de onda.

Uma importante consequência:  $\Psi(x) \neq 0$  fora do poço  $\Rightarrow$  a probabilidade de encontrar a partícula fora da região classicamente permitida é não nula! - mas decai exponencialmente: podemos dizer que a partícula está aprisionada perto do poço. A capacidade que a função de onda quântica de penetrar em regiões classicamente proibidas tem consequências importantes, que discutiremos mais tarde.

Um outro ponto importante: o número de estados ligados é finito, e depende da profundidade  $U_0$  e da largura  $a$  do poço ( $E$  tem que ser menor que  $U_0$ ).

## 7.9 O oscilador harmônico simples

A importância deste sistema físico está ligada ao fato de que ele é uma aproximação de 1ª ordem ao comportamento de (quase) qualquer sistema nas vizinhanças de uma configuração de equilíbrio estável. Se  $x = x_0$  é a coordenada que descreve a configuração do sistema,  $\frac{dU}{dx}(x = x_0) = 0$  (equilíbrio) e  $\frac{d^2U}{dx^2}(x = x_0) > 0$  (estabilidade - se  $\frac{d^2U}{dx^2}(x = x_0) = 0$ , a estabilidade depende do sinal da próxima derivada de  $U$  e a aproximação mencionada perde a validade). Por isso, a

Comentário: cálculo aproximado da energia do estado fundamental do poço quadrado finito.

Quando a profundidade do poço for muito maior que a energia do estado fundamental, podemos estimar esta última da seguinte forma:

- a função de onda na região classicamente proibida decai exponencialmente, com uma profundidade (distância) de penetração caracterizada por

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

- resulta que a energia do estado fundamental se assemelha à do estado fundamental de um poço infinito com largura acrescida de  $\frac{2}{\alpha}$  ( $\frac{1}{\alpha}$  para cada lado):

$$E_1 \approx \frac{h^2}{8m \left(a + \frac{2}{\alpha}\right)^2}$$

- como  $\alpha$  depende de  $E_1$ , podemos construir um procedimento em sequência, que começa por estimar  $E_1$  para o poço infinito de largura  $a$ , usa este valor de  $E_1$  para estimar  $\alpha$ , e usa este último para reviver a estimativa da energia.
- este procedimento pode ser repetido até sua convergência.

## Exemplos:

1. elétron confinado em poço de profundidade  $U_0 = 1 \text{ keV}$  e largura  $0,2 \text{ nm}$ .

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{(hc)^2}{8(mc^2)a^2} = \frac{1240 \times 1240}{8 \times 5,11 \times 10^5 \times (0,2)^2} = 9,4 \text{ eV}$$

$$\frac{1}{x} = \frac{h}{\sqrt{2m(U_0 - E_1)}} = \frac{197}{\sqrt{2 \times 5,11 \times 10^5 \times (1000 - 9,4)}} = 0,00619 \text{ nm}$$

$$E_1 = \frac{h^2}{8m(a + \frac{2}{x})^2} = E_{\text{infinito}} \left( \frac{a}{a + \frac{2}{x}} \right)^2 = 9,4 \left( \frac{0,2}{0,2 + 0,00619} \right)^2 = 8,3 \text{ eV}$$

se usarmos este valor para recalcular  $\frac{1}{x}$  obteremos  $0,00619 \text{ nm} \Rightarrow$  o procedimento converge, e a energia estimada é  $8,3 \text{ eV}$ , em acordo com a solução numérica do problema.

expansão de Taylor da energia potencial em torno da configuração de equilíbrio tem os 2 termos iniciais como segue:

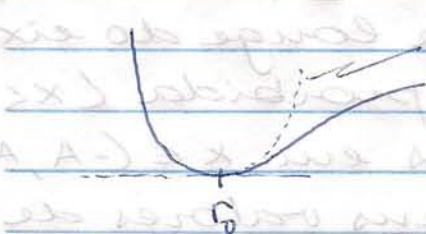
$$U(x) = U(x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dx^2}(x_0) (x - x_0)^2$$

Se tomarmos  $U(x_0) = 0$  e chamarmos  $k = \frac{d^2 U}{dx^2}(x_0)$ ,

$$U(x) = \frac{1}{2} k (x - x_0)^2, \quad k > 0,$$

que é a energia potencial do oscilador harmônico.

Esta aproximação se aplica, por exemplo, a uma molécula diatômica típica, com energia potencial representada abaixo como função da separação  $r$  entre os átomos.



oscilador harmônico

A equação horária de um oscilador harmônico clássico de massa  $m$  tem a forma geral (tomamos  $x_0 = 0$  na sequência)

$$x(t) = A \sin \omega_c t + B \cos \omega_c t, \quad \omega_c^2 = \frac{k}{m}$$

Se escolhermos a origem dos tempos,  $t=0$ , no momento em que o oscilador está em sua posição de equilíbrio,

$x(t) = A \sin \omega_c t$ , onde  $A$  é a amplitude das oscilações e o sistema oscila entre  $x = -A$  e  $x = A$ :  $x = \pm A$  são os pontos de retorno clássicos. Quando a

partícula está num destes pontos sua energia cinética  $K$  é nula, e, se  $E$  é a energia total, temos

$$E = \frac{1}{2} k A^2 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2E}{k}} :$$

a amplitude

de do oscilador clássico aumenta com a energia.

Para encontrar as energias permitidas para o oscilador harmônico quântico temos que resolver a eq. S. com  $U(x) = \frac{1}{2} k x^2$  (outra vez escolhemos  $x_0 = 0$ ). Qualitativamente, a análise é semelhante à do poço finito discutido na seção anterior.

Qualquer que seja o valor de  $E$ , as soluções ~~terão~~ terão concavidade para longe do eixo  $x$  na região classicamente proibida ( $x < -A$  e  $x > A$ ) e serão oscilatórias em  $x \in (-A, A)$ .

Como antes, apenas alguns valores de  $E$  produzirão solução que satisfaçam as condições de contorno de decaimento exponencial quando  $x \rightarrow -\infty$  e  $x \rightarrow +\infty$ .

Logo, a energia é quantizada. A energia potencial cresce sem limites quando  $x$  se afasta da origem, e a partícula estará portanto confinada para todas as energias (permitidas). Neste aspecto, o oscilador harmônico se assemelha ao poço infinito.

Uma diferença importante entre o oscilador harmônico e outros poços de

potencial é que a eq. S. tem, neste caso, solução analítica. A matemática de sua obtenção é, no entanto, um pouco mais complicada do que queremos manipular nesta disciplina. A boa notícia é que o resultado para os níveis de energia é bem simples: as energias permitidas são

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega_c, \frac{3}{2} \hbar \omega_c, \frac{5}{2} \hbar \omega_c, \dots, \text{ ou }$$

$$E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Uma característica marcante deste resultado é que os níveis de energia são igualmente espaçados:

$$E_{n+1} - E_n = (n+1 + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c = \hbar \omega_c,$$

resultado nada óbvio.

As funções de onda dos estados estacionários são, como é fácil de prever com nossa análise qualitativa, muito parecidas virtualmente com aquelas obtidas na solução do problema do poço finito. Em particular, no estado fundamental a função de onda não tem nós. De fato, como neste problema o número quântico  $n$  começa do zero, a função de ordem  $n$  tem  $n$  nós. Funções associadas a energias mais altas se espalham para mais longe de  $x=0$ , assim como acontece

com os pontos de retorno clássicos. O estado fundamental ( $n=0$ ) tem uma energia de ponto zero ( $= \frac{1}{2} \hbar \omega_c$ ), como exigido pelo princípio da incerteza. Elas têm a forma geral

$$\Psi_n(x) = p_n(x) e^{-x^2/2b^2}, \text{ onde}$$

$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega_c}$  e  $p_n(x)$  é um polinômio em  $x$  de grau  $n$  ("polinômio de Hermite") com paridade bem definida ( $(-1)^n$ : paridade igual à do número quântico  $n$ )

As propriedades do oscilador harmônico quântico são bem ilustradas pelo exemplo de uma molécula diatômica, como o HCl. Este é, em princípio, um sistema 3 dimensional complicado. Sua energia pode ser expressa pela soma de 3 termos: um termo eletrônico, associado ao movimento dos elétrons individuais, um termo rotacional, correspondendo a rotações da molécula como um todo, e um termo vibracional, associado às ~~vibrações~~ vibrações radiais para dentro e para fora dos 2 átomos. Uma análise cuidadosa do espectro molecular permite discriminar as contribuições destes 3 termos. Em particular, o movimento vibracional dos 2 átomos é 1 dimensional, ao longo da linha

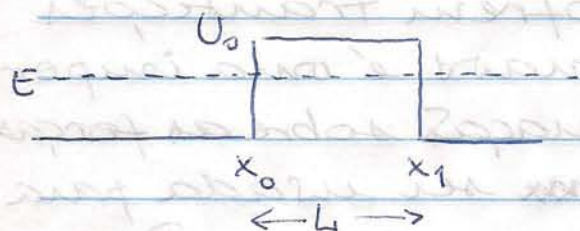
que liga os átomos, e a energia potencial associada a este grau de liberdade (a distância inter-atômica  $r$ ) pode ser aproximada pela do oscilador harmônico, o que encontra ampla confirmação experimental. Os níveis vibracionais de menor energia correspondem de perto aos do oscilador harmônico (até  $n=5$ , no caso do  $\text{HCl}$ ), e começam a ficar mais próximos entre si a partir daí. E, é claro, a molécula não terá níveis quantizados se  $E$  for maior que sua energia de dissociação.

A observação dos fótons emitidos quando moléculas sofrem transições entre níveis vibracionais é uma importante fonte de informações sobre as forças interatômicas, e pode ser usada para identificar a molécula emissora. Por exemplo, a molécula de  $\text{H}_2$  emite fótons IV de frequência  $1,2 \times 10^{14} \text{ Hz}$  quando cai de um nível vibracional para um vizinho, e esta radiação é usada pelos astrônomos para localizar nuvens de moléculas de  $\text{H}_2$  em nossa galáxia.

## 7.10 Tunelamento

Trata-se, como a quantização de energia, de um dos mais surpreendentes fenômenos quânticos, com muitas aplicações importantes.

Vamos discutir aqui o problema de uma partícula quântica não confinada para a qual a energia potencial apresenta uma barreira classicamente impenetrável. Vamos ver que a partícula quântica pode atravessar - ou "tunelar" através - esta barreira e emergir do outro lado. Esta penetração de barreira, ou tunelamento, tem consequências dramáticas em vários fenômenos naturais, tais como o decaimento radioativo, e é a base do funcionamento de vários dispositivos eletrônicos modernos, como o microscópio de tunelamento (STM, na sigla em inglês).



O diagrama representa a energia potencial de um elétron que se move

ao longo do eixo  $x$  num percurso que consiste de 2 fios condutores idênticos separados pela distância  $L$  entre  $x_0$  e  $x_1$  - que pode ser no ar, ou uma camada fina de poeira numa conexão elétrica imperfeita. Este hiato forma uma barreira de largura  $L$  e altura  $U_0$ , enquanto a energia potencial no interior dos condutores é constante (que tomamos nula). Estamos interessados no caso em que a energia da partícula é menor que a altura da barreira,  $0 < E < U_0$ . Nestas condições,

# Integrais envolvendo a função gaussiana $e^{-ax^2}$

$$1. \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-ax^2} dx = I \quad (\text{integrando é par})$$

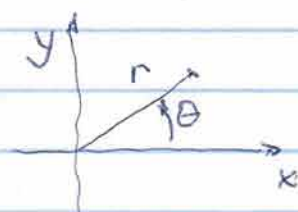
$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2} dy =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x^2+y^2)} dx dy$$

Usando coordenadas polares bi-dimensionais:

$$x = r \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta$$



$$dx dy = r dr d\theta$$

$$I^2 = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr \cdot r e^{-ar^2} =$$

$$= 2\pi \int_0^{\infty} r e^{-ar^2} dr = 2\pi \cdot \frac{1}{(-2a)} \int_0^{\infty} (-2ar) e^{-ar^2} dr$$

$$= \frac{\pi}{a} \left[ e^{-ar^2} \right]_0^{\infty} = \frac{\pi}{a} \rightarrow I = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, e$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} = I(a)$$

$$2. \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{d}{da} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx =$$

$$= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

uma partícula clássica incidente da esquerda sofreria reflexão ao chegar a  $x_0$ .

Para ver o que acontece com a partícula quântica devemos resolver a eq. S. com esta função energia potencial  $U(x)$ . Apesar deste não ser um problema difícil, vamos ver que podemos entender as características principais da solução sem tê-la obtido explicitamente.

Considere primeiro uma barreira de largura  $L$  infinita, também chamada de um degrau - que funciona exatamente como a parede à direita do poço finito que já discutimos. Portanto, a função será oscilatória para  $x < x_0$  e uma exponencial decrescente para  $x > x_0$ :



$$x < x_0:$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

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

$$x > x_0: \psi(x) = C e^{-\alpha x}$$

$$\alpha^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$$

E a partícula quântica tem probabilidade não nula de ser encontrada na região classicamente proibida.

Se a largura da barreira for finita, teremos a situação do diagrama abaixo:



1 / 1  $A_e$   
 $\psi(x)$  é senoidal, com amplitude  ~~$A_e$~~ , se  $x < x_0$ , exponencial decrescente se  $x_0 < x < x_1$ , e outra vez oscilatória, ~~se~~ com amplitude  $A_d$  ( $< A_e$ ), se  $x > x_1$ , já que nesta região  $E - U(x) > 0$ .

A probabilidade de que a partícula esteja à esquerda de  $x_0$  é proporcional a  $|A_e|^2$ , e que ela esteja à direita de  $x_1$  é proporcional a  $|A_d|^2$ . Portanto, existe uma probabilidade não nula de que uma partícula que incida sobre a barreira vinda da esquerda a atravessasse e passe a trafegar à direita:

$$P = \left| \frac{A_d}{A_e} \right|^2 \approx \left| \frac{e^{-\alpha x_1}}{e^{-\alpha x_0}} \right|^2 = e^{-2\alpha L}$$

A probabilidade de tunelamento depende, portanto, de 2 variáveis:  $\alpha$  (que mede a ~~proximidade~~ distância entre a energia da partícula e ~~a~~ a altura da barreira) e  $L$ , a largura da barreira. Em muitas aplicações o produto  $\alpha L$  é muito grande, e a probabilidade de tunelamento muito pequena. No entanto, se a partícula se chocar com a barreira um número muito grande de vezes, ela acabará por atravessá-la, que é o que ocorre no decaimento  $\alpha$  de certos núcleos radioativos.

Uma aplicação moderna do tunelamento quântico é o microscópio de tunelamento (STM). Nele, a superfície de uma

amostra é explorada medindo-se a corrente elétrica entre a superfície e uma ponta de prova condutora que varre a superfície a uma certa altura fixa acima dela. A corrente só acontece por causa do tunelamento quântico, e o valor da corrente é proporcional à probabilidade de tunelamento através da barreira. Esta probabilidade é fortemente dependente da largura  $L$  da barreira, isto é, a distância entre a ponta de prova do microscópio e a superfície sendo examinada. Isto significa que medindo esta corrente podemos obter uma descrição muito precisa da topografia da superfície.

- Exemplo:  2 fios condutores idênticos separados por uma distância  $L = 1 \text{ nm}$ . O viato entre os fios pode ser representado por uma barreira de potencial  $U_0$  acima da energia constante ( $= 0$ ) que os elétrons têm quando estão no interior do fio condutor. Suponha que ele se aproxima do buraco com energia  $E$ ,  $U_0 - E = 1 \text{ eV}$ .
- Com que probabilidade ele emerge do outro lado da barreira? (isto é, alcança o outro fio)
  - Como isto muda se  $L$  dobrar de valor?

$$\alpha^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} = \frac{2mc^2(U_0 - E)}{(\hbar c)^2}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2 \times (5 \times 10^5 \text{ eV}) \times 1}}{197 \text{ eV} \cdot \text{nm}} \approx 5,1 \text{ nm}^{-1} \quad (\text{discutir a dimensão!})$$

$$\Rightarrow \alpha L = 5,1, \quad P = e^{-2\alpha L} = e^{-10,2} = 3,7 \times 10^{-5} \approx 0,004\%$$

$$\text{Se dobrarmos } L \rightarrow P' = e^{-20,4} = 1,4 \times 10^{-9}$$

que ilustra a enorme sensibilidade com que a probabilidade de transmissão depende da largura da barreira, propriedade que é explorada pelo microscópio STM.

## 7.11 A equação de Schrödinger dependente do tempo

A eq. S. independente do tempo, que determina a dependência espacial dos estados estacionários de um sistema quântico, pode, como já vimos, ser escrita na forma

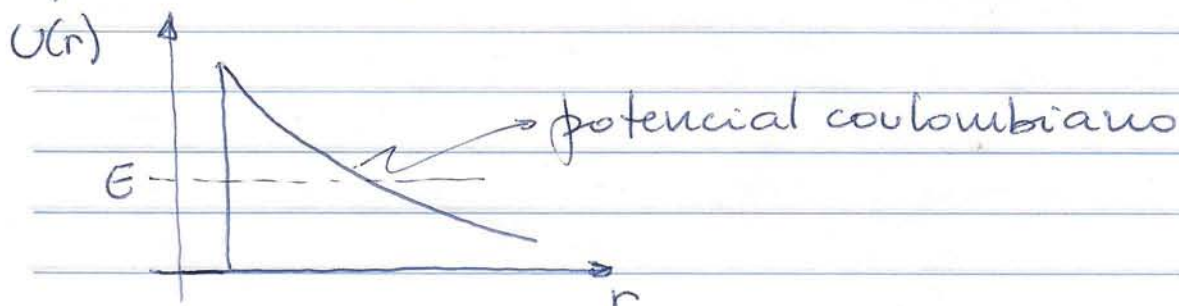
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

Como a dependência temporal de um estado estacionário pode ser escrita como  $\exp(-i\omega t)$ , onde a conexão entre  $\omega$  e  $E$  é dada pela relação de de Broglie

$$E = hf = \frac{h}{2\pi} 2\pi f = \hbar \omega \quad \text{o lado direito}$$

## Tunelamento e decaimento alfa ( $\alpha$ )

Modelamos o problema como o de uma partícula  $\alpha$  confinada por um poço finito da forma



Fora do núcleo de número atômico  $Z$ , a partícula  $\alpha$  (de carga  $+2e$ ) está sujeita a energia potencial

$$U(r) = \frac{2(Z-2)ke^2}{r}$$

A profundidade do poço é determinada pelo raio do núcleo  $R$ ,

$$R \sim 1,2 \text{ fm} \times (A)^{1/3}$$

Para o núcleo de urânio ( $U^{238}$ ), temos

$$R \sim 1,2 \times (238)^{1/3} \approx 7,4 \text{ fm}$$

e a ~~altura da~~ profundidade do poço é

$$U(R) \sim \frac{2 \times 90 \times (1,44 \text{ MeV} \cdot \text{fm})}{7,4 \text{ fm}} \sim 35 \text{ MeV}$$

da equação acima também é

$$E\psi = \hbar\omega\psi = i\hbar(-i\omega)\psi \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi e^{-i\omega t})$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t), \text{ o que sugere} \\ \text{(mas não prova!)} \\ \text{que a equação de movimento de um}$$

sistema quântico seja (em 1 dimensão)

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

que é justificada pelo sucesso de suas muitas previsões.

Os estados estacionários são soluções desta equação diferencial parcial - de fato, são ~~as~~ as soluções desta equação possíveis de serem expressas como o produto de uma função apenas da posição por outra que depende só do tempo. Mas há muitas outras soluções.

Considere, por exemplo, dois estados estacionários associados a energias distintas,

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x) e^{-i\omega_1 t}, \quad E_1 = \hbar\omega_1, \text{ e} \\ \Psi_2(x,t) = \psi_2(x) e^{-i\omega_2 t}, \quad E_2 = \hbar\omega_2$$

Cada uma destas funções satisfaz à eq. 5. completa, e o mesmo é verdade de qualquer combinação linear delas, da forma

$$\Psi(x,t) = \alpha \Psi_1(x,t) + \beta \Psi_2(x,t)$$

para  $\alpha$  e  $\beta$  constantes (complexas). Isto é, o princípio da superposição se aplica à eq. 5. completa (ela é uma equação linear). Vamos mostrar isto:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \alpha i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} + \beta i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \\ &= \alpha \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + U(x) \Psi_1 \right) + \\ &\quad \beta \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + U(x) \Psi_2 \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x) \Psi \end{aligned}$$

Este ( $\Psi$ ) é, portanto, um estado possível de uma partícula confinada. Neste estado:

- a energia não é bem definida: uma medida da energia pode resultar no valor  $E_1$  (com probabilidade proporcional a  $|\alpha|^2$ ) ou  $E_2$  (com probabilidade proporcional a  $|\beta|^2$ )
- apesar deste estado ser combinação linear de estados estacionários, a densidade de probabilidade a ele associada não é estacionária; para constatar isto, faça

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \alpha \Psi_1(x) e^{-i\omega_1 t} + \beta \Psi_2(x) e^{-i\omega_2 t} \\ &= e^{-i\omega_1 t} \left[ \alpha \Psi_1(x) + \beta \Psi_2(x) e^{-i\omega_{21} t} \right], \\ \omega_{21} &= \omega_2 - \omega_1 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow |\Psi(x,t)|^2 = \left| \alpha \Psi_1(x) + \beta \Psi_2(x) e^{-i\omega_{21} t} \right|^2 =$$

$$\begin{aligned}
&= (\alpha^* \psi_1^* + \beta^* \psi_2^* e^{i\omega_{21}t}) (\alpha \psi_1 + \beta \psi_2 e^{-i\omega_{21}t}) \\
&= |\alpha|^2 |\psi_1(x)|^2 + |\beta|^2 |\psi_2(x)|^2 + \\
&\quad + \alpha^* \beta \psi_1^*(x) \psi_2(x) e^{-i\omega_{21}t} + \alpha \beta^* \psi_1(x) \psi_2^*(x) e^{i\omega_{21}t} \\
&= |\alpha|^2 |\psi_1(x)|^2 + |\beta|^2 |\psi_2(x)|^2 + \underbrace{2 \operatorname{Re} [\alpha^* \beta \psi_1^* \psi_2 e^{-i\omega_{21}t}]}_{\text{depende de } t}
\end{aligned}$$

Um exemplo simples: se  $\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$  (escolhido para que a função de onda completa  $\Psi(x,t)$  esteja normalizada), a última parcela será

$$\begin{aligned}
&2 \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) \psi_2(x) e^{-i\omega_{21}t} \right] = \\
&= \psi_1(x) \psi_2(x) \cos(\omega_{21}t)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$  a densidade de probabilidade varia com o tempo, neste caso com uma dependência periódica, de período  $T = \frac{2\pi}{\omega_{21}}$ .