

# Física Quântica

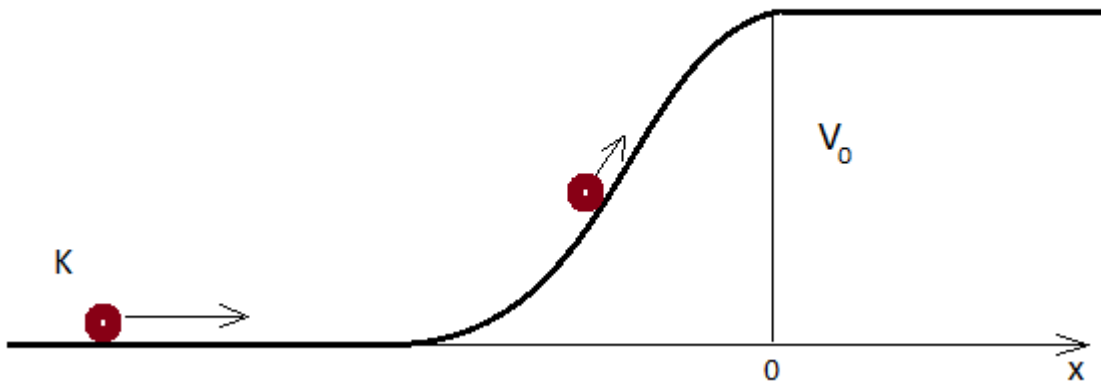
## Aula 13

### Reflexão, Transmissão de Ondas e Tunelamento

1 de outubro de 2016

- Notáveis efeitos quânticos notáveis ocorrem nos sistemas envolvendo barreiras de potencial.

Consideremos o problema de uma barreira de potencial com altura  $V_0 > 0$ .



Seja  $K$  a energia cinética inicial da partícula. De acordo com a mecânica clássica, se

$$K < V_0 \quad \implies \quad \textit{partícula não se encontrará em } x > 0 .$$

Ou seja, nessa situação, a partícula recua antes de alcançar a posição  $x = 0$ .

Com base em no conhecimento adquirido com a mecânica quântica é sabido que mesmo para  $K < V_0$  existe uma probabilidade não nula de se encontrar a partícula na região  $x > 0$  em algum momento. Nesse caso a função distribuição de probabilidades decresce exponencialmente.

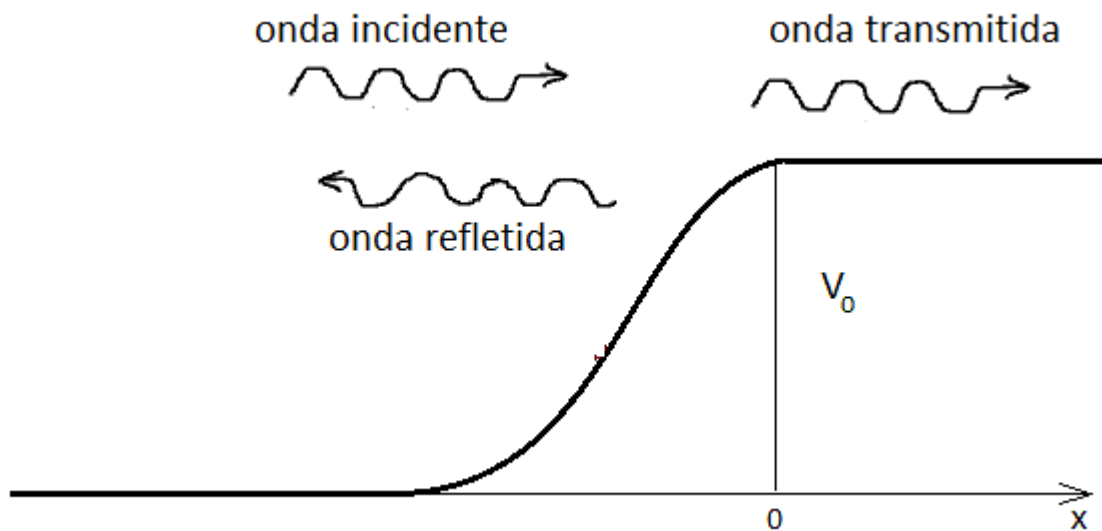
$$P(x) = |\psi(x)|^2 \sim e^{-2\kappa x}, \quad x > 0$$

Essa distribuição de probabilidades é obtida resolvendo a equação de Schrödinger.

Da mecânica clássica a condição estabelecida para a partícula ser encontrada na posição  $x > 0$  é

$$K > V_0 \quad \implies \quad \textit{partícula se encontrará em } x > 0$$

Porém, o comportamento ondulatório da partícula nos leva a questionar se não haveria possibilidade de reflexão.



De fato as soluções da equação de Schrödinger preveem a ocorrência desse fenômeno.

Se um feixe de partículas é direcionado à barreira haverá uma fração transmitida  $T$  e uma fração refletida  $R$ . Isso se dá em conformidade com a lei de conservação do fluxo

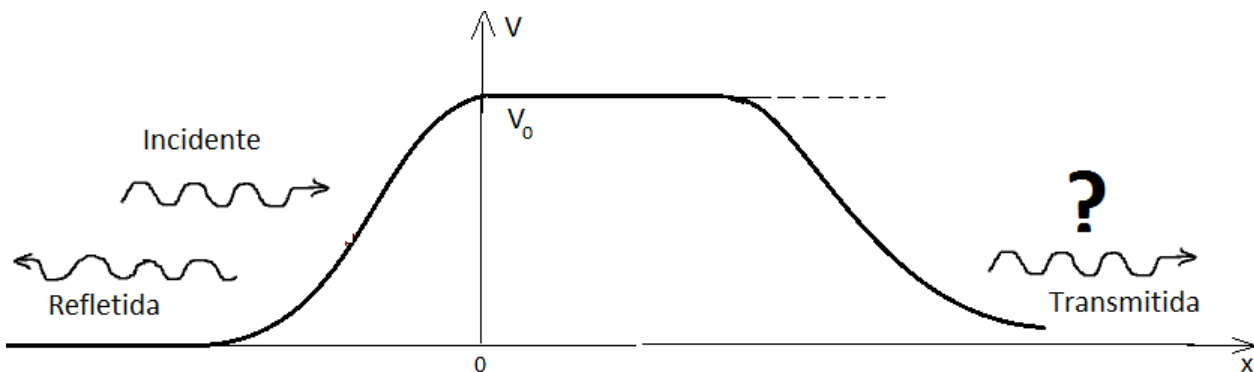
$$R + T = 1$$

$R$  e  $T$  são chamados de coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente. O que devemos esperar a respeito de  $R$  e  $T$  quando  $V_0$  cresce?

$$R \equiv R(E, V_0)$$

$$T \equiv T(E, V_0)$$

- Barreira de potencial com extensão finita.



Se nesse sistema a energia  $E$  das partículas incidentes for tal que  $E < V_0$  é possível ter um número não nulo de partículas que atravessam a barreira?

Novamente, o conhecimento acumulado até aqui nos leva a uma resposta positiva.

Isso porque nesse caso na região onde  $V = V_0$  é não nulo  $\psi(x)$  decresce exponencialmente, e esta função não é zero na região onde o potencial passa a ser zero. Por continuidade  $\psi(x)$  não será zero do outro lado da barreira onde  $V = 0$ . Esse fenômeno é o chamado *tunelamento*, ou efeito túnel.

Repare que seria possível controlar a corrente de partículas do outro lado da barreira variando a altura do potencial.

- Mais sobre as soluções oscilatórias da equação de Schrödinger.

Antes de prosseguir com a análise de sistemas envolvendo barreiras de potencial retornemos à questão do pacote de ondas. O problema a ser tratado aqui é o de partículas direcionadas a uma barreira de potencial. As partículas são consideradas livres antes e depois de atravessar a região onde se localiza a barreira de potencial.

Nas considerações que seguem as autofunções nas regiões de  $V = cte$ , com  $E - V > 0$ , serão tomadas como sendo ondas planas. De fato, tais ondas são soluções da equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (E - V) \psi(x), \quad E - V > 0$$

ou

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x), \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)}$$

Para  $V = cte$ , e  $E - V > 0$ , uma solução é

$$\psi(x) = A e^{ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)}$$

De acordo com nossas discussões anteriores isso corresponde a uma idealização onde  $|\psi(x)|^2$  tem largura infinita, i. e.,  $\Delta x = \infty$ , de modo que a incerteza

no momento é nula,  $\Delta p = 0$ . De fato, apenas o momento  $p = \hbar k$  esta presente em  $\psi(x)$  acima. Tal idealização é uma aproximação que pode ser compreendida da seguinte forma. Desconsideremos o efeito da dependência temporal (alargamento do pacote), e imaginemos que as partículas são preparadas de modo que a distribuição de momentos é estreita, sendo não nula somente em torno de uma pequena faixa de valores  $k_0$ .

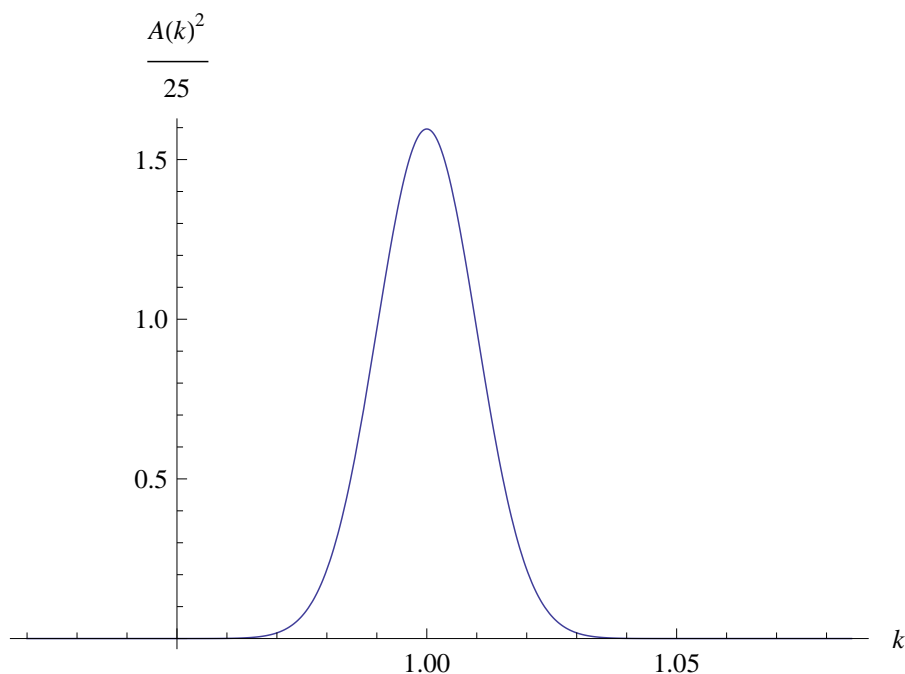


Figura 1:  $|A(k)|^2 = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{k-k_0}{0.01}\right)^2} / (0.01\sqrt{2\pi})$ , onde  $k_0 = 1$ . Normalização  $\frac{1}{25}$  introduzida para simples visualização.

Nessa distribuição a largura é

$$\Gamma = \sigma^2 = (0.01)^2$$

Conforme mais estreita a distribuição mais bem definido é o momento.

Sendo a função de onda escrita como a superposição

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k) [\cos(kx) + i \sin(kx)] dk\end{aligned}$$

Se de fato a função  $A(k)$  é não nula somente para uma faixa estreita de valores em torno de  $k_0$ , como ilustrado na figura abaixo,

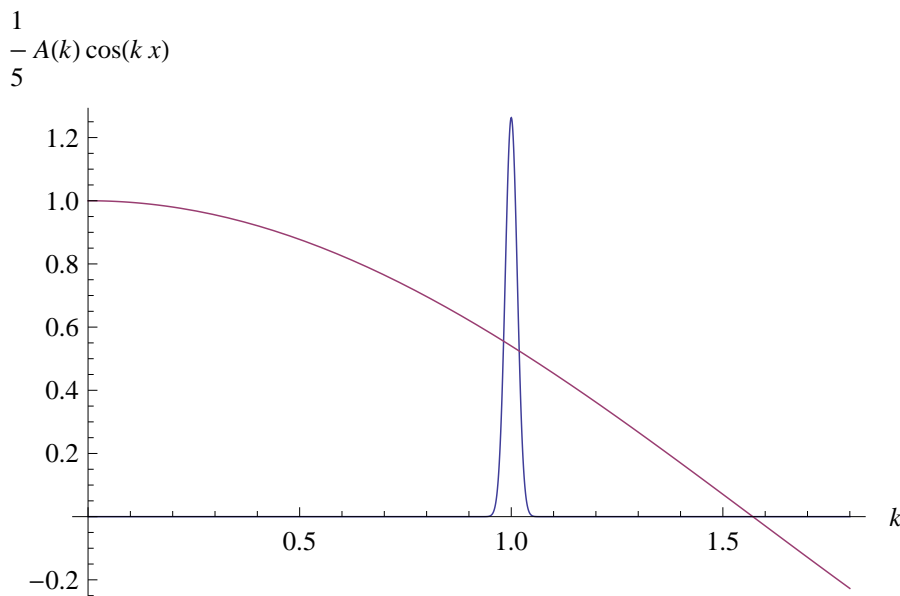
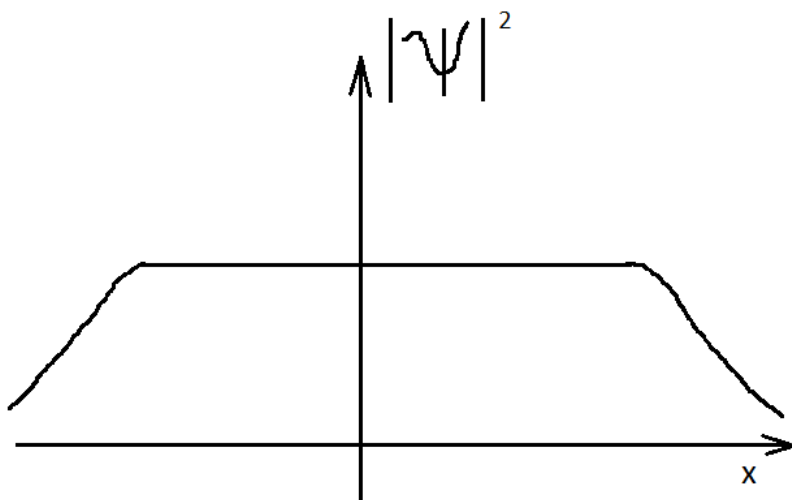


Figura 2: Nesse gráfico  $k_0 = 1$ . O fator  $\frac{1}{5}$  foi introduzido para simples visualização

o resultado da integral é aproximado por uma onda plana

$$\begin{aligned}\psi(x) &\approx \psi_{k_0}(x) = e^{ik_0x} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) dk \\ &= C e^{ik_0x}\end{aligned}$$

As larguras de  $|\mathcal{A}(k)|^2$  e  $|\psi(x)|^2$  são recíprocas. Um estado de momento bem definido leva a uma função distribuição de posição deslocalizada, i. e., bastante larga em  $x$  em comparação a  $|\mathcal{A}(k)|^2$ .

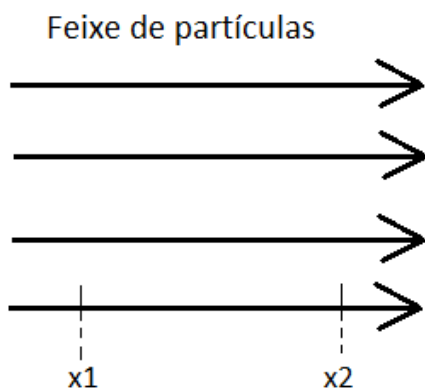


Observe que a onda plana idealizada  $\psi_{k_0}$  não é normalizável, i. e.,

$$|\psi_{k_0}(x)|^2 = C e^{ik_0x} \times C^* e^{-ik_0x} = |C|^2 = cte$$

Porém, como já discutimos, trata-se de uma idealização de um pacote muito largo em  $x$  e que serve para nossos propósitos.

Nosso objetivo agora é tratar de um feixe uniforme que tem  $N$  partículas livres entre  $x_1$  e  $x_2$ .





Assim, a normalização conveniente da função de onda nas situações a serem tratadas a seguir é

$$\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx = N$$

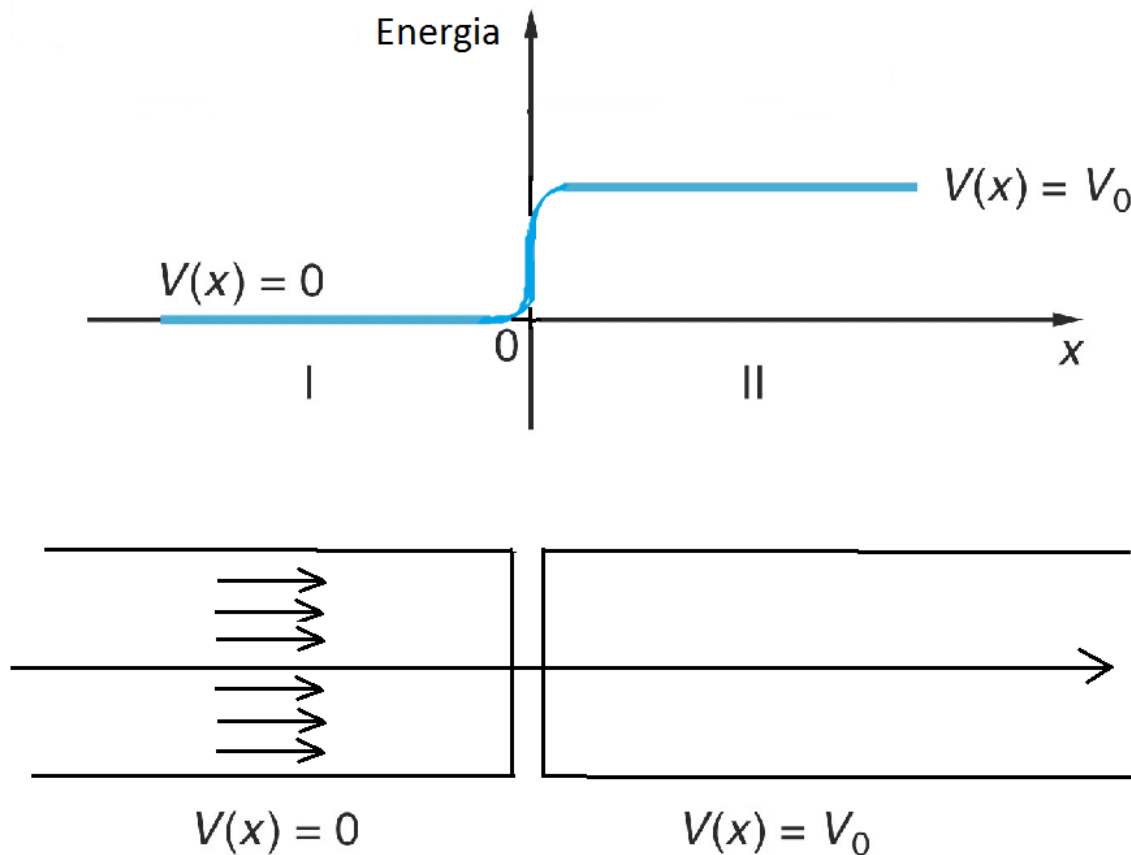
Dessa forma  $|\psi(x)|^2$  é agora interpretado, nessa situação, como densidade número de partículas, i. e.

$$\left[ |\psi(x)|^2 \right] = \frac{\# \text{ partículas}}{\text{unidade de comprimento}}$$

A seguir faremos uma avaliação quantitativa dos sistemas alguns sistemas que envolvem barreiras de potencial.

- Potencial degrau

Imaginemos um potencial com o perfil na figura abaixo, onde sua variação ocorre de maneira significativa somente num pequeno intervalo em torno de  $x = 0$ , sendo assim aproximadamente constante nos domínios  $I$  e  $II$



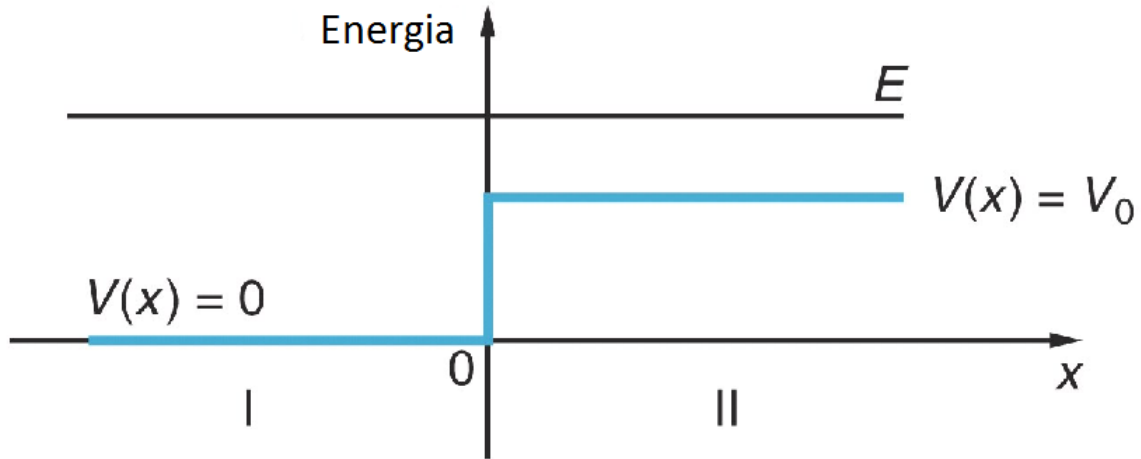
Esse potencial resulta em uma força impulsiva que atua somente num pequeno intervalo,  $-\delta \leq x \leq \delta$ . Fora desse intervalo o potencial nos domínios  $I$  e  $II$  é constante de modo que não há força resultante sobre a partícula.

$$F = -\frac{d}{dx}V = 0 \quad \text{para } x \text{ fora do intervalo}$$

Um exemplo onde isso é realizado é o de elétrons livres em um meio, e direcionados a outro meio que tem uma diferença de potencial em relação ao primeiro. A separação das regiões onde acontece a diferença de potencial pode ser pequena.

- Caso  $E > V_0$

O potencial idealizado do tipo degrau resulta em uma força impulsiva em  $x = 0$ , e é uma aproximação útil para fins práticos.



$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } x < 0 \\ V_0, & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

**Domínio I:** partícula vindo da esquerda tem energia cinética inicial igual a  $E$

$x < 0$ ,  $V = 0$  e a equação a ser resolvida é

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

ou

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_I(x) = -k_1^2 \psi_I(x), \quad k_1^2 = \frac{2m E}{\hbar^2}$$

Nesse caso é conveniente escrever solução geral de funções oscilatórias com

as formas exponenciais que representam onda incidente e onda refletida

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} \\ &= \psi_{inc}(x) + \psi_{ref}(x)\end{aligned}$$

A razão disso é porque ao se introduzir a dependência temporal multiplicando a autofunção pelo fator exponencial  $e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = e^{-i\omega t}$  para obter a função de onda

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

tem-se:

$$\Psi_{inc}(x, t) = A e^{ikx - i\omega t}, \quad \text{para a partícula que se move para a direita.}$$

$$\Psi_{ref}(x, t) = B e^{-ikx - i\omega t}, \quad \text{para a partícula que se move para a esquerda.}$$

Dessa forma existem dois tipos de onda na região  $I$ :

uma onda que se move para a direita com amplitude  $A$ ;

e, uma onda que se move para a esquerda com amplitude  $B$ .

**Domínio  $II$ :** partícula move-se para a direita com energia cinética  $K = E - V_0$

$x > 0$ ,  $V = V_0$  e a equação a ser resolvida é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) + V_0 \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x)$$

ou

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) = -k_2^2 \psi_{II}(x) , \quad k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Nesse caso é conveniente escrever solução geral de funções oscilatórias com as exponenciais

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= C e^{ik_2x} + D e^{-ik_2x} \\ &= C e^{ik_2x} \\ &= \psi_{tra}(x) \end{aligned}$$

No domínio  $II$  as partículas movem-se para a direita de modo que  $D = 0$ .

- Condições de contorno

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0)$$

Essas condições fornecem para

$$\psi_I(x) = A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x}$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{ik_2x}$$

o seguinte

$$A + B = C$$

$$k_1A - k_1B = k_2C$$

Disso resulta que

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A$$

$$C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A$$

A solução mostra que de fato há onda refletida, i. e.,  $B \neq 0$ .

Consideremos o feixe incidente constante e determinemos os coeficientes  $R$  e  $T$ . Em ambos os domínios,  $I$  e  $II$ , as funções de onda descrevem partículas livres. A energia é conservada nos processos de reflexão e transmissão. Portanto, as frequências das funções em  $I$  e  $II$  devem ser as mesmas

$$\begin{aligned}\Psi_{inc}(x, t) &= A e^{ik_1x - i\omega t} \\ \Psi_{ref}(x, t) &= B e^{-ik_1x - i\omega t} \\ \Psi_{tra}(x, t) &= C e^{ik_2x - i\omega t}\end{aligned}$$

A partir da equação de Schrödinger deduz-se uma lei de conservação dada por

$$\frac{\partial}{\partial x} j + \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0$$

onde

$$\begin{aligned}j &= -i \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right) \\ \rho &= \Psi^* \Psi\end{aligned}$$

Vejamos quanto vale  $j$  no domínio  $II$ .

$$\begin{aligned}j_{II}(x) &= -i \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi_{II}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{II} - \Psi_{II} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{II}^* \right) \\ &= \frac{\hbar k_2}{m} |\Psi_{II}|^2 \\ &= \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2\end{aligned}$$

Isso é uma velocidade vezes um fator que é o número de partículas por unidade de comprimento ( $[|C|^2] = [\Psi^* \Psi] = \# \text{partículas/uni. comprimento}$ ) e, portanto,

$$[j] = \frac{[l]}{[t]} \times \frac{\#partículas}{[l]} = \#partículas/seg.$$

A interpretação de  $j$  é, portanto, a de um fluxo de partículas em  $x$ . De fato,  $j_{II}$  é o fluxo de partículas que atravessa  $x = 0$ .

Consideremos a integral pela fronteira  $x = 0$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x} j dx = - \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial t} \rho dx$$

$$j_{II}(\varepsilon) - j_I(-\varepsilon) = \frac{d}{dt} \left[ \int_{-\varepsilon}^0 |\Psi_I|^2 dx + \int_0^{+\varepsilon} |\Psi_{II}|^2 dx \right]$$

Do lado direito as quantidades entre colchetes independe do tempo. Portanto, tomando  $\varepsilon \rightarrow 0$

$$j_I(0) = j_{II}(0)$$

Agora, sendo

$$\Psi_I(x) = \Psi_{inc}(x) + \Psi_{ref}(x)$$

tem-se que



$$\begin{aligned}
j_I(x) &= -i \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi_I^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_I - c.c. \right) \\
&= -i \frac{\hbar}{2m} \left[ \left( \Psi_{inc}^* + \Psi_{ref}^* \right) \frac{\partial}{\partial x} (\Psi_{inc} + \Psi_{ref}) - c.c. \right] \\
&= -i \frac{\hbar}{2m} \left[ \Psi_{inc}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{inc} + \Psi_{ref}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{ref} - c.c. \right] \\
&= j_{inc}(x) + j_{ref}(x)
\end{aligned}$$

onde definimos as correntes incidente,  $j_{inc}(x)$ , e refletida,  $j_{ref}(x)$ , como

$$\begin{aligned}
j_{inc}(x) &= -i \frac{\hbar}{2m} \left[ \Psi_{inc}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{inc} - c.c. \right] \\
&= \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 > 0
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
j_{ref}(x) &= -i \frac{\hbar}{2m} \left[ \Psi_{ref}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{ref} - c.c. \right] \\
&= -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 < 0
\end{aligned}$$

Repare que  $j_{ref}(x) < 0$  em razão da onda refletida ter momento com sinal negativo.

Sendo  $j_{II}(x) \equiv j_{tra}(x)$  a corrente transmitida e usando o resultado

$$\begin{aligned}
 j_I(0) &= j_{II}(0) \\
 j_{inc}(0) + j_{ref}(0) &= j_{tra}(0)
 \end{aligned}$$

temos da lei de conservação

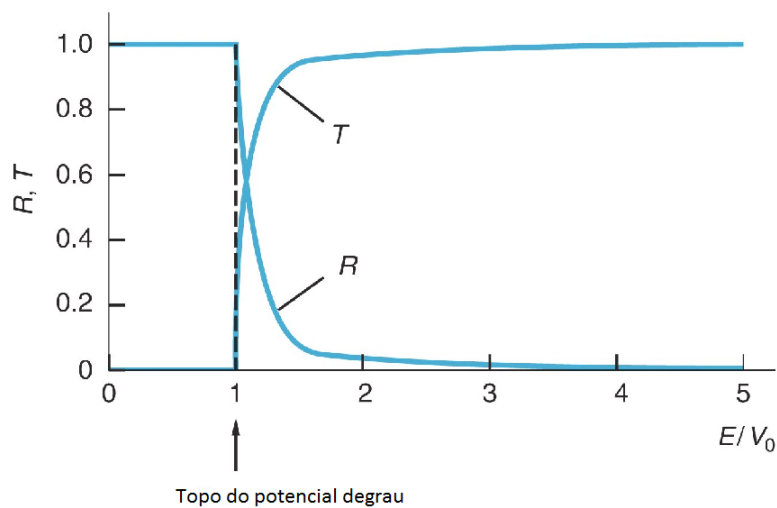
$$\begin{aligned}
 j_{inc}(0) &= -j_{ref}(0) + j_{tra}(0) \\
 \implies 1 &= -\frac{j_{ref}(0)}{j_{inc}(0)} + \frac{j_{tra}(0)}{j_{inc}(0)} \\
 &= \frac{|j_{ref}(0)|}{|j_{inc}(0)|} + \frac{|j_{tra}(0)|}{|j_{inc}(0)|} \\
 &= R + T
 \end{aligned}$$

onde usamos o fato que  $-j_{ref}(0) = |j_{ref}(0)|$ . E os coeficientes de reflexão e transmissão são definidos com as razões

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{|j_{ref}(0)|}{|j_{inc}(0)|} = \frac{\left| -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \right|}{\left| \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \right|} \\
 &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2
 \end{aligned}$$

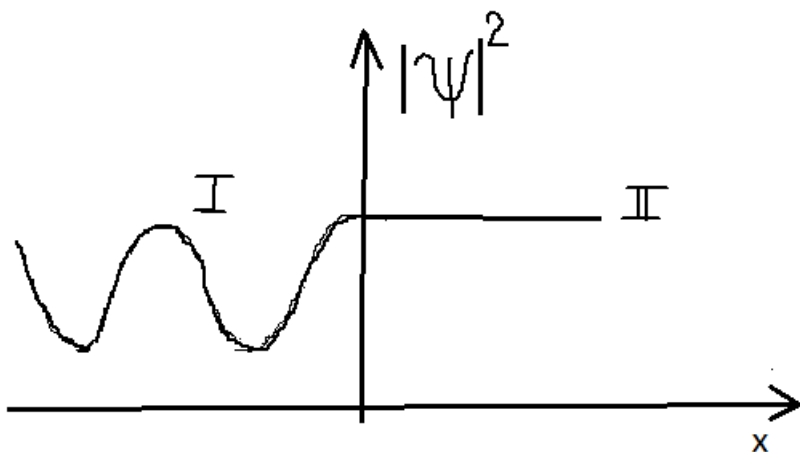
$$\begin{aligned}
 T &= \frac{|j_{tra}(0)|}{|j_{inc}(0)|} = \frac{\left| \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \right|}{\left| \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \right|} \\
 &= \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}
 \end{aligned}$$

A medida que  $E$  cresce  $k_2 \rightarrow k_1$  e o coeficiente  $R$  vai a zero

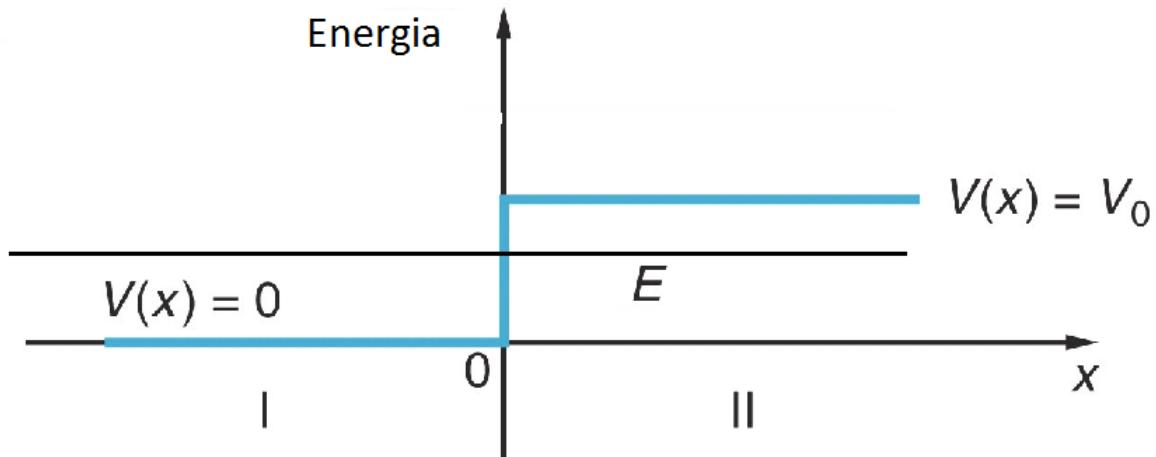


Em suma, os coeficientes  $R$  e  $T$  dão as probabilidades de que uma partícula de energia  $E > V_0$  seja refletida ou transmitida.

A função distribuição tem nesse caso a forma na figura abaixo. Note que no domínio  $I$  a função  $|\Psi|^2$  oscila acima do valor zero devido ao fato das amplitudes da onda incidente e da onda refletida serem diferentes.



- Caso  $E < V_0$



A diferença agora é que no domínio  $II$  a equação de Schrödinger é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) + V_0 \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x),$$

ou

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) = \kappa_2^2 \psi_{II}(x), \quad \kappa_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar},$$

onde o fator que multiplica  $\psi_{II}(x)$  do lado direito na equação diferencial acima é positivo. Com isso a solução geral é

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\kappa_2 x} + D e^{\kappa_2 x}$$

A condição de convergência  $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi_{II}(x) = 0$  implica que  $D = 0$ . Assim, autofunção decresce exponencialmente.

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\kappa_2 x}$$

O coeficiente de transmissão é nulo nesse caso pois

$$\begin{aligned}
 j_{II}(x) &= j_{tra}(x) = -i \frac{\hbar}{2m} \left( \Psi_{II}^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{II} - \Psi_{II} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{II}^* \right) \\
 &= -i \frac{\hbar}{2m} \left( C^* e^{-\kappa_2 x} \frac{\partial}{\partial x} (C e^{-\kappa_2 x}) - C e^{-\kappa_2 x} \frac{\partial}{\partial x} (C^* e^{-\kappa_2 x}) \right) \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

de modo que

$$T = \frac{j_{tra}(0)}{j_{inc}(0)} = 0$$

Conseqüentemente, o coeficiente de reflexão é um, e a reflexão é total. De fato,

$$\begin{aligned}
 j_I(0) &= j_{II}(0) \\
 j_{inc}(0) - j_{ref}(0) &= j_{tra}(0) = 0 \\
 \Rightarrow j_{inc}(0) &= j_{ref}(0)
 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$R = \frac{j_{ref}(0)}{j_{inc}(0)} = 1$$

A solução no domínio  $I$  tem a mesma forma que no caso anterior, e, assim

$$\psi_I(x) = A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x}$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\kappa_2x}$$

As condições de contorno

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0)$$

agora fornecem

$$A + B = C$$

$$ik_1(A - B) = -\kappa_2C \Rightarrow A - B = i\frac{\kappa_2}{k_1}C$$

Essas duas relações permitem escrever  $A$  e  $B$  em termos de  $C$

$$A = \frac{C}{2} \left( 1 + i \frac{\kappa_2}{k_1} \right)$$

$$B = \frac{C}{2} \left( 1 - i \frac{\kappa_2}{k_1} \right)$$

Assim, a autofunção em termos da constante  $C$  é, portanto,

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{2} \left( 1 + i \frac{\kappa_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} + \frac{C}{2} \left( 1 - i \frac{\kappa_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x}, & x \leq 0 \\ C e^{-\kappa_2x}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Com a multiplicação de  $\psi(x)$  pelo fator  $e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = e^{-i\omega t}$  tem-se a função de onda  $\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

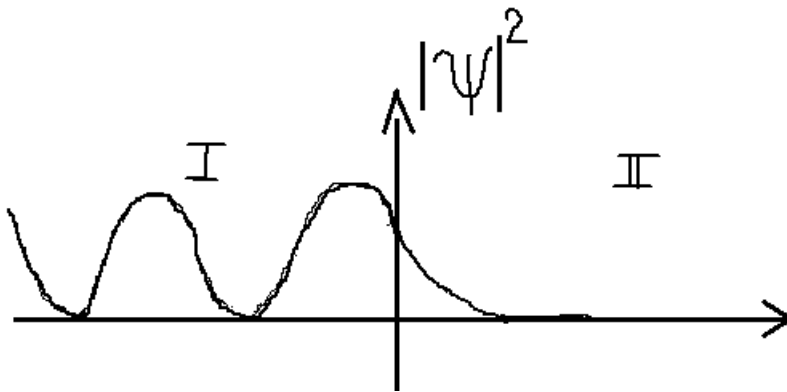
$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\omega t} = \begin{cases} \frac{C}{2} \left( 1 + i \frac{\kappa_2}{k_1} \right) e^{ik_1x - i\omega t} + \frac{C}{2} \left( 1 - i \frac{\kappa_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x - i\omega t}, \\ C e^{-\kappa_2x - i\omega t}, & x \geq 0 \end{cases}$$

Observe que para  $x \leq 0$

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{C}{2} \left(1 + i\frac{\kappa_2}{k_1}\right) e^{ik_1x} + \frac{C}{2} \left(1 - i\frac{\kappa_2}{k_1}\right) e^{-ik_1x} \\
&= \frac{C}{2} \left(1 + i\frac{\kappa_2}{k_1}\right) (\cos(k_1x) + i\sin(k_1x)) \\
&\quad + \frac{C}{2} \left(1 - i\frac{\kappa_2}{k_1}\right) (\cos(k_1x) - i\sin(k_1x)) \\
&= C \cos(k_1x) - C \frac{\kappa_2}{k_1} \sin(k_1x)
\end{aligned}$$

Com isso a função distribuição é

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)| = \begin{cases} |C|^2 \left(\cos(k_1x) - \frac{\kappa_2}{k_1} \sin(k_1x)\right)^2, & x \leq 0 \\ |C|^2 e^{-2\kappa_2x}, & x \geq 0 \end{cases}$$



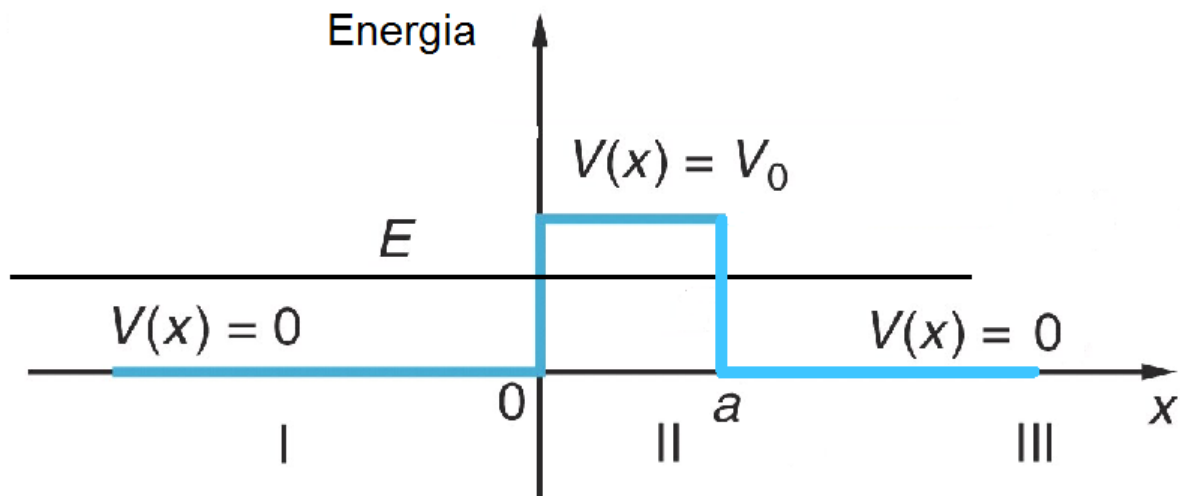
Como a função de onda é não nula em  $x > 0$  há uma probabilidade não nula de se encontrar a partícula nessa região que seria proibida pela mecânica clássica.

$$\begin{aligned}
\Delta x &\approx \frac{1}{\kappa_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \\
\Rightarrow \Delta p &\approx \frac{\hbar}{\Delta x} = \sqrt{2m(V_0 - E)}
\end{aligned}$$



- Tunelamento

Consideremos agora o problema da barreira de potencial



$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } x < 0 \\ V_0 & \text{para } 0 \leq x < a, \text{ e} \\ 0 & \text{para } x \geq a \end{cases}$$

Para um feixe inicial se movendo da esquerda para a direita. Com o que aprendemos até aqui já sabemos resolver esse problema. São agora três domínios.

- Caso  $E < V_0$

**Domínio I:**  $x < 0$ ,

$$\psi_I(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

onde

$$k_1^2 = \frac{2m E}{\hbar^2}$$

**Domínio II:**  $0 \leq x < a$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x) \\ &= \alpha^2 \psi(x) \end{aligned}$$

onde

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Repare que a solução nesse domínio é

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x}$$

Em razão do domínio ser finito  $D \neq 0$  não conduz a divergência.

**Domínio III:**  $x > 0$ ,

$$\psi_{III}(x) = F e^{ik_1 x}$$

Não incluímos na solução a função  $e^{-ik_1 x}$  porque o movimento é somente para

direita nesse domínio.

Em suma, temos as funções correspondentes em cada domínio

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} \\ \psi_{II}(x) &= C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x} \\ \psi_{III}(x) &= F e^{ik_1x}\end{aligned}$$

Condições de contorno:

Na fronteira entre os domínios  $I$  e  $II$ .

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0)$$

Essas condições fornecem

$$A + B = C + D$$

$$ik_1(A - B) = -\alpha(C - D)$$

Na fronteira entre os domínios *II* e *III*.

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx}(a) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(a)$$

Essas condições fornecem

$$C e^{-\alpha a} + D e^{\alpha a} = F e^{ik_1 a}$$

$$-\alpha \left( C e^{-\alpha a} - D e^{\alpha a} \right) = ik_1 F e^{ik_1 a}$$

Disso resulta que

$$D = \left( 1 + i \frac{k_1}{\alpha} \right) e^{(ik_1 - \alpha)a} \frac{F}{2}$$

$$C = \left( 1 - i \frac{k_1}{\alpha} \right) e^{(ik_1 + \alpha)a} \frac{F}{2}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} C + D &= \left( e^{-\alpha a} + e^{\alpha a} + i \frac{k_1}{\alpha} (e^{-\alpha a} - e^{\alpha a}) \right) e^{ik_1 a} \frac{F}{2} \\ &= \left( \cosh(\alpha a) - i \frac{k_1}{\alpha} \sinh(\alpha a) \right) e^{ik_1 a} F \end{aligned}$$

$$C - D = \left( \sinh(\alpha a) - i \frac{k_1}{\alpha} \cosh(\alpha a) \right) e^{ik_1 a} F$$

Assim,

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} \left( (C + D) - \frac{\alpha}{ik_1} (C - D) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( 2 \cosh(\alpha a) - \left( \frac{\alpha}{ik_1} + i \frac{k_1}{\alpha} \right) \sinh(\alpha a) \right) e^{ik_1 a} F \\ &= \left( \cosh(\alpha a) + \frac{i}{2} \left( \frac{\alpha}{k_1} - \frac{k_1}{\alpha} \right) \sinh(\alpha a) \right) e^{ik_1 a} F \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2} \left( (C + D) + \frac{\alpha}{ik_1} (C - D) \right) e^{ik_1 a} F \\ &= -\frac{i}{2} \left( \left( \frac{k_1}{\alpha} + \frac{\alpha}{k_1} \right) \sinh(\alpha a) \right) e^{ik_1 a} F \end{aligned}$$

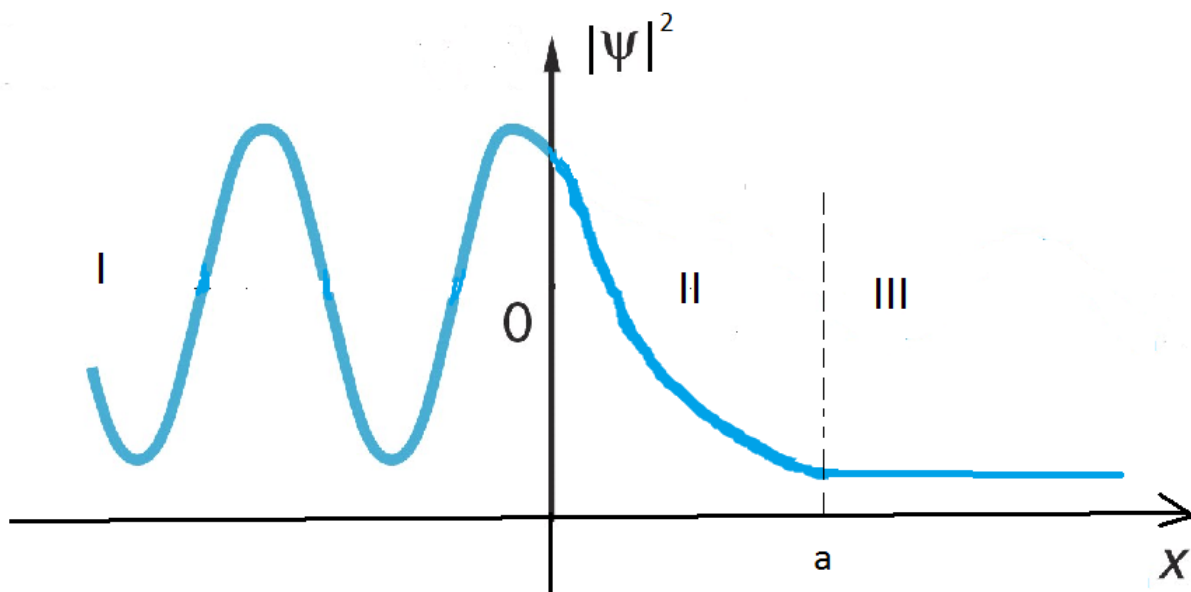
O coeficiente de transmissão é

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{j_{III}}{j_{inc.}} = \frac{|F|^2}{|A|^2} \\
 &= \left[ \cosh^2(\alpha a) + \frac{1}{4} \left( \frac{\alpha}{k_1} - \frac{k_1}{\alpha} \right)^2 \sinh^2(\alpha a) \right]^{-1} \\
 &= \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{\alpha}{k_1} + \frac{k_1}{\alpha} \right)^2 \sinh^2(\alpha a) \right]^{-1} \\
 &= \left[ 1 + \frac{\sinh^2(\alpha a)}{4 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}
 \end{aligned}$$

Onde as funções cosseno hiperbólico,  $\cosh(x)$ , e seno hiperbólico,  $\sinh(x)$ , são definidas como

$$\begin{aligned}
 \cosh(\alpha a) &= \frac{e^{\alpha a} + e^{-\alpha a}}{2} \\
 \sinh(\alpha a) &= \frac{e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}}{2}
 \end{aligned}$$

O perfil da função  $|\Psi|^2$  é nesse caso o seguinte.



### Desafio 1.

Determinar a solução da equação de Schrödinger para a partícula de massa  $m$  que se move inicialmente da esquerda para a direita e esta sujeita ao potencial

$$V = \begin{cases} 0, & \text{para } x < -a \quad (a > 0) \\ V_0 \left(1 + \frac{x}{a}\right) & \text{para } -a \leq x < 0, \text{ e} \\ V_0 & \text{para } x \geq 0 \end{cases}$$

tanto para  $E < V_0$  como para  $E > V_0$ . Determine a distribuição de probabilidade de se encontrar a partícula em  $x > 0$  quando  $E < V_0$ .

### Desafio 2.

Use sua imaginação para construir um sistema diferente do que consideramos até aqui, e que seja factível de se encontrar a solução analítica, ou numérica, da equação de Schrödinger.