

Uma abordagem didática do tunelamento quântico: a partir do estudo da barreira potencial retangular simples

Pâmela Safne de Souza Silva¹ e Prof. Dr. Lúcio Fábio Pereira da Silva²

^{1,2}Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia-ICET, Universidade Federal do Amazonas-UFAM, Itacoatiara,
Amazonas, Brasil

^{1,2}Universidade Federal do Amazonas-UFAM, Manaus, Amazonas, Brasil

*Email do autor principal: pamelasafne605@gmail.com

Resumo: Este trabalho apresenta os resultados de um projeto do Programa Institucional de Bolsa de Iniciação Científica-PIBIC, que se concentra no estudo do tunelamento de partículas em potenciais elementares, especificamente em potenciais retangulares unidimensionais. Os cálculos das probabilidades de reflexão, transmissão e tunelamento, juntamente com suas interpretações, são detalhados. Além disso, são abordadas as análises e discussões sobre a estimativa do tempo necessário para que uma partícula atravessasse esse potencial generalizado, a avaliação dos efeitos da assimetria na transmissão da partícula através do potencial, tanto para energias abaixo quanto acima da barreira potencial, assim como aplicações do fenômeno. No âmbito desse projeto de iniciação científica, serão exploradas as implicações das estimativas temporais decorrentes do princípio de incerteza de Heisenberg e as aplicações práticas do efeito túnel.

Palavras-chave: Física quântica, Tunelamento, Potencial barreira, Coeficiente de transmissão e reflexão.

Abstract: This work presents the results of a project from the Institutional Scientific Initiation Scholarship Program-PIBIC, which focuses on the study of tunneling of particles in elementary potentials, specifically in one-dimensional rectangular potentials. Calculations of reflection, transmission, and tunneling probabilities, along with their interpretations, are detailed. In addition, analyzes and discussions about estimating the time required for a particle to cross this generalized potential are addressed, as well as the evaluation of the effects of asymmetry in the transmission of the particle through the potential, both for energies below and above the potential barrier. Within the scope of this scientific initiation project, the implications of temporal estimates arising from Heisenberg's uncertainty principle and practical applications of the tunnel effect will be explored.

Keywords: Quantum physics, Tunneling, Barrier potential, Transmission and reflection coefficient.

1 Introdução

A exploração do fenômeno de transporte de elétrons é um marco central na Física, desempenhando um papel crucial, especialmente no domínio da matéria condensada. Um exemplo intrigante desse escopo reside na busca por entender como metais e semicondutores reagem a campos elétricos externos ou voltagens aplicadas, variando em função da temperatura e da qualidade da amostra. Esses desafios, sob o pano de fundo da teoria quântica, impulsionam a compreensão da interação desses materiais com o ambiente.

Ademais, a dispersão de elétrons provenientes de moléculas pequenas despertou um interesse crescente, tanto no âmbito teórico quanto experimental, como discutido em 1 e 2. Este fenômeno assume relevância em diversos contextos, desde a modelagem de plasmas até a elucidação de processos astrofísicos. A compreensão dessas interações é essencial para o controle do processamento de plasma na indústria e até mesmo para questões ambientais, como o aumento da concentração de vapor de combustíveis na atmosfera.

Outro aspecto fundamental é o fenômeno do tunelamento quântico, que ilustra a discrepância marcante entre partículas regidas por princípios quânticos e os objetos da Física Clássica. A habilidade dessas partículas em atravessar barreiras constitui a base para uma série de processos, desde ligações químicas até decaimentos radioativos. Além disso, ela

está intrinsecamente relacionada com a fusão nuclear que ocorre nos núcleos de hidrogênio no Sol, produzindo luz solar. A importância desse fenômeno é amplamente documentada, refletindo-se em trabalhos como 3, 4, 5 e 6.

O desafio de explicar a mecânica quântica transcende o âmbito científico, refletindo-se na dificuldade de comunicar esses conceitos ao público. A natureza abstrata e probabilística da teoria dificulta sua tradução didática e popularização. Nesse contexto, abordagens que simplificam os conceitos enquanto ainda ilustram a abstração subjacente podem aprimorar a compreensão. A inclusão desses tópicos em cursos de graduação, como Física Moderna e Estrutura da Matéria, é um passo na direção certa, porém a complexidade da mecânica quântica muitas vezes requer uma exploração mais aprofundada.

Assim, este trabalho visou a investigação do fenômeno de tunelamento e suas aplicações. Além de abordar as bases teóricas por meio de revisão bibliográfica, exploramos algumas aplicações práticas desses fenômenos em sistemas físicos. Nosso enfoque foi resolver a equação de Schrödinger para barreira retangular simples, discutimos a ideia controversa de tempo de tunelamento e seus significados na mecânica quântica.

A pesquisa aqui descrita buscou também popularizar e facilitar o entendimento de professores de Física e estudantes de graduação. Ao introduzirmos esses conceitos de maneira mais acessível, acreditamos que poderemos enriquecer a formação acadêmica futura e contribuir para uma disseminação

mais eficaz do conhecimento científico.

2 Metodologia ou Procedimento Experimental/Prática

A metodologia foi executada em três fases, onde foram considerados os passos necessários para que se conseguíssemos finalizar o estudo.

1ª FASE- Contextualização científica: Com o objetivo de compreender a temática, duas frentes paralelas serão destacadas, consistiu em um estudo dirigido sobre soluções da equação de Schrödinger do para potenciais simples, buscando alinhar o entendimento do bolsista com as necessidades do projeto. A outra frente consistiu em uma busca sobre o tema será realizada na literatura, de trabalhos similares e informações como, por exemplo, sua data de descoberta, cientistas envolvidos nas pesquisas, equações de onda, modelos físico-matemáticos, condições de contorno e aplicações, etc. Também serão pesquisadas e estudadas as principais aplicações da temática em sistemas físicos. Esse estudo compôs-se em pesquisar e compreender suas aplicações, condições de contorno, eventos e, por consequência, o porquê é importante estudar esse fenômeno da mecânica quântica.

2ª FASE- Análise e compilação dos elementos para edição do material: Nessa fase buscaremos decidir a estética, a escolha apropriada de transposição didática e a concepção de aprendizagem para a apresentação e comunicação da temática aos alunos de matemática e física.

3 Desenvolvimento e Resultados

Foram encontrados o coeficiente de transmissão de uma partícula em uma barreira de potencial, realizado uma dedução do princípio de incerteza de Heisenberg, uma discussão sobre o significado e diferentes interpretações do tempo de tunelamento na física quântica e foi apresentada algumas aplicações do efeito túnel.

3.1 Tunelamento e o coeficiente de transmissão

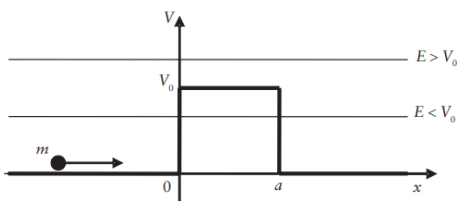
O tunelamento quântico é certamente um dos fenômenos que mostram quão profundamente partículas como elétrons, regidos pelas leis da física quântica, diferem das coisas que estão regidas pela Física Clássica. A partir de sua identificação, percebeu-se a capacidade das partículas de atravessar barreiras potenciais. Fenômeno que está relacionado a vários "comportamentos anômalos" explicados pela física quântica e que apresenta grande aplicabilidade na tecnologia e em outras áreas da ciência, como por exemplo, na química.

A barreira de potencial consiste numa região limitada que tem energia maior que de uma partícula que é especificada pela presença de um potencial. Barreiras de potencial são muito comuns no dia-a-dia. Exemplo: Um carro de montanha-russa prestes a subir uma ladeira.

Na Física Quântica, a transmissão e a reflexão de partículas por barreiras de potencial são também muito importantes, sendo responsáveis por diversos fenômenos interessantes e aplicações práticas.

Existem duas maneiras de superar uma barreira de potencial. De acordo com a teoria clássica, uma partícula deve ter energia superior à altura da barreira de potencial para poder atravessá-la, ou seja, a partícula não pode passar se tiver energia inferior que a da barreira. Por outro lado, na teoria quântica, por meio do fenômeno chamado de efeito de túnel, sugere que mesmo partículas com energia inferior à altura da barreira têm uma probabilidade finita de a atravessar. Em resumo, a barreira de potencial pode ser transposta com energia suficiente, conforme a teoria clássica, ou através do efeito de túnel, de acordo com a teoria quântica.

Figure 1 – Uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira de potencial. Mostra os dois casos possíveis: $E < V_0$ (energia menor que a altura da barreira) e $E > V_0$ (energia maior que a altura da barreira)



Fonte: [6]

Trataremos o caso de uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira, definida pelo seguinte perfil de energia potencial:

$$\begin{cases} V(x) = 0, & x < 0 \\ V(x) = V_0, & 0 < x < a \\ V(x) = 0, & x > a \end{cases} \quad (1)$$

Trataremos de três regiões, a Região I para $x < 0$, a Região II para $0 < x < a$, que é a Região dentro da barreira e Região III para $x > a$.

A equação de Schrodinger dependente do tempo, considerando nossa barreira de potencial no qual a propagação se dá apenas

na direção x , podemos escrever como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}, \quad (2)$$

onde substituindo, $\psi(x,t) = \varphi(t)\psi(x)$ e dividindo ambos os lados da equação por $\psi(x)$ e $\varphi(t)$, sendo $\varphi(t)$ a parte temporal da função de onda e $\psi(x)$ a parte espacial da função de onda, obtemos:

$$\frac{1}{\psi(x)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \right) = i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt}. \quad (3)$$

O lado esquerdo é apenas uma equação em função de x e o lado direito em função de t , para ambos lados serem iguais devem ser uma constante, que denotaremos por E , assim:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} &= E; \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) &= E\psi(x). \end{aligned} \quad (4)$$

A solução para a primeira equação em função de t é simples, ao integrarmos obtemos:

$$\varphi(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (5)$$

As soluções estacionárias da equação 2 são:

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (6)$$

Temos a equação de Schrodinger estacionária dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi = E\psi, \quad (7)$$

podemos reescrever como:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi - k^2 \psi = 0,$$

onde $k^2 = \frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}$, no qual usaremos mais adiante, essa constante só é válida na região interior a barreira.

Resolveremos a equação (7) para o caso em que a energia é menor que a altura da barreira. As funções de onda das 3 regiões conforme

mostradas equação 1 podem ser expressas com a equação:

$$\begin{cases} \psi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & k_1 = \frac{\sqrt{(2mE)}}{\hbar} \\ \psi_2 = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}; & k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \\ \psi_3 = Fe^{ik_1x}. \end{cases} \quad (8)$$

- Ae^{ik_1x} é uma onda incidente na barreira, lembrando que corresponde a um momento positivo;
- Be^{-ik_1x} é uma onda refletida a partir da barreira e corresponde a um momento negativo, pois movimenta-se para a esquerda;
- A função ψ_2 representa as amplitudes que variam exponencialmente dentro da barreira;
- ψ_3 é uma onda oscilante que representa a propagação da partícula após o tunelamento.

A solução de exponencial negativa na região III não é expressa na função ψ_3 , considerando que não há como a onda ser refletida.

A probabilidade de uma partícula estar se deslocando no sentido dos x positivos, para a direita, à esquerda da barreira é proporcional a $|A^2|$, e a probabilidade da partícula estar se deslocando para a direita no lado direito após a barreira é $|F^2|$. A razão entre essas duas é chamada de probabilidade de transmissão, T.

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (9)$$

Vamos aplicar as condições contorno nas funções de onda, ou seja, nos pontos onde as soluções de diferentes regiões se encontram em $x = 0$ e $x = a$, tanto ψ quanto $d\psi/dx$ devem ser iguais devido a condição de continuidade da

função de onda que é um requisito obrigatório. Em $x = 0$, as funções exponenciais são iguais a 1, portanto para satisfazer a continuidade de $\psi(x)$ em $x = 0$ no qual teremos:

$$A + B = C + D. \quad (10)$$

Outra condição é para $x = 0$ para $\frac{d\psi}{dx}$, onde faremos $\frac{d\psi}{dx}|_{x=0}$ para ψ_1 e ψ_2 e igualando as duas, vamos obter:

$$ik_1(A - B) = k_2(C - D). \quad (11)$$

Agora considerando o ponto $x = a$, a condição de continuidade de $\psi(x)$ é representada por:

$$Ce^{k_2a} + De^{-k_2a} = Fe^{ik_1a}. \quad (12)$$

Por sua vez a continuidade de $\frac{d\psi(x)}{dx}$ em $x = a$, tal que calculando $\frac{d\psi}{dx}|_{x=a}$ para ψ_2 e ψ_3 e igualando ambas, fornece

$$k_2(Ce^{k_2a} - De^{-k_2a}) = ik_1Fe^{ik_1a}. \quad (13)$$

Com as condições de continuidade obtemos 4 equações para 5 incógnitas (que são os coeficiente A,B,C,D e F). Em particular, para o fenômeno de tunelamento o que interessa é o coeficiente de transmissão T, que é definido por A e F.

Primeiro definimos o coeficiente A em termos de C e D, para isso utilizamos as eqs. (10) e (11):

$$\begin{cases} A + B = C + D; \\ (A - B) = -i\frac{k_2}{k_1}(C - D). \end{cases}$$

somando as duas equações obtemos:

$$2A = C\left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right) + D\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right). \quad (14)$$

Para relacionar A com F, podemos determinar C e D em função de F e substituir os valores encontrados na Eq. (14). Portanto,

utilizaremos as Eqs. (12) e (13):

$$\begin{cases} Ce^{k_2a} + De^{-k_2a} = Fe^{ik_1a}, \\ Ce^{k_2a} - De^{-k_2a} = \frac{ik_1}{k_2} Fe^{ik_1a}. \end{cases}$$

Se somarmos as equações do sistema acima, definimos o coeficiente C em termos de F, ou seja:

$$C = \frac{F}{2} e^{ik_1a} \left(1 + \frac{ik_1}{k_2} \right) e^{-k_2a}, \quad (15)$$

$$D = \frac{F}{2} e^{ik_1a} \left(1 - \frac{ik_1}{k_2} \right) e^{k_2a}. \quad (16)$$

Substituindo e manipulando algebricamente C e D na eq.(11), obtemos:

$$4A = Fe^{ik_1a} \left[2(e^{k_2a} + e^{-k_2a}) + i \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right) (e^{k_2a} - e^{-k_2a}) \right]. \quad (17)$$

Pode-se reescrever essa equação em termos de senos e cossenos hiperbólicos, basta lembrar que essas funções são definidas em termos de funções exponenciais $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$ e $\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$.

Considerando que $x = k_2a$, tem-se o coeficiente A em termos do coeficiente F:

$$A = \frac{F}{4} e^{ik_1a} \left[4\cosh(k_2a) + 2i \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right) \sinh(k_2a) \right]. \quad (18)$$

Queremos obter o quadrado das amplitudes de A e F, e para isso temos que calcular o produto escalar (como as funções são complexas, temos que considerar o complexo conjugado), isto é, $|A|^2 = A^*A$. Portanto multiplicando a equação (18) pelo seu complexo conjugado nos dá:

$$|A|^2 = |F|^2 \left[1 + \sinh^2(k_2a) \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \right] \right]. \quad (19)$$

Da simplificação do termo dentro dos colchetes no qual $\sinh^2(k_2a)$ multiplica,

lembrando que k_1 e k_2 estão expressos na eq.(8), obtemos:

$$\left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_1 k_2} \right)^2 \right] = \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}.$$

Daí, substituindo na eq.(19), teremos:

$$|A|^2 = |F|^2 \left(1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2(k_2a) \right). \quad (20)$$

Chegamos na expressão do coeficiente de transmissão T, que é dado por:

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{|F|^2}{|F|^2 \left(1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2(k_2a) \right)}; \quad (21)$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2(k_2a)}.$$

Assim, como a onda incidente é ou refletida ou transmitida, temos a condição que $T + R = 1$, ou seja, se definimos T, logo também definimos o coeficiente de reflexão R e vice-versa.

3.2 Princípio de Incerteza Energia-tempo

Ao analisarmos o tunelamento da partícula poderíamos nos perguntar sobre o tempo que tal fenômeno leva para acontecer. A complexidade da resposta a essa pergunta se relaciona com o princípio de incerteza energia-tempo de Heisenberg e ainda com a própria noção de tempo da mecânica quântica.

O princípio da incerteza de Heisenberg foi proposto pelo físico alemão Werner Heisenberg em 1927, como resultado de seus estudos sobre a teoria quântica. Na época, Heisenberg estava trabalhando na formulação matemática da mecânica quântica, que é a teoria que descreve o comportamento de partículas subatômicas, como elétrons e fótons.

Foi observado por Heisenberg que existe

um limite fundamental para a precisão com a qual se pode medir simultaneamente a posição e o momento de uma partícula quântica. Ele chegou à conclusão de que isso decorre da natureza ondulatória das partículas quânticas, que são descritas matematicamente por meio de funções de onda.

Heisenberg derivou ainda em 1927 a relação de incerteza para energia e tempo, que é escrita como:

$$\delta t \cdot \delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (22)$$

Para dedução, consideremos a equação de Schrodinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = \hat{H}\psi.$$

Vamos deduzir o princípio de incerteza Energia-Tempo. Para isso, considere x , p e E como variáveis dinâmicas, t uma variável independente.

Considere um observável $Q(x, p, t)$ queremos saber quão rápido varia esse observável em relação ao tempo. Então calculamos a derivada em função do tempo do valor esperado daquele observável que estamos analisando.

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle.$$

Em seguida, ao distribuímos a derivada e substituímos que $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi$, temos então:

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi | \hat{Q} \psi \rangle + \langle \psi | \hat{Q} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \rangle + \underbrace{\langle \psi | \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \psi \rangle}.$$

Agrupando:

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[-\langle \psi | \hat{H} \hat{Q} \psi \rangle + \langle \psi | \hat{Q} \hat{H} \psi \rangle \right] + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle,$$

$\left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle = 0$ desde que Q não dependa explicitamente do tempo:

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle \right].$$

O princípio de incerteza generalizado é dado por:

$$\delta_A^2 \delta_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2.$$

Considerando: $\hat{A} = \hat{H}$ e $\hat{B} = \hat{Q}$

$$\delta_H^2 \delta_Q^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \frac{\hbar}{i} \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2.$$

Com simples manipulações algébricas, obtemos:

$$\delta_H \delta_Q \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right|.$$

Se considerarmos $\delta_H = \Delta E$ e $\delta_Q = \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \Delta t$ (Δt é tempo que leva o sistema a mudar substancialmente), teremos:

$$\Delta E \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \Delta t.$$

Portanto:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (23)$$

Segundo Griffiths [7] a mecânica quântica não relativística trata t e x em termos desiguais e portanto o principio de incerteza dado pela equação 23 está, "enfaticamente, não implicado" no princípio de incerteza de posição-momento, para o autor o princípio de incerteza Energia-tempo "é um monstro completamente diferente dos outros, cuja a semelhança superficial com o princípio de incerteza posição-momento, é na verdade ilusório".

A posição, momento e energia representam variáveis dinâmicas, ou seja, são características mensuráveis de um sistema em qualquer

momento específico. Contudo, o tempo em si não se enquadra como uma variável dinâmica, pelo menos em uma teoria não relativista. Diferentemente da posição e da energia, não é possível simplesmente realizar uma medição direta do "tempo" de uma partícula em uma teoria quântica não relativística. O tempo atua como a variável independente, em relação à qual as quantidades dinâmicas são expressas como funções.

Especificamente, o Δt mencionado no princípio da incerteza para a energia-tempo não se refere ao desvio-padrão de um conjunto de medidas do tempo. De maneira simplificada, ele representa o intervalo de tempo durante o qual o sistema sofre mudanças substanciais 7.

Oswaldo Pessoa [8] discute em sua obra intitulada "Conceitos de Física Quântica" a possibilidade da existência de um operador de tempo. O autor argumenta que, se de fato um operador de tempo existisse, ele teria a capacidade de atribuir valores contínuos à energia, abrangendo uma faixa que vai de menos infinito a mais infinito. No entanto, é observado que o espectro de energia associado a sistemas ligados é discreto. Mesmo no caso de uma partícula livre, esse espectro apresenta um limite inferior, uma vez que a ausência desse limite geraria problemas de estabilidade para o sistema.

Essa consideração tem implicações profundas no princípio de incerteza energia-tempo de Heisenberg. A existência de um operador de tempo que possibilitasse uma medida extremamente precisa do tempo seria incompatível com a natureza discreta do espectro de energia.

Mais adiante, nesse trabalho abordaremos algumas discussões e possibilidades para o cálculo do tempo de tunelamento em uma barreira potencial simples e seus significados.

3.3 Tempo de tunelamento

Considerando o mesmo método usado por 3 em sua obra "Tempos de Tunelamento", analisaremos o método pelo qual ele calculou o tempo de permanência e tempo de fase para calcular o tempo de tunelamento. Consideraremos ainda a figura.1 que tem por potencial expresso na eq.(1).

relembrando que $\psi(x)$ foi expressa para as 3 regiões da fig.(1) como eq.(8).

Das equações (10), (11), (12) e (13), podemos escrever os coeficientes B, C, D e F em termos de A:

$$B = \frac{(k_1^2 + k_2^2) \sinh(k_2 a)}{d(k_1, k_2; a)} A; \quad (24)$$

$$C = \frac{k_1(k_1 + ik_2)e^{k_2 a}}{d(k_1, k_2; a)} A; \quad (25)$$

$$D = \frac{k_1(k_1 - ik_2)e^{-k_2 a}}{d(k_1, k_2; a)} A; \quad (26)$$

$$F = \frac{i2k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{d(k_1, k_2; a)} A. \quad (27)$$

aqui convém definir a função $d(k_1, k_2; a)$, na qual usaremos adiante:

$$d(k_1, k_2; a) = (k_1^2 - k_2^2) \sinh(k_2 a) + i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a) \quad (28)$$

e

$$|d(k_1, k_2; a)|^2 = (k_1^2 - k_2^2)^2 \sinh^2(k_2 a) + 4k_1^2 k_2^2. \quad (29)$$

Bonin, em [3] introduz várias definições de tempo de tunelamento no âmbito da Mecânica Quântica não-relativística. Além disso, ele ressalta que, em tempos passados, o cálculo do tempo era realizado sob a premissa de que o

tempo de permanência, que não distingue se o sistema quântico é transmitido ou refletido pela barreira, deveria ser igual à soma do tempo de fase da onda transmitida e da onda refletida. A seguir, traremos o resumo do trabalho de Bonin [3], mostrando como o tempo de tunelamento pode ser calculado por meio do tempo de permanência e do tempo de fase.

Tempo de permanência e termo de interferência

Em sua obra, [3] calculou o tempo de permanência estacionário para um sistema quântico na região da barreira de potencial retangular, no qual está sintetizado abaixo:

No caso da região de incidência, onde $x < 0$, o fluxo de partículas incidentes, corresponde à:

$$J_{inc} = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2. \quad (30)$$

Seja uma região do espaço entre os pontos 0 e a , com $0 < a$. O tempo de permanência estacionário nessa região é definido como:

$$t_P = \frac{\int_0^a |\psi_2(x)|^2 dx}{J_{inc}}, \quad (31)$$

onde $|\psi_2(x)|^2$ pode ser expresso como:

$$|\psi_2(x)|^2 = \frac{2k_1^2}{|d(k_1, k_2; a)|^2} \left\{ (k_1^2 - k_2^2) \cdot \cosh(2k_2(a-x)) + k_2^2 - k_1^2 \right\} |A|^2 \quad (32)$$

Ao substituir a equação acima e a eq.(29) na eq.(31) e integrando, o autor [3] concluiu que o tempo de permanência é:

$$t_P = \frac{mk_1}{\hbar |d(k_1, k_2; a)|^2} \left[\left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_2} \right) \sinh(2ak_2) - 2a(k_1^2 - k_2^2) \right]. \quad (33)$$

Em [3], é apresentado que:

$$t_P(k_1, k_2; a) = t_{tun}(k_1, k_2; a) - t_i(k_1, k_2; a),$$

sendo t_{tun} o tempo de tunelamento, podemos reescrever:

$$t_{tun}(k_1, k_2; a) = t_P(k_1, k_2; a) + t_i(k_1, k_2; a), \quad (34)$$

logo, uma maneira de calcularmos o tempo de tunelamento é por meio do tempo de permanência e do termo de interferência, t_i .¹

O termo de interferência ajuda a explicar como as ondas de probabilidade se combinam ou interferem durante o processo de tunelamento. Isso é fundamental para entender por que as partículas quânticas têm uma probabilidade não nula de passar através da barreira, mesmo quando sua energia é menor do que a energia potencial da barreira.

Ele pode ser calculado por:

$$t_i = -\frac{m}{\hbar k_1^2} \text{Im}(R). \quad (35)$$

O coeficiente de reflexão pode ser escrito como:

$$R(k_1, k_2; a) = \frac{(k_1^2 + k_2^2) \sinh(k_2 a)}{|d(k_1, k_2; a)|^2} (k_1^2 - k_2^2) \sinh(k_2 a) - i2k_1 k_2 \cosh(k_2 a).$$

Sua parte imaginária então é:

¹O "termo de interferência" refere-se à contribuição da interferência das ondas de probabilidade associadas a uma partícula quântica que está atravessando uma barreira de potencial. No contexto do tunelamento quântico, esse termo descreve como as diferentes partes da função de onda da partícula interferem umas com as outras à medida que ela se move através da barreira. Isso é particularmente relevante quando se considera que uma partícula quântica pode se comportar como uma onda, e essa onda pode ser dividida em partes transmitidas e refletidas.

$$\text{Im}[R(k_1, k_2; a)] = -\frac{k_1 k_2 (k_1^2 + k_2^2) \sinh(2k_2 a)}{|d(k_1, k_2; a)|^2}.$$

Substituindo na equação 35, temos o termo de interferência:

$$t_i(k_1, k_2; a) = \frac{m}{\hbar |d(k_1, k_2; a)|^2} \frac{k_2}{k_1} (k_1^2 + k_2^2) \sinh(2ak_2). \quad (36)$$

Assim, substituindo t_p e t_i na equação 34, temos que o tempo de tunelamento é:

$$t_{\text{tun}}(k_1, k_2; a) = \frac{m}{\hbar |d(k_1, k_2; a)|^2} \left[\frac{(k_1^2 + k_2^2)^2}{k_1 k_2} \sinh(2ak_2) - 2k_1 a (k_1^2 - k_2^2) \right]. \quad (37)$$

Tempo de fase

Imaginemos uma partícula quântica se aproximando de uma barreira de energia. Para entender isso, pense nessa partícula como uma onda, como um pulso de luz. Nessa interpretação, a parte modulada da onda denota a amplitude da partícula, enquanto a fase reflete a natureza probabilística do sistema, delineando onde a partícula é mais provável de ser encontrada.

O tempo de fase alinha-se com a fase da onda quântica, indicando os pontos de crista ou vale. De modo correspondente, a fase da função de onda ressalta as regiões de máxima probabilidade de encontrar a partícula. Essa relação espelha como a partícula quântica apresenta uma maior chance de penetrar nas proximidades da barreira, contradizendo a expectativa clássica.

Agora, falando sobre a velocidade de grupo, pense nisso como a rapidez da propagação da amplitude, a diminuição da probabilidade de encontrar a partícula à medida que esta penetra

na barreira. Isso é como a probabilidade de encontrar a partícula diminuindo à medida que ela passa pela barreira.

Ao usar essa ideia de ondas de luz para pensar em partículas, vemos que a fase da função onda nos diz onde a partícula é mais provável de aparecer, e a amplitude revela a diminuição da probabilidade de encontrar a partícula à medida que ela atravessa a barreira.

Uma vez discutido, voltemo-nos para o método usado por 3, ele apresentou o coeficiente de tunelamento para uma barreira retangular como:

$$T(E) = T(k_1, k_2; a) = \frac{i2k_1 k_2 e^{-iak_1}}{d(k_1, k_2; a)}. \quad (38)$$

com fase da onda transmitida sendo:

$$\varphi_t(k_1, k_2; a) = \text{tg}^{-1} \left[\left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1 k_2} \right) \text{tgh}(ak_2) \right] - k_1 a. \quad (39)$$

Apresentou o tempo de fase da onda transmitida como:

$$\tau_f^T = t_{\text{tun}}^f \equiv t_s - t_e. \quad (40)$$

Sendo t_e o instante de entrada do pico de pacote incidente na barreira, dado por:

$$t_e = t_{\text{inc}}(0) = \hbar \left. \frac{d\varphi_1}{dE} \right|_{E_0},$$

t_s é o tempo de saída da barreira do pico transmitido:

$$t_s = t_{\text{trans}}(a) = \hbar \left. \frac{dk_1}{dE} \right|_{E_0} a + \hbar \left. \frac{d\varphi_1}{dE} \right|_{E_0} + \hbar \left. \frac{d\varphi_t}{dE} \right|_{E_0},$$

logo:

$$\tau_f^T = t_{\text{tun}}^f = \hbar \left. \frac{dk_1}{dE} \right|_{E_0} a + \hbar \left. \frac{d\varphi_t}{dE} \right|_{E_0}. \quad (41)$$

A derivada em função da energia da fase

dada é:

$$\frac{d\phi_t(k_1, k_2; a)}{dE} = -\frac{ma}{\hbar^2 k_1} + \frac{1}{\hbar |d(k_1, k_2; a)|^2} \cdot \left\{ (k_1^2 + k_2^2) \sinh(2ak_2) \left[k_2 \frac{m}{\hbar^2 k_1} + k_1 \frac{m}{\hbar k_2} \right] - 2k_1 a k_2 (k_1^2 - k_2^2) \frac{(-m)}{\hbar k_2} \right\}. \quad (42)$$

Ao substituir na eq.(40), [3] encontrou o "tempo de tunelamento calculado pelo método da fase estacionária para uma barreira retangular":

$$t_{tun}^f(k_1, k_2; a) = \frac{m}{\hbar |d(k_1, k_2; a)|^2} \left[\frac{(k_1^2 + k_2^2)^2}{k_1 k_2} \sinh(2ak_2) - 2k_1 a (k_1^2 - k_2^2) \right]. \quad (43)$$

Através dessa equação e do termo de interferência dado pela equação (36) ele calculou, pela equação $t_P(k_1, k_2; a) = t_{tun}^f(k_1, k_2; a) - t_i(k_1, k_2; a)$, o tempo de permanência estacionária, resultando exatamente na eq.(33).

3.3.1 Discussões a cerca do tempo de tunelamento

Nas obras de [3] e [4] há alguns fatores em comum, como o debate quanto aos diversos métodos sugeridos ao longo dos anos para encontrar o tempo de tunelamento e algumas das problemáticas. Alguns cálculos voltados para encontrar o tempo de tunelamento apresentados nas obras desses autores, se pode citar: o tempo de Buttiker e Landauer, o tempo de Larmor, tempo de medição fraco de Steinberg, tempo de tunelamento na teoria de Broglie-Bohm e outros métodos, no entanto, em cada interpretação, gerou resultados diferentes.

É importante comentar o fato de que a

maioria dos trabalhos voltados ao fenômeno de tunelamento gerou debates relacionados à estimativa do tempo de tunelamento quântico. Alguns desses debates, mencionados por 4, incluem a complexidade do tempo na mecânica quântica, que é considerado um parâmetro e não um operador. Isso dificulta o cálculo direto dos tempos de tunelamento e leva a discussões. Outro ponto de debate é a falta de sentido, ou seja, as definições contraditórias do tempo de tunelamento, o que resulta em visões opostas sobre se o conceito faz sentido dentro da interpretação ortodoxa. A questão de quanto tempo uma partícula leva para tunelar sob uma barreira carece de um significado claro.

Um teste crucial aborda a existência de uma definição clara de tempo de tunelamento na teoria de Broglie-Bohm, o que levanta a possibilidade de usar medições desse tempo como evidência para essa teoria. Isso poderia ser um teste importante para sua validade. Além disso, medições fracas em experimentos recentes sugerem que a medição fraca pode resolver a controvérsia sobre o tempo de tunelamento. As medições usando campos magnéticos fracos em partículas que tunelam através de barreiras ópticas fornecem pistas, mas a interpretação desses resultados ainda é objeto de debate.

Em resumo, este texto explora os desafios envolvidos na estimativa do tempo de tunelamento quântico, abordando a complexidade do tempo na mecânica quântica, a falta de consenso sobre seu significado, a possibilidade de testar teorias alternativas e a potencial solução oferecida pela medição fraca.

No trabalho de Bonin (2007)[3], ele expôs

o argumento do físico austríaco Wolfgang Ernst Pauli (1900—1958). Em 1933, Pauli argumentou contra a existência de um tempo observável na Mecânica Quântica, utilizando um raciocínio que foi replicado em seu livro intitulado "General Principles of Quantum Mechanics". Na transição da Mecânica Clássica para a Quântica, substituímos os colchetes de Poisson por comutadores divididos por $i\hbar$ e associamos operadores auto-adjuntos às quantidades físicas.

Pauli examinou a covariância dos colchetes de Poisson sob transformações canônicas e propôs a quantização de diferentes pares de variáveis canônicas conjugadas. No entanto, ao analisar a relação entre o operador Hamiltoniano (H) e o operador tempo (T), ele mostrou que não pode haver um operador auto-adjunto correspondente ao Hamiltoniano para sistemas com espectro discreto ou limitado. Isso significa que o tempo não é uma quantidade observável na Mecânica Quântica, mas sim um parâmetro de evolução temporal. Isso contradiz a ideia de um "observável tempo" na mecânica quântica, e em vez disso, o tempo é tratado como um elemento da evolução temporal dos sistemas.

3.4 Aplicações do fenômeno de Tunelamento

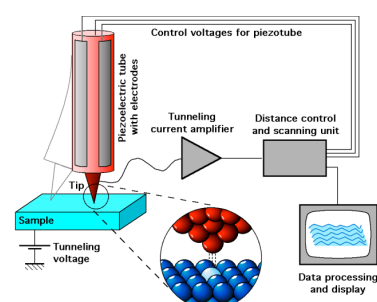
A seguir apresentaremos algumas aplicações do tunelamento quântico, vale ressaltar que muitos dos fenômenos abordados derivam de barreiras de potenciais irregulares, ou seja, cuja o cálculo do tunelamento tende a ser mais complexo que o da barreira retangular simples abordada anteriormente, no entanto, as ideias essenciais envolvidas no processo

são as mesmas, o que permitirá ao leitor uma compreensão básica dos fenômenos envolvidos.

Algumas das aplicações podem ser vistas em obras como na de (6) e (9):

3.4.1 Microscópio eletrônico de varredura por tunelamento (STM) 1981 - Gerd Binnig e Heinrich Rohrer:

Figure 2 – Microscópio de tunelamento



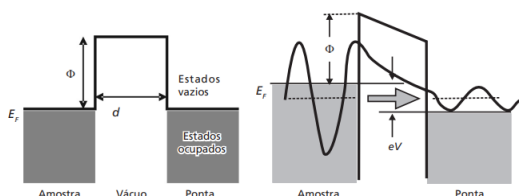
Fonte: [5]

O scanning tunneling microscope (microscópio de corrente por tunelamento) representado pela figura 2, ou simplesmente STM, foi inventado pelos físicos Gerd Binnig e Heinrich Rohrer em 1981, sendo que por sua invenção, em 1986 ganharam um prêmio nobel de física. O STM foi o primeiro instrumento capaz de gerar imagens reais de superfícies com resolução atômica.

Aplica-se uma voltagem entre uma superfície e uma ponta metálica muito fina, ao aproximar a ponta da amostra a uma distância bem pequena d , os elétrons da amostra começam a tunelar da amostra para a ponta (ou vice-versa), através da barreira de potencial que ocorre na região de vácuo entre a ponta e a amostra. O sentido dessa corrente de tunelamento depende da polaridade de uma

voltagem aplicada entre a ponta e a amostra como representada pela figura 2.

Figure 3 – Esquema de energias para o problema de tunelamento em um STM. À esquerda, temos o caso em que não há diferença de potencial entre a ponta e a amostra. No painel à direita tem uma voltagem igual a V aplicada entre a ponta e a amostra.

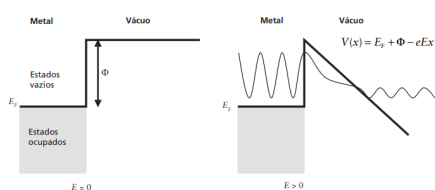


Fonte: [6]

3.4.2 Emissão de elétrons de metais frios

Outro exemplo de aplicação do tunelamento quântico é no caso de emissão de elétrons de metais frios, muito semelhante ao STM, observada pela primeira vez em 1922. Na qual notou-se que elétrons podem ser extraídos de metais, através da aplicação de um campo elétrico alto.

Figure 4 – Diagrama de energias para o problema de emissão de elétrons por metais frios. Mostra o que ocorre quando um campo elétrico é aplicado.



Fonte: [6]

3.4.3 Emissão de partículas alfa e a fusão nuclear:

Em 1928, os físicos Gamow, Condon e Gurney resolveram um problema há muito existente em relação à emissão das partículas alfa pelos núcleos, mostraram através de cálculos e experimentos, que a emissão de

partículas alfas do núcleo, que ocorre o decaimento de núcleos radioativos, acontecia com um nível de energia baixo de modo que não era possível explicar classicamente, mas possível explicar com o efeito túnel.

Já a fusão nuclear é um processo inverso da emissão das partículas alfa, no qual dois núcleos colidem, com essa colisão libera um alto nível de energia.

3.4.4 Outras aplicações práticas

O fenômeno de tunelamento apresenta relevância significativa em outras áreas, incluindo Medicina e Biologia, Microeletrônica e Criptografia Quântica.

Na Medicina e Biologia, o tunelamento é fundamental para compreender a transferência de elétrons e prótons em sistemas biológicos, tais como proteínas e enzimas. Esse conhecimento é crucial para a compreensão dos processos bioquímicos e pode abrir caminho para o desenvolvimento de novos medicamentos e tratamentos inovadores.

Já na área de Microeletrônica, o tunelamento desempenha um papel crucial em dispositivos de memória não voláteis, como as memórias flash. Esse fenômeno permite a programação e o apagamento eficiente de informações armazenadas, contribuindo para o armazenamento mais eficaz de dados em dispositivos eletrônicos.

Além disso, na Criptografia Quântica, o fenômeno de tunelamento é empregado em protocolos para garantir a segurança das comunicações e a transferência segura de informações. Esses protocolos aproveitam as propriedades quânticas das partículas e a impossibilidade de interferência não

autorizada sem detecção, proporcionando uma criptografia altamente segura.

Essas aplicações demonstram a importância do fenômeno de tunelamento em diferentes campos da ciência e da tecnologia, impulsionando avanços e inovações em suas respectivas áreas.

4 Conclusão

O objetivo central do projeto consistiu em investigar minuciosamente o fenômeno de tunelamento quântico barreira de potencial retangular. Para isso, conduzimos uma análise criteriosa de fontes bibliográficas, a fim de compreender tanto o contexto histórico da física quântica quanto os fundamentos da equação de Schrödinger e as teorias subjacentes ao intrigante efeito túnel. O centro de nossa pesquisa residia na análise aprofundada do tunelamento quântico de uma partícula cuja energia se encontrava abaixo de uma barreira de potencial. Detalhamos minuciosamente o processo de cálculo para determinar os coeficiente de reflexão e transmissão, indicadores cruciais da probabilidade de encontrarmos a partícula do outro lado da barreira, na região III. Além disso, simplificamos a dedução do princípio de incerteza de Heisenberg no contexto energia-tempo e examinamos minuciosamente a análise do tempo de tunelamento. Nosso estudo incluiu a exploração do método proposto por Bonin (2007) para investigar o tempo de tunelamento quântico em uma barreira de potencial retangular. Destacamos sua abordagem de desagregar a função de onda em componentes temporais e espaciais, resultando em equações que descrevem

soluções estacionárias em diferentes regiões do sistema. O cálculo do tempo de permanência estacionário foi fundamentado na densidade de probabilidade na região da barreira e na corrente de probabilidade na região de incidência, resultando em uma fórmula que incorpora parâmetros como energia e largura da barreira. Exploramos também o conceito de tempo de fase, crucial para compreender a relação entre a fase da função de onda e a distribuição de probabilidade, especialmente nas proximidades da barreira. Ambos os tempos analisados proporcionaram uma compreensão mais profunda do comportamento quântico quando uma partícula se depara com uma barreira, desvelando perspectivas valiosas sobre a natureza intrincada do fenômeno de tunelamento.

Nossa investigação das obras referenciadas ofereceu uma visão mais detalhada dos desafios envolvendo a estimativa do tempo de tunelamento quântico. Deliberamos sobre diversos aspectos, como a natureza do tempo na mecânica quântica, a falta de consenso sobre seu significado e as possíveis abordagens para testar teorias alternativas, incluindo a medição fraca.

Enquanto abordamos amplamente o tema do tempo de tunelamento, este projeto também ilustrou de forma exemplar a relevância do efeito túnel em várias aplicações práticas. Desde o microscópio de varredura por tunelamento até a emissão de elétrons de metais frios, partículas alfa e processos de fusão nuclear, bem como em campos tão diversos quanto Medicina, Microeletrônica e Criptografia Quântica, o tunelamento quântico surge como um incentivo crucial para avanços

científicos e tecnológicos.

Em síntese, este projeto não apenas ofereceu um mergulho na análise de tunelamento quântico em barreira de potencial retangular, mas também serviu como uma ponte para transmitir a complexidade e a curiosidade do mundo quântico a um público amplo. Ao explorar as aplicações práticas desse fenômeno e suas ramificações multidisciplinares, evidenciamos como o entendimento e a manipulação do tunelamento quântico são impulsionadores fundamentais de inovações e progressos em diversos campos científicos e tecnológicos.

References

- 1 FERRAZ, J. et al. Cross sections for electron scattering by formaldehyde and pyrimidine in the low-and intermediate-energy ranges. *Physical Review A*, APS, v. 87, n. 3, p. 032–717, 2013.
- 2 CARSKY, P.; CURIK, R. *Low-energy electron scattering from molecules, biomolecules and surfaces*. [S.l.]: CRC Press, 2011.
- 3 BONIN, C. A. Tempos de tunelamento. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2007.
- 4 FIELD, G. E. On the status of quantum tunnelling time. *European Journal for Philosophy of Science*, Springer, v. 12, n. 4, p. 57, 2022.
- 5 SANTOS, C. R. d. G. P. et al. Análise do princípio básico de funcionamento do stm. Universidade Federal do Amapá, 2010.
- 6 DONANGELO, R. J.; CAPAZ, R. B. *Introdução à Mecânica Quântica*. [S.l.]: Fundação CECIERJ, 2009. v. 2.
- 7 GRIFFITHS, D. J.; FREITAS, L. *Mecânica quântica*. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2011.
- 8 JR, O. P. Conceitos de física quântica. *São Paulo: Livraria da Física*, 2003.
- 9 ATKINS, P.; PAULA, J. de; FRIEDMAN, R. *Quanta, Matéria e Mudança: Uma abordagem moléculas para a físico-química*. [S.l.]: Oxford University Press, 2009.