



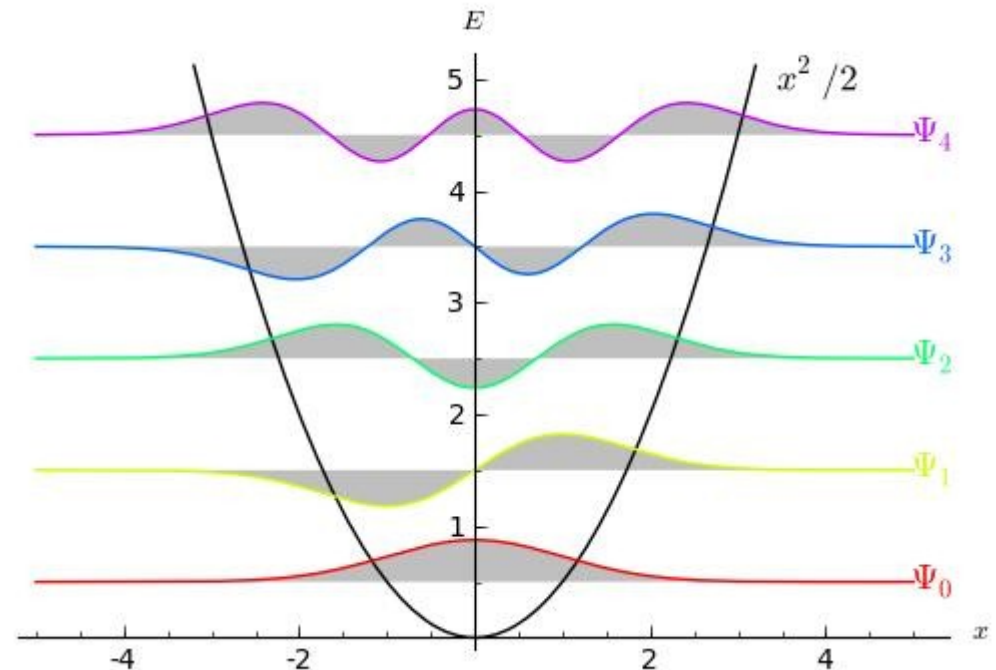
Universidade Federal do ABC

Física Quântica

Aula 9: Potenciais Simples III: Tunelamento; Equação de Schrödinger em três Dimensões

Pieter Westera

pieter.westera@ufabc.edu.br

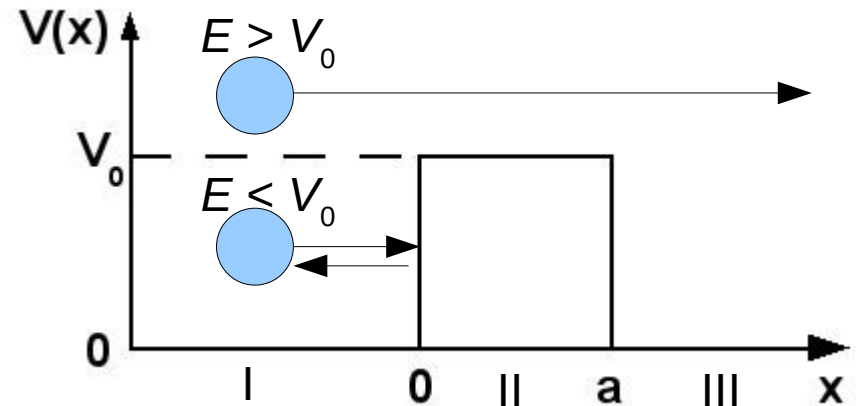


<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html>

Barreira de Potencial

Barreira de Potencial:

$$V(x) = 0 \quad \text{para } 0 < x < a \text{ (região II)}$$
$$V_0 \quad \text{para } x < 0 \text{ (região I)}$$
$$\text{ou } x > a \text{ (região III)}$$



Caso Clássico

- $E < V_0$: **Barreira “impassável”**, a partícula é **refletida** em $x = 0$ de volta para de onde ela veio
- $E > V_0$: **Todas** as partículas **passam** a barreira (perdendo velocidade chegando na barreira, e recuperando a velocidade inicial saindo do outro lado)

Barreira de Potencial

Caso Quântico ($E < V_0$)

$x < 0$ (partícula livre):

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x},$$

feixe incidindo feixe refletido

onde $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $|A|^2 = \rho$

$0 < x < a$ (classicamente “proibido”):

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x}, \text{ onde } \alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

$$x > a: \psi_{III}(x) = Fe^{ik_1x} + \cancel{Ge^{-ik_1x}}.$$

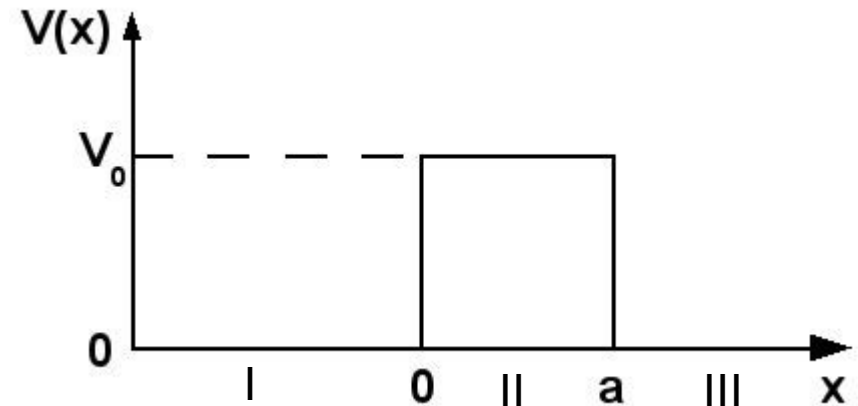
onda transmitida

B , C , D e F podem ser determinados usando as condições

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0), \quad d\psi_I(x=0)/dx = d\psi_{II}(x=0)/dx, \quad \psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a)$$

$$\text{e } d\psi_{II}(x=a)/dx = d\psi_{III}(x=a)/dx$$

Acha-se, que $F \neq 0 \Rightarrow$ Parte das partículas **passa** pela barreira “**impassável**”, fenômeno chamado **Efeito Túnel** ou **Tunelamento**.



Barreira de Potencial

Caso Quântico ($E < V_0$)

Um pouco de álgebra leva ao **coeficiente de transmissão**:

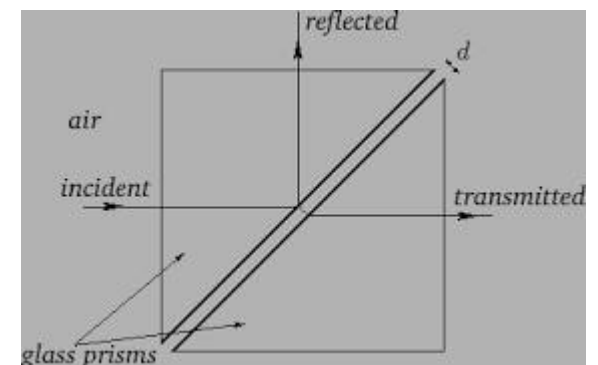
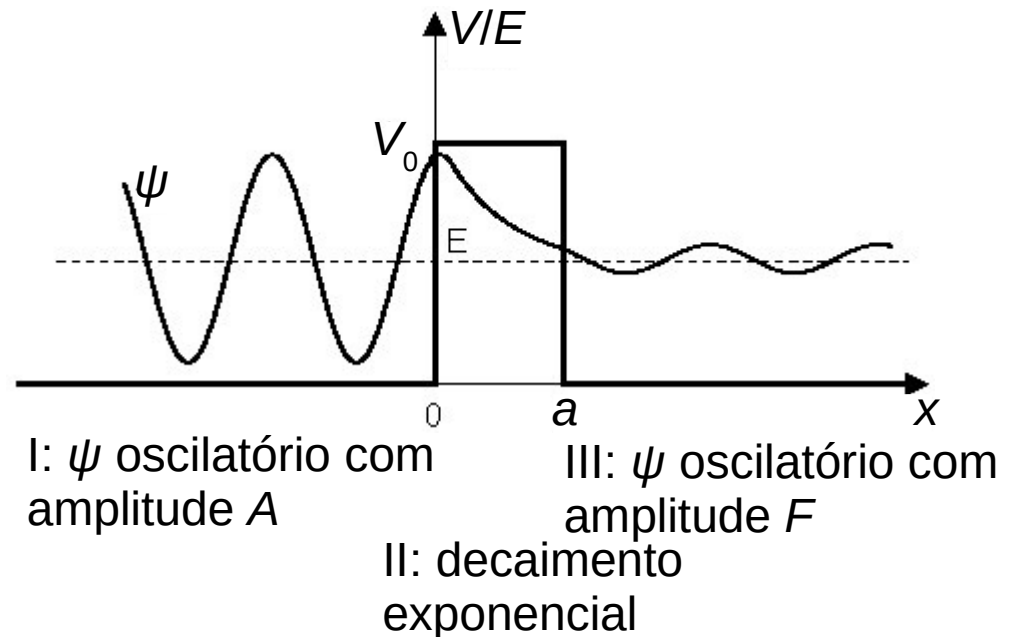
$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{\sinh^2 \alpha a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}$$

para $\alpha a \gg 1$ isto tende a:

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2\alpha a}$$

Parecido com a reflexão total frustrada na ótica.

(o caso $E > V_0$ também é interessante, mas não tratamos aqui)



Aplicações do Efeito Túnel

O Microscópio de Tunelamento

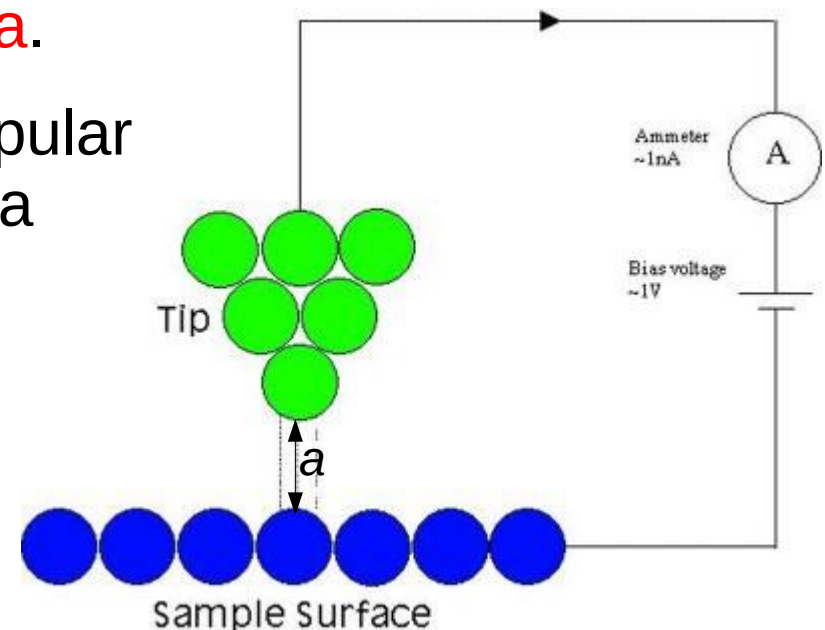
Uma **agulha escaneia** a **superfície** a ser examinado, movimentado por elementos piezoelétricos.

Entre agulha e amostra é aplicada uma **diferença de potencial**, classicamente **impassável** pelos **elétrons** da agulha. Mas alguns passam pelo **efeito túnel** e constituem uma **corrente** que é **medida**.

Já que a probabilidade de um elétron pular da agulha pra amostra é proporcional a $e^{-2\alpha a}$ (depende fortemente de a), a corrente também é.

=> **medida** muito **precisa** de a

=> **resolução** espacial do tamanho de um **átomo**!



Aplicações do Efeito Túnel

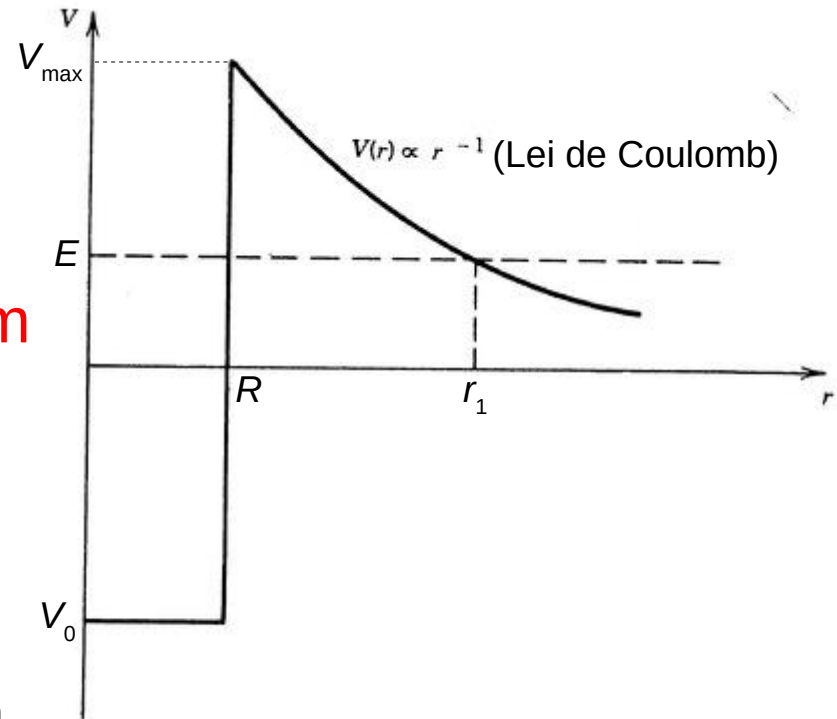
Decaimento alpha (Гамов, Condon e Gurney, 1928)

Partículas α , $2 p^+ + 2 n$
(vide experimento de Rutherford)
são **sub-entidades** especialmente
estáveis de **núcleos atômicos**.

No **decaimento α** , os núcleos **emitem**
estas partículas, assim ficando com
2 prótons e 2 nêutrons a menos.

Normalmente, as partículas α ficam
presas no poço de potencial gerado
pela **força nuclear forte**, que tem um
alcance da ordem de $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$, que pode ser considerado o
raio do núcleo, R , viajando ido e volta pelo núcleo.

Mas às vezes uma partícula α "**tunela**" até onde a **repulsão** de
Coulomb devida ao resto do núcleo consegue **ejetá-la**, r_1 .



Aplicações do Efeito Túnel

Decaimento alpha (Гамов, Condon e Gurney, 1928)

Estimativa da taxa de decaimento α :

Supondo, que a energia da partícula α é E :

=> velocidade dentro do núcleo:

$$v = \sqrt{(E - V_0)/2m}$$

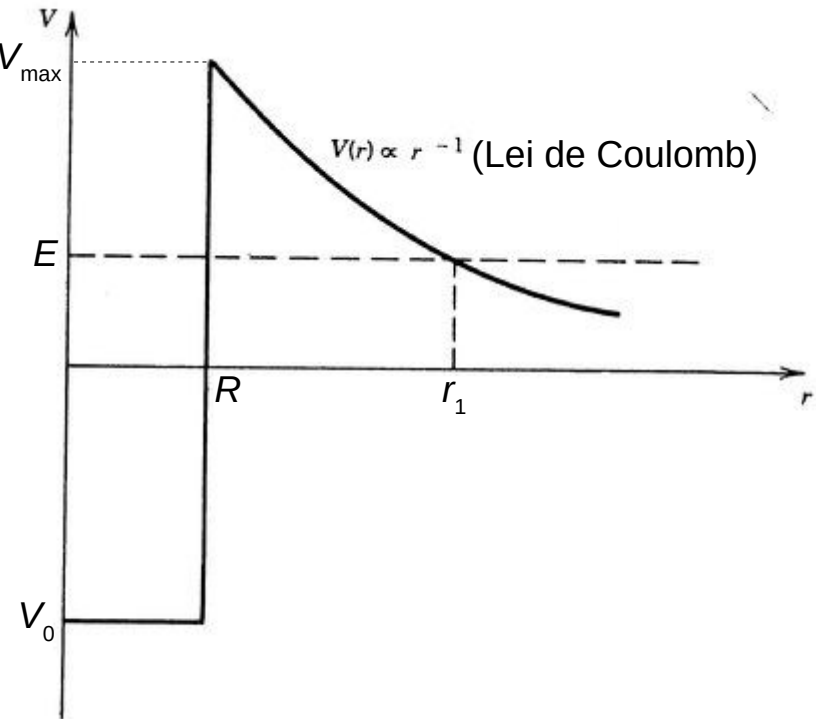
=> taxa de choques com a parede:

$$N \approx v/R = \sqrt{(E - V_0)/2m} \cdot 1/R$$

Em cada choque, a probabilidade de tunelar para fora corresponde ao coeficiente de transmissão:

$$T \approx \exp[-2\sqrt{2m(V_{\max} - E)} \cdot a/\hbar],$$

onde $V_{\max} - E$ é a “altura”, e $a = r_1 - R$, a “largura” da barreira.



Aplicações do Efeito Túnel

Decaimento alpha (Гамма, Condon e Gurney, 1928)

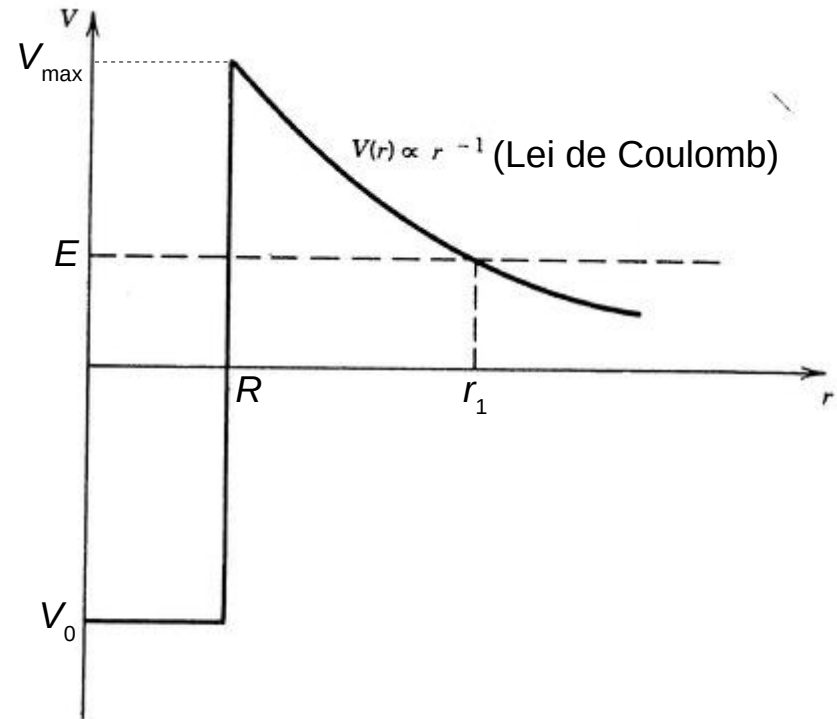
=> taxa de decaimento, que é o inverso da vida média do núcleo para o decaimento α , τ :

$$1/\tau = NT \approx \sqrt{(E-V_0)/2m} \cdot 1/R \cdot \exp[-2\sqrt{2m(V_{\max}-E) \cdot a/\hbar}],$$

o que depende fortemente de E , já que com energia alta:

- v , e então, a taxa de choques com a parede é alta,
- a altura da barreira é pequena,
- a largura da barreira é pequena,

tal que a vida média varia entre $1 \mu\text{s}$ e 10^{10} anos.



Aplicações do Efeito Túnel

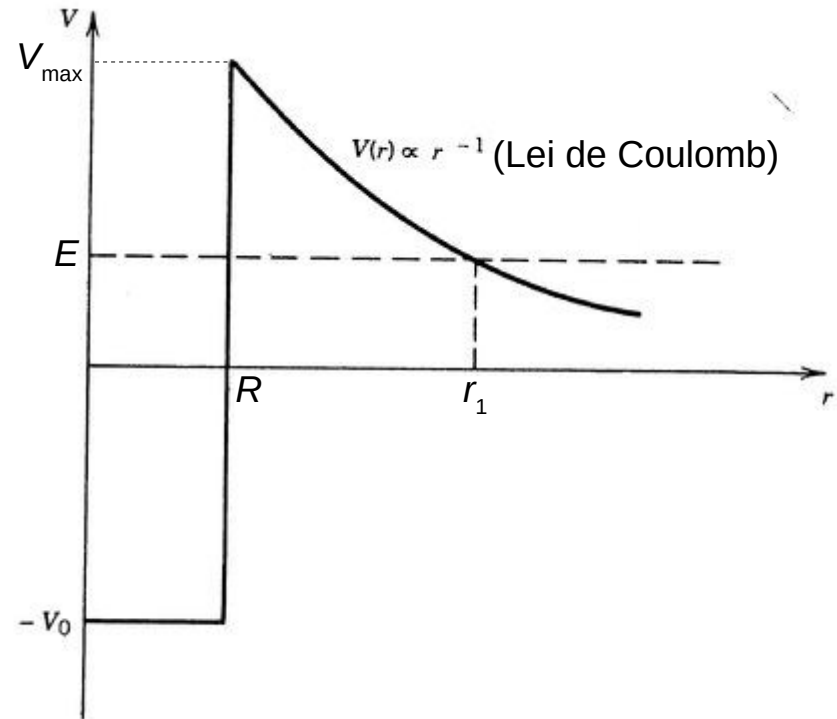
Fusão Nuclear (i.e. no interior do Sol)

O mesmo **potencial** aparece na **fusão nuclear**, só que, neste caso, os **núcleos** que fazem a fusão vão **ao encontro**, sendo jogados um contra o outro com **energia cinética** que depende da **temperatura**
 $E = 3/2 \cdot k_B T$ (\Rightarrow EdM, FeTerm).

Para que, classicamente, a fusão possa acontecer esta **energia** tem que **superar** a **repulsão de Coulomb** até onde a **força forte** toma conta:

$$3/2 \cdot k_B T \geq Z_1 Z_2 e^2 / 4\pi\epsilon_0 R,$$

onde Z_1 e Z_2 são os números atômicos dos núcleos fusionando.



Aplicações do Efeito Túnel

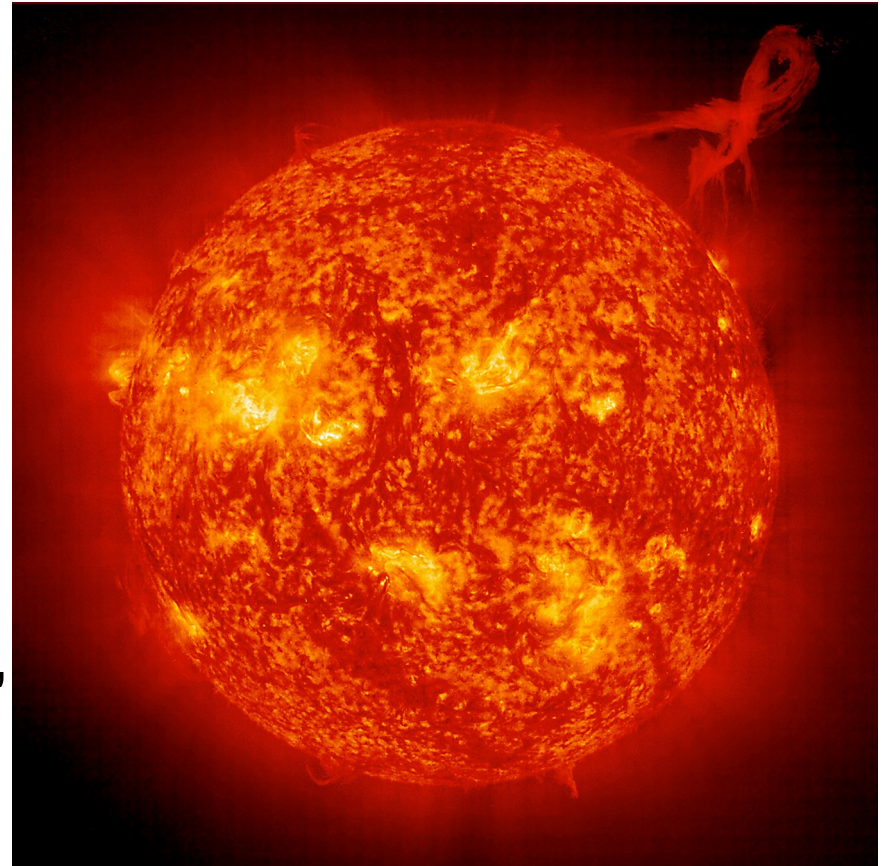
Fusão Nuclear (i.e. no interior do Sol)

Para o principal processo de fusão nuclear que acontece no **interior** do **Sol**, a fusão de 4 núcleos de **hidrogênio** para 1 núcleo de **hélio**, processo que **gera** a **energia** que faz o **Sol** irradiar, a **temperatura** no seu **interior** teria que ser $\sim 10^{10}$ K, bem mais que ela é, $\sim 1.6 \cdot 10^7$ K.

A fusão acontece por que, às vezes, os **núcleos** **passam** a **barreira** de **Coulomb** com **energia cinética** bem **mais baixa** que $Z_1 Z_2 e^2 / 4\pi\epsilon_0 R$, graças ao **efeito túnel**.

=> Devemos a **energia solar** ao **efeito túnel**!

Para mais detalhes, vide a disciplina Introdução à Física Estelar.



A Equação de Schrödinger em Três Dimensões

Muitos **fenômenos quânticos** podem ser ilustrados no espaço **unidimensional** (quantização de energia, tunelamento, etc.), mas para outros temos que levar em conta as **três dimensões** espaciais (por exemplo, em questões que envolvem momento angular).

A função de onda vira uma função das três coordenadas espaciais (e talvez do tempo):

$$\psi = \psi(x, y, z), \quad \text{resp.} \quad \Psi = \Psi(x, y, z, t)$$

e o potencial também (a partir de agora só tratamos do caso independente do tempo):

$$V = V(x, y, z)$$

A Equação de Schrödinger em Três Dimensões

Agora, o **quadrado do módulo da função de onda** dá a **probabilidade** de encontrar a partícula no voluminho retangular entre x e $x+dx$, y e $y+dy$ e z e $z+dz$:

$$P(x, y, z)dxdydz = |\psi(x, y, z)|^2 dxdydz = \psi^*(x, y, z)\psi(x, y, z)dxdydz$$

Para calcular a **probabilidade** de encontrar a partícula **no voluminho V** , temos que **integrar** $P(x, y, z)$ sobre V (\Rightarrow FVV):

$$\begin{aligned} P_V &= \iiint_V P(x, y, z) dxdydz = \iiint_V |\psi(x, y, z)|^2 dxdydz \\ &= \iiint_V \psi^*(x, y, z)\psi(x, y, z) dxdydz \end{aligned}$$

e a **condição de normalização** é sobre o **espaço 3D inteiro**:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} P(x, y, z) dxdydz &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dxdydz \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, y, z)\psi(x, y, z) dxdydz = 1 \end{aligned}$$

A Equação de Schrödinger em Três Dimensões

Temos que formular a **Equação de Schrödinger** em **três dimensões**:

A segunda derivada d^2/dx^2 deve ser substituída pela “segunda derivada 3D”, o **operador laplaciano**:

$$\Delta = \nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2 \quad (=> \text{FVV})$$

=> **Equação de Schrödinger em três dimensões**:

$$-\hbar^2/2m \cdot (\partial^2\psi/\partial x^2 + \partial^2\psi/\partial y^2 + \partial^2\psi/\partial z^2) + V(x,y,z) \cdot \psi(x,y,z) = E \cdot \psi(x,y,z)$$

A Equação de Schrödinger em Três Dimensões

Exemplo: O poço quadrado infinito em três dimensões (melhor: “poço cúbico”):

$$V(x, y, z) = 0 \quad \text{para } 0 < x < L, 0 < y < L \text{ e } 0 < z < L$$
$$\infty \quad \text{fora deste cubo}$$

Solução: $\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$,

onde $\psi_1(x)$, $\psi_2(y)$ e $\psi_3(z)$ são **soluções** do **poço quadrado infinito unidimensional** (\Rightarrow 2 aulas atrás):

$$\psi(x, y, z) = (2/L)^{3/2} \cdot \text{sen } k_1 x \cdot \text{sen } k_2 y \cdot \text{sen } k_3 z =: \psi_{n_1 n_2 n_3},$$

onde $k_{1,2,3} = n_{1,2,3} \pi / L$ dentro do cubo
0 fora do cubo

$$E = p^2 / 2m = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) / 2m = \hbar^2 / 2m \cdot (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$
$$= \hbar^2 \pi^2 / 2m L^2 \cdot (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) =: E_{n_1 n_2 n_3}$$

A Equação de Schrödinger em Três Dimensões

O poço quadrado infinito em três dimensões

$$V(x, y, z) = 0 \quad \text{para } 0 < x < L, 0 < y < L \text{ e } 0 < z < L$$
$$\infty \quad \text{fora deste cubo}$$

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = (2/L)^{3/2} \cdot \text{sen } k_1 x \cdot \text{sen } k_2 y \cdot \text{sen } k_3 z,$$

onde $k_{1,2,3} = n_{1,2,3} \pi / L$ dentro do cubo

0 fora do cubo

$$E_{n_1 n_2 n_3} = p^2 / 2m = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) / 2m = \hbar^2 / 2m \cdot (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$
$$= \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2 \cdot (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

Em geral, no caso **3D**, obtemos soluções que podem ser parametrizadas por **três números quânticos**.

Exercício: Confirme, que estas soluções satisfaz a Equação de Schrödinger 3D para o potencial dado.

A Equação de Schrödinger em Três Dimensões

O poço quadrado infinito em três dimensões

Estas funções de onda são **ondas estacionárias** no **interior** do **cubo**.

Aqui ilustrados:

Alguns exemplos para o caso 2D

(O 3D é análogo, mas difícil de desenhar).

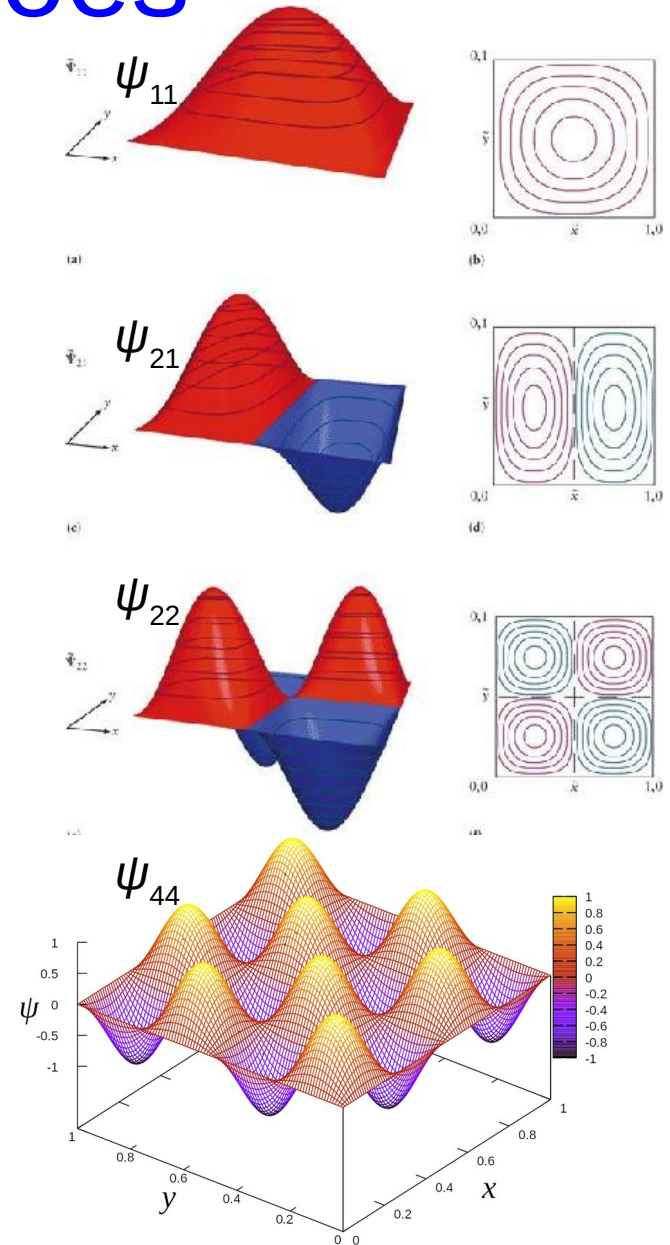
Como nos outros exemplos, estas ondas

oscilam no **tempo**,

a função de onda completa ainda contém

a parte dependente do tempo,

$$\varphi(t) = e^{-i\omega t} = e^{-iEt/\hbar}.$$



A Equação de Schrödinger em Três Dimensões

O poço quadrado infinito em três dimensões

Olhando pras **energias**:

$$L_1 = L_2 = L_3$$

Várias soluções $n_1 n_2 n_3$

(por exemplo 112, 121 e 211)
têm as mesmas energias

=> **degenerescência**
do **nível de energia**

$$E_{122} = E_{212} = E_{221} = 9E_1$$

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6E_1$$

$$E_{111} = 3E_1$$

Degenerescências surgem
frequentemente em problemas

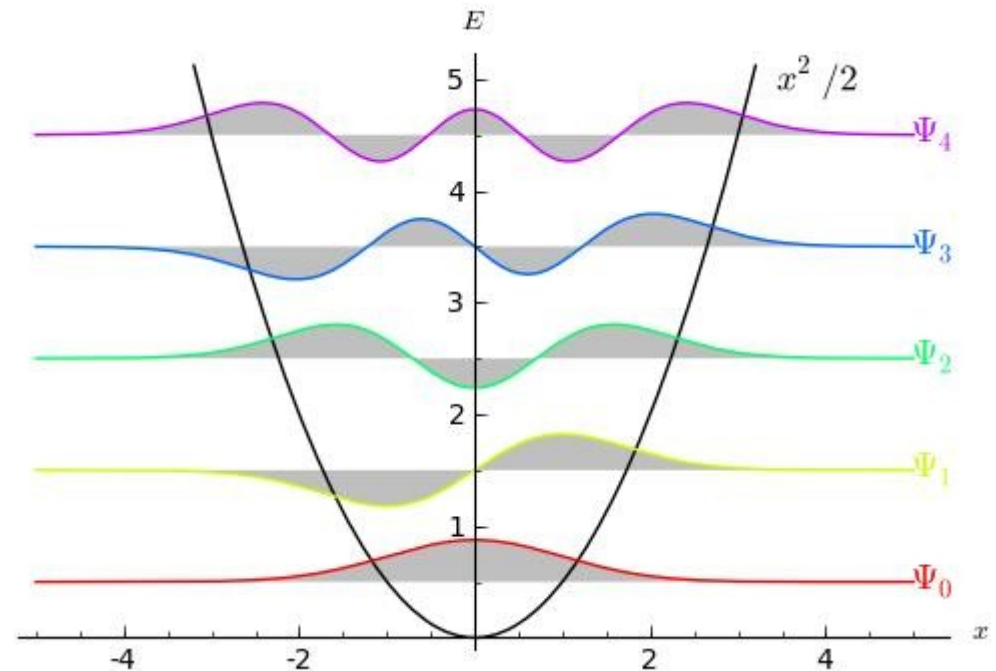
com alto grau de **simetria** (Um poço cúbico é altamente simétrico).

Física Quântica

FIM PARA HOJE



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/Quantica.html>