



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE FÍSICA

IVANILDO RUI BARBOSA

FORMALISMO DO OPERADOR TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO:
PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS

FORTALEZA

2021

IVANILDO RUI BARBOSA

FORMALISMO DO OPERADOR TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO:
PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

Coorientador: Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga.

FORTALEZA
2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

B197f Barbosa, Ivanildo Rui.

Formalismo do Operador Translação Dependente da Posição: Problemas Unidimensionais / Ivanildo Rui Barbosa. – 2021.
56 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2021.

Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

1. problemas unidimensionais. 2. Métrica. 3. operador de translação dependente da posição. 4. equação de Schrödinger modificada. I. Título.

CDD 530

IVANILDO RUI BARBOSA

FORMALISMO DO OPERADOR TRANSLAÇÃO DEPENDENTE DA POSIÇÃO:
PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 16/08/2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Philipe Macedo Braga (Coorientador)
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia
Afro-Brasileira (UNILAB)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Aos Meus Pais, Rui e Anita, e aos meus irmãos,
Nelson, Ivete, Caetano, Desejado, Aurizanda,
Namir e Carina.

AGRADECIMENTOS

A Deus pelo dom de vida e sabedoria.

Aos meus pais, Rui António Barbosa e Anita da Conceição Sanca, pelos inúmeros conselhos de coragem e determinação.

Aos meus irmãos, que apesar da distância me deram sempre força e carinho.

À minha falecida tia Mamãe da Silva, que não teve oportunidade de presenciar e colher o fruto da árvore que ajudou a fazer crescer.

Aos meus amigos irmãos Edson, Quintino, Tchungana, Fernando, Daisy, Midana, Adriano, Aladje e Rudilson, que foram amorosos e contribuíram de forma significativa na construção deste trabalho.

Ao meu orientador, Prof.^a Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho, pela atenção e dedicação na construção deste trabalho.

Ao meu coorientador e amigo, Prof.^a Dr. João Philipe Macedo Braga, por estar sempre disponível e disposto para discussão conceitos físicos e na elaboração desta pesquisa. Meu muito obrigado por muitos ensinamentos e apoios incondicionais desde graduação até aqui.

Aos Professores da banca, Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa e Prof. Dr. Jeanlex Soares de Sousa, muito obrigado pelos conselhos e pelas correções feitas.

À todos os meus professores, começando no ensino primário até aos professores de Pós-Graduação, obrigado pela contribuição na minha conquista.

Aos funcionários da limpeza, da secretaria, especialmente, para Rejane, que nunca perdeu a paciência por tantas incomodações.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Obrigado pela concessão da bolsa durante todo esse período do curso.

Ao estado do Ceará, que durante estes setes anos foi meu lar e minha proteção, meu muito obrigado e respeito.

“Não leve essa aula muito a sério... apenas relaxe e desfrute dela. Vou contar para vocês como a natureza se comporta. Se você admitir simplesmente que ela tem esse comportamento, você a considerará encantadora e cativante. Não fique dizendo para você mesmo “Mas como ela pode ser assim?” porque nesse caso você entrará em um beco sem saída do qual ninguém escapou ainda. Ninguém sabe como a natureza pode ser assim”.

Richard Feynman (1918-1988)

RESUMO

No presente trabalho, estudamos o formalismo do operador translação dependente da posição (PDTO), um formalismo obtido ao tentar entender quais são as consequências da métrica do espaço na mecânica quântica (MQ). Em vista disso, foram usadas dois tipos de métricas, uma quadrática e outra linear, através das quais foram definidos dois operadores de translação de comprimento dx , denominados de operadores de translação infinitesimal quadrática $T_{\gamma\beta}(dx)$, e linear $T_{\gamma}(dx)$, que ao atuar no estado $|x\rangle$ leva-o para outro estado $|x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx\rangle$ e $|x + dx + \gamma x dx\rangle$, respectivamente. Foi possível observar que os resultados dessas translações dependem das métricas, pois nos levam a obtenção de dois novos operadores de momento, $\hat{P}_{\gamma\beta}$ e \hat{P}_{γ} , que conseqüentemente nos dão novas relações de comutação entre estes operadores momento e posição, e duas equações de Schrödinger modificadas. Por fim, as duas equações de Schrödinger modificadas foram aplicadas em diversos problemas unidimensionais da MQ. Ao analisar os resultados obtidos através da métrica quadrática, observamos que quando eles independem do parâmetro β são iguais obtidos pela métrica linear, e também quando o parâmetro γ tende a zero na métrica linear recuperamos os resultados usuais da MQ.

Palavras-chave: problemas unidimensionais; Métrica; operador de translação dependente da posição; equação de Schrödinger modificada.

ABSTRACT

In the present work, we study the formalism of the position-dependent translation operator (PDTO), a formalism obtained by trying to understand the consequences of space metrics in quantum mechanics (QM). In view of this, two types of metrics were used, one quadratic and the other linear, through which two translation operators of length dx were defined, called quadratic infinitesimal translation operators $T_{\gamma\beta}(dx)$, and linear $T_{\gamma}(dx)$, which when acting in the state $|x\rangle$ takes it to another state $|x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx\rangle$ and $|x + dx + \gamma x dx\rangle$, respectively. It was possible to observe that the results of these translations depend on the metrics, as they lead us to obtain two new moment operators, $\hat{P}_{\gamma\beta}$ and \hat{P}_{γ} , which consequently give us new switching relations between these moment and position operators, and two modified Schrödinger equations. Finally, the two modified Schrödinger equations were applied to several one-dimensional MQ problems. When analyzing the results obtained through the quadratic metric, we observe that when they are independent of the parameter β they are equal obtained by the linear metric, and also when the parameter γ tends to zero in the linear metric, we retrieve the usual results of the MQ.

Keywords: one-dimensional problems; Metrics; position dependent translation operator; modified Schrödinger equation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Comprimento do arco para métrica quadrática, com a condição $2 \beta > \gamma $, para os pares, $\gamma = 4$ e $\beta = 2.5$; $\gamma = 4$ e $\beta = 3$; $\gamma = 2$ e $\beta = 3$; $\gamma = -4$ e $\beta = -2.5$	18
Figura 2 – Comprimento do arco para métrica quadrática, com a condição $ \gamma > 2 \beta $, para os pares, $\gamma = 2$ e $\beta = 0$; $\gamma = 2$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2.5$ e $\beta = 0.5$	19
Figura 3 – Incerteza mínima nos momento quando consideramos $\langle x \rangle = 0$. A região sombreada representa os estados proibidos para métrica considerada [5].	24
Figura 4 – Níveis de energia de uma partícula confinada em um poço quadrado infinito para os pares $\gamma = 2$ e $\beta = 0$; $\gamma = 2$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2.5$ e $\beta = 0.5$	30
Figura 5 – Níveis de energia de uma partícula confinada em um poço quadrado infinito para os primeiros estados $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$	32
Figura 6 – A parte de cima representa a probabilidade de reflexão e a parte de baixo representa a probabilidade de transmissão para os pares $\gamma = 2$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2.5$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2$ e $\beta = 0.6$. Também representa a soma destas duas probabilidades.	36
Figura 7 – A parte de cima representa a probabilidade de reflexão e a parte de baixo representa a probabilidade de transmissão para os seguintes γ : 2, 2.5 e 3. A soma destas duas probabilidades é sempre 1.	39
Figura 8 – Gráfico da equação (3.69) em função de ka/π para caso quadrática, onde $\rho = \pi/2$. As linhas horizontais representam os limites ∓ 1 . As regiões de x , para quais a curva está fora da faixa, são proibidas.	42
Figura 9 – Gráfico da equação (3.78) em função de ka/π para caso linear, onde $\rho = \pi/2$. As linhas horizontais representam os limites ∓ 1 . As regiões de x , para quais a curva está fora da faixa, são proibidas.	43
Figura 10 – Gráfico da barreira de potencial com energia potencial V_0 definindo a altura e a distância a a largura da barreira.	44
Figura 11 – Gráfico de barreira de potencial para caso quadrático. Estado ligado ($E < V_0$) nas três regiões: duas externas, $-2/(\gamma + \alpha) < x < 0$ e $x > a$, e uma interna, $0 < x < a$	46
Figura 12 – Gráfico de barreira de potencial para caso quadrático. Estado de espalhamento ($E > V_0$) nas três regiões: duas externas, $-2/(\gamma + \alpha) < x < 0$ e $x > a$, e uma interna, $0 < x < a$	48

Figura 13 –Gráfico de barreira de potencial para caso linear. Estado ligado ($E < V_0$) nas três regiões: duas externas, $-\frac{1}{\gamma} < x < 0, x > a$, e uma interna, $0 < x < a$	50
Figura 14 –Gráfico de barreira de potencial para caso linear. Estado de espalhamento ($E > V_0$) nas três regiões: duas externas, $-\frac{1}{\gamma} < x < 0, x > a$, e uma interna, $0 < x < a$	51

LISTA DE SIGLAS

PDTO	Operador Translação Dependente da Posição
MQ	Mecânica Quântica
MC	Mecânica Clássica
MQNA	Mecânica Quântica Não-Aditiva
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

LISTA DE SÍMBOLOS

∂	Del ou Parcial
Ψ	Psi
$ x\rangle$	ket de x
$\langle x $	bra de x
$T(dx)$	Operador translação infinitesimal
\hat{P}	Operador momentum
$T_{\gamma\beta}(dx)$	Operador translação infinitesimal quadrático
$T_{\gamma}(dx)$	Operador translação infinitesimal linear
γ	Gama
β	Beta
$b_{\gamma\beta}$	Métrica quadrática
b_{γ}	Métrica linear
χ	Chi
ϕ	Fi
λ	Lambda
X	Operador posição
α	Alfa
δ	Delta
$[A, B]$	Comutação entre operador A e B
$\Delta\hat{P}$	Inceteza mínima no momentum quadrático
$\Delta\hat{P}$	Inceteza mínima no momentum linear
$D_{\gamma\beta}$	Derivada deformada no espaço
$H_{\gamma\beta}$	Hamiltoniano
E	Energia

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	FORMALISMO UNIDIMENSIONAL	17
2.1	Métricas e Comprimentos do Arco	17
2.2	Espaço de Hilbert e Vetores	19
2.3	Operador de Translação Modificado	21
2.4	Princípios das Incertezas e Incertezas Mínimas nos Momento	22
2.5	Operador Momentum no Espaço das Posições	24
2.6	Equações de Schrödinger Modificadas	26
3	APLICAÇÕES DO FORMALISMO	28
3.1	Poço quadrado infinito	28
3.1.1	<i>Caso quadrático</i>	28
3.1.2	<i>Caso linear</i>	30
3.2	Poço função delta	32
3.2.1	<i>Caso quadrático</i>	33
3.2.2	<i>Caso linear</i>	36
3.3	O modelo de Kronig-Penny	39
3.3.1	<i>Caso quadrático</i>	40
3.3.2	<i>Caso linear</i>	41
3.4	Barreira de potencial	44
3.4.1	<i>Caso quadrático</i>	44
3.4.2	<i>Caso linear</i>	48
4	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	53
	REFERÊNCIAS	55

1 INTRODUÇÃO

Desde tempos remotos, os seres humanos sempre queriam saber explicar as coisas que acontecem ao seu redor. A busca das explicações para estas inquietações levou a descobertas de muitas áreas de conhecimentos que conhecemos hoje. Tanto a Física como as suas subáreas não fugiram a esta regra, elas surgiram também na tentativa de explicar muitas indagações feitas ao longo dos séculos. Uma destas áreas é a *Mecânica Quântica* (MQ) que surgiu no início do século XX, precisamente na segunda metade da década de 1920, no qual conta com as contribuições dadas por grandes físicos, nomeadamente: Max Planck, Niels Bohr, Werner Heisenberg, Louis de Broglie, Erwin Schrödinger, Albert Einstein e outros [1–4]. Diferentemente da *Mecânica Quântica* que descreve o comportamento de corpos macroscópicos, a MQ descreve o comportamento fundamental dos sistemas físicos com as dimensões próximas ou abaixo da escala atômica (corpos microscópicos) [2, 5, 6].

Por exemplo, na MC para encontrar a posição $x(t)$ de uma partícula de massa m que se move sobre o eixo x sob ação de uma força dada por $\vec{F}(x, t)$, aplica-se a segunda lei de Newton, $\vec{F} = m\vec{a}$, para achá-la. Mas na MQ, para o mesmo problema, em vez de procurar a $x(t)$, busca-se a *função de onda*, $\Psi(x, t)$, dessa partícula resolvendo a *equação de Schrödinger* [7]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi. \quad (1.1)$$

Esta diferença deve-se ao fato de que na MC podemos obter posição (x), velocidade (v), momento (p) e potencial (V) de uma partícula simultaneamente, enquanto que na MQ o princípio da incerteza nos impede medir x e p simultaneamente, pois os sistemas físicos que ela estuda (usando a probabilidade) são de dimensões atômicas.

Usando o formalismo matemático de Dirac da MQ [5], que é o formalismo mais elegante e de fácil uso em comparação [8], por exemplo, com o de von Neumann¹ [9], o estado da partícula $\Psi(x, t)$ na equação (1.1) pode ser descrito matematicamente por um ket, $|\Psi(x, t)\rangle$, pertencente ao espaço dos estados, e qualquer grandeza física descrita por um operador que atua nesse estado deve ser hermitiano e possuir autovetores que formam uma base para o espaço dos estados [5]. Quando aplicamos este operador no seu estado, obtém-se um autovalor que será o único resultado possível e o autovetor associado ao autovalor medido representa o estado do sistema.

Neste trabalho, não foi seguido o formalismo feito por Sakurai [10], mas o conceito de deslocamento espacial não-aditivo definido por da Costa et al [11], em 2011, no qual mostra

¹Apresenta a mecânica quântica em uma representação uniforme e útil, matematicamente rigorosa. Este formalismo pode ser encontrado no *The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* [9].

que este conceito causa mudança nas relações de comutação entre posição e momento, como também na equação tipo equação de Schrödinger.

Em 2012, Mazharimousavi [12], acrescentou um termo a mão no operador momento do conceito de deslocamento espacial não-aditivo definido por da Costa et al [11]. No ano 2013, Costa et al [13] mostrou que o potencial de Morse emerge naturalmente da ação do operador deslocamento espacial não-aditivo. Também no mesmo ano, Rego-Monteiro e Nobre [14], fizeram aplicação do formalismo na Teoria de campo clássica para uma equação de Schrodinger não hermitiana com massas dependentes da posição.

Posteriormente, em 2015, na sua tese de doutorado, Braga [5] generalizou o formalismo para qualquer métrica $g(x)$. Em 2016, Costa et al [15] fez aplicação do formalismo no seu trabalho sob título "*Extended uncertainty from first principles*". Finalmente, Braga e Costa [16], mostraram que alguns problemas do formalismo PDTTO podem ser vistos como problema de Sturm-Liouville, em 2016.

Em 2020, El-Nabulsi publicou alguns trabalhos. No seu trabalho sob título "*A new approach to the schrodinger equation with position-dependent mass and its implications in quantum dots and semiconductors*" mostrou que abordagem PDTTO afeta apenas semicondutores com grande escala interatômica[17]. No seu outro trabalho [18], ele observou que, na dimensão radial de Hausdorff, a energia do estado fundamental da massa das partículas com metade do spin é aumentada, o que leva a um aumento da massa dos elétrons de acordo com observações teóricas recentes e dados experimentais. Finalmente, na referência [19], ele construiu um novo hamiltoniano de Schrödinger fracionário para um sistema quântico caracterizado por uma massa dependente da posição e um operador derivado espacial fracionário modificado.

Especificamente nessa dissertação, foi definido um novo operador de translação, $T_{\gamma\beta}(dx)$, chamado de *operador translação infinitesimal quadrático*, que ao atuar no estado $|x\rangle$ leva-o para $|x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx\rangle$. Esse é um caso particular do que foi feito no trabalho de Braga [5], onde foi considerado $g^{-1/2} = 1 + \gamma x + \beta^2 x^2$.

Foi possível observar que o resultado dessa translação depende da métrica, pois através dessa definição foi obtido um novo operador momentum, que denominamos de *operador momentum quadrático*, $\hat{P}_{\gamma\beta}$, que por meio dele conseguiu-se uma nova relação de comutação modificada entre os operadores de posição \hat{x} e do momentum quadrático, $\hat{P}_{\gamma\beta}$, e conseqüentemente, uma nova equação tipo Schrödinger chamada de *equação de Schrödinger modificada quadrática*².

Naturalmente, ao considerar o parâmetro β igual à zero, recuperam-se todas as

²É denominada equação de Schrödinger modificada quadrática, para diferenciar a equação que vem da métrica quadrática (denominada este nome porque contem o termo quadrático em x), da equação que vem da métrica linear. Mas na verdade, o Hamiltoniano e a equação continuam linear.

soluções obtidas no trabalho "Displacement Operator for Quantum Systems with Position-dependent Mass" do Costa et al [11]. A equação de Schrödinger obtida nesse artigo foi denominado nesta dissertação de *equação de Schrödinger modificada linear*³.

A partir das equações de Schrödinger modificadas (quadrática e linear), foram usadas mudanças de variáveis feitas por da Costa et al [20], que por meio das quais foram obtidas duas equações de Schrödinger mais simplificadas que foram usadas para resolver alguns problemas unidimensionais análogos aos encontrados com muita frequências nos livros didáticos da MQ. Os resultados obtidos neste formalismo coincidem com os resultados usuais da MQ quando γ e β ou tendem à zero no caso quadrático ou quando γ tende a zero no caso linear.

No próximo capítulo, revisitamos o Formalismo Unidimensional do Operador Translação Dependente da Posição (PDTO). Começamos com as definições das métricas quadrática e linear, que através dos quais foram obtidas duas equações Schrödinger modificadas (uma para caso quadrático outra para caso linear).

No terceiro capítulo, foram usadas estas equações Schrödinger modificadas para resolução de alguns problemas propostos, nos quais foram divididos em seções. Na primeira seção, discutimos o problema de poço quadrado infinito, e em seguida estudamos o poço função delta. Na terceira seção analisamos modelo de Kronig-Penny e finalmente na quarta e última seção abordamos o problema da barreira de potencial. Todos estes problemas foram resolvidos em dois casos: quadrático e linear.

Os casos lineares de poço quadrado infinito, poço função delta e Kronig-Penny podem ser encontrados nas referencias [11] e [20], respectivamente. Mas os casos quadráticos e o problema da barreira de potencial (para ambas os casos) só podem ser encontrados nesta dissertação.

³É denominada equação de Schrödinger modificada linear para referenciar que vem da linear.

2 FORMALISMO UNIDIMENSIONAL

Uma sequência de n números pode identificar uma localização no espaço n dimensional. Para que este espaço seja considerado unidimensional, n precisa ser igual a 1, ou seja, dentro desse espaço, é possível fazer os cálculos usando apenas uma única variável [21, 22].

Neste capítulo, usaremos apenas uma única variável (variável x), para o desenvolvimento do nosso formalismo. Para esta finalidade, começaremos com as definições das métricas, e a partir das quais obteremos equações de Schrödinger que usaremos no capítulo posterior na resolução de alguns problemas.

2.1 Métricas e Comprimentos do Arco

O objetivo deste capítulo é encontrar equações de Schrödinger em um espaço das funções unidimensionais em x , para métrica¹ quadrática [5],

$$g_{\gamma\beta}^{-1/2}(x) = 1 + \gamma x + \beta^2 x^2, \quad (2.1)$$

e para métrica linear [11]

$$g_{\gamma}^{-1/2}(x) = 1 + \gamma x. \quad (2.2)$$

Partindo da métrica quadrática, o quadrado da distância entre dois pontos infinitamente próximos, $P(x)$ e $P(x + dx)$ [5], é dado por

$$ds^2 = g_{\gamma\beta}^{-1/2}(x) dx^2, \quad (2.3)$$

então

$$ds = \frac{dx}{1 + \gamma x + \beta^2 x^2}. \quad (2.4)$$

Fazendo a integração nos dois lados da equação (2.4), e impondo a condição $2|\beta| > |\gamma|$, logo o *comprimento do arco* definido pela equação (2.1) fica

$$s(x) = \frac{2}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \arctan \left(\frac{2x\beta^2 + \gamma}{\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}} \right), \quad (2.5)$$

onde $-\infty \leq x \leq +\infty$.

A figura 1 ilustra o comportamento da equação (2.5), para alguns valores de γ e β . Nela, pode-se observar que aumentos dos parâmetros γ e β causam aumento e diminuição do comprimento de arco, respectivamente. Fisicamente, isso significa que o aumento do parâmetro

¹A métrica é uma generalização das quatro propriedades conhecidas da distância euclidiana. A métrica euclidiana define a distância entre dois pontos como o comprimento do segmento de reta que os conecta [23].

β confina a partícula, enquanto o parâmetro γ diminui o confinamento da partícula.

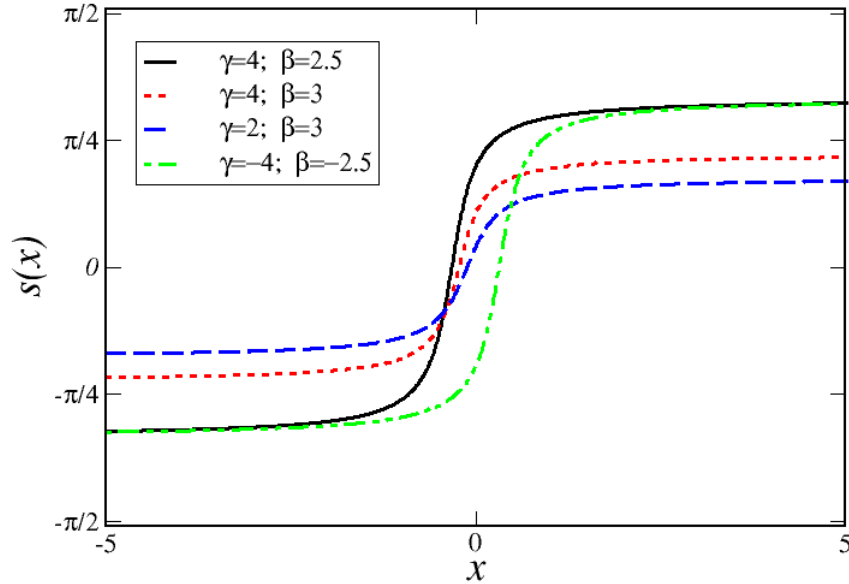


Figura 1 – Comprimento do arco para métrica quadrática, com a condição $2|\beta| > |\gamma|$, para os pares, $\gamma = 4$ e $\beta = 2.5$; $\gamma = 4$ e $\beta = 3$; $\gamma = 2$ e $\beta = 3$; $\gamma = -4$ e $\beta = -2.5$.

Entretanto, pela mesma métrica quadrática, mas com a condição diferente da anterior, $|\gamma| > 2|\beta|$, a equação (2.4) nos leva à

$$s = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 - 4\beta^2}} \ln \left[\frac{2 + (\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\beta^2})x}{2 + (\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\beta^2})x} \right], \quad (2.6)$$

com o $x \geq 0$.

A equação (2.6) será a escolhida para o desenvolvimento do nosso formalismo em detrimento da equação (2.5), visto que a equação (2.5) não satisfaz a proposta inicial, que segundo a qual o parâmetro β deve-se anular antes que o parâmetro γ . Fisicamente, na equação (2.6), os aumentos dos parâmetros confinam a partícula, enquanto que na equação (2.5) só o aumento do parâmetro β a confina.

Na figura 2 está representada a equação (2.6) para alguns valores dos seus parâmetros, γ e β . Fica observável que os aumentos de ambos os parâmetros causam diminuição no comprimento do arco, em outras palavras, ambos confinam a partícula.

Ao fazer β indo a zero e γ diferente de zero na equação (2.6) obtemos o mesmo resultado obtido por Costa et al [24],

$$\chi = \frac{1}{\gamma} \ln(1 + \gamma x), \quad (2.7)$$

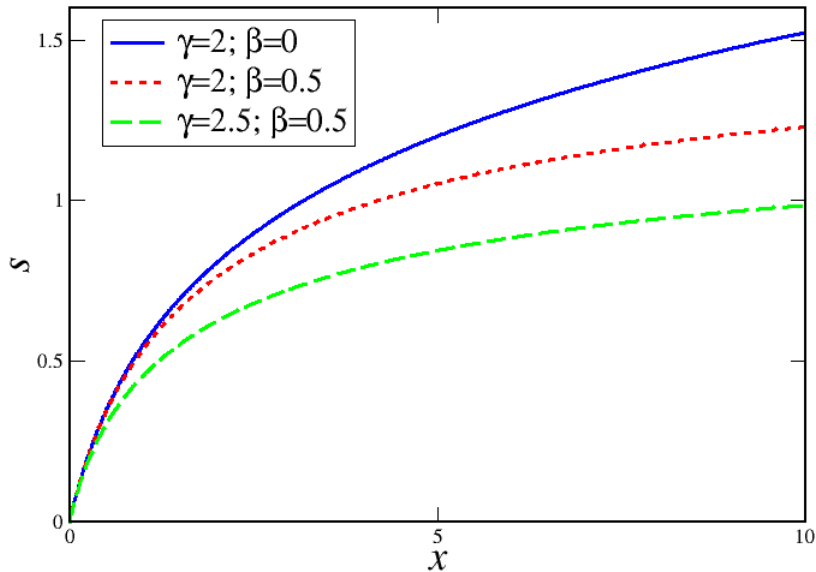


Figura 2 – Comprimento do arco para métrica quadrática, com a condição $|\gamma| > 2|\beta|$, para os pares, $\gamma = 2$ e $\beta = 0$; $\gamma = 2$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2.5$ e $\beta = 0.5$.

que também podia ser obtida usando a métrica linear.

2.2 Espaço de Hilbert e Vetores

O conjunto de todas as funções quadrados integráveis em um intervalo específico é denominado espaço de Hilbert. No nosso caso, o espaço das funções de onda definidas em um determinado intervalo $[5, 7]$, $a \leq x \leq b$, é constituído por todas as funções $\psi(x)$, tais que

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 \frac{dx}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)} = \int_a^b |\psi(x)|^2 ds < \infty. \quad (2.8)$$

O conjunto de todas as funções que satisfazem a equação (2.8) constituem um espaço vetorial. Então, o produto interno entre duas funções, $\phi(x)$ e $\psi(x)$, neste espaço é definido por

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \int_a^b \phi^*(x) \psi(x) ds. \quad (2.9)$$

Se $\phi(x)$ e $\psi(x)$ são quadrado-integráveis, o produto interno entre elas, vai sempre existir [7].

Da equação (2.9) segue-se as propriedades de um produto interno.

1. Simetria:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*. \quad (2.10)$$

2. Positividade, que é o produto interno entre uma função e ela própria:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_a^b |\psi(x)|^2 ds \geq 0, \quad (2.11)$$

que será sempre positivo e real, exceto quando $\psi(x) = 0$, neste caso o produto será zero.

3. Bilinearidade ou distributividade:

$$\langle \phi | (\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle, \quad (2.12)$$

$$(\langle \phi_1 | \lambda_1 + \langle \phi_2 | \lambda_2 \rangle | \psi \rangle) = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle, \quad (2.13)$$

onde λ_1 e λ_2 são autovalores associados aos autofunções ψ e ϕ , e λ_1^* e λ_2^* são seus conjugados.

Partindo da equação (2.11) e considerar que ψ difere de zero, podemos definir a **norma** de uma função como

$$\| \psi(x) \| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (2.14)$$

que será sempre real não-negativo e mostra a noção de comprimento [7].

Agora, imagina uma partícula bem localizada em um determinado ponto, e é descrita por um ket de posição $|x\rangle$ [5]. Ao atuar um operador de posição X neste estado teremos

$$X|x\rangle = x|x\rangle, \quad (2.15)$$

onde x é o autovalor do operador X^2 .

Considerando que $\phi^*(x) = \langle \phi | x \rangle$ e $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$, a equação (2.9) nos leva imediatamente a

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \langle \phi | x \rangle \langle x | \psi \rangle ds = \langle \phi | \left[\int |x\rangle \langle x| ds \right] | \psi \rangle,$$

então,

$$\int |x\rangle \langle x| ds = 1. \quad (2.16)$$

Esta equação é conhecida como **operador identidade** ou **relação da completeza**, ou simplesmente **relação de fechamento**.

Com este resultado, podemos agora escrever qualquer ket arbitrário, digamos $|\alpha\rangle$ se ele representa o um estado físico no espaço gerado pelo auto-estado de X [10], na base do operador identidade.

Portanto, a expansão de $|\alpha\rangle$ em termos de $|x'\rangle$ fica

$$|\alpha\rangle = \int |x\rangle \langle x' | \alpha \rangle ds, \quad (2.17)$$

²Nessa trabalho, vamos representar os operadores por letras maiúsculas e os autovalores vão ser representados por letras minúsculas.

ao passo que

$$\phi(x') = \langle x' | \phi \rangle = \int \langle x' | x \rangle \langle x | \phi \rangle ds = \int \langle x' | x \rangle \phi(x) ds. \quad (2.18)$$

No entanto, ao comparar a equação (2.18) com a propriedade de Delta de Dirac

$$\int_a^b f(x) \delta(x-a) dx = f(a), \quad (2.19)$$

é perceptível que

$$\langle x' | x \rangle = (1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \delta(x - x'), \quad (2.20)$$

no qual chamamos de *produto escalar* entre os autovetores dos operadores posição para métrica quadrática.

Para métrica linear é só fazer $\beta \rightarrow 0$, este produto escalar entre os autovetores do operador posição se reduz à

$$\langle x' | x \rangle = (1 + \gamma x) \delta(x - x'). \quad (2.21)$$

que é o mesmo resultado obtido por Braga [5].

2.3 Operador de Translação Modificado

Daqui em diante, ou pelo menos, até final deste capítulo, seguiremos as ideias do Braga [5] intercalando com as de Costa Filho et al [11]. De acordo com o postulado de Braga, podemos escrever o operador de translação infinitesimal quadrática $T_{\gamma\beta}(dx)$ que atua em um estado $|x\rangle$ da seguinte forma:

$$T_{\gamma\beta}(dx) |x\rangle = |x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx\rangle, \quad (2.22)$$

e quando $\beta \rightarrow 0$ na equação (2.22) recuperamos a definição feita por Costa Filho et al [11],

$$T_{\gamma}(dx) |x\rangle = |x + dx + \gamma x dx\rangle, \quad (2.23)$$

ou ainda, se na equação (2.23) fizemos $\gamma \rightarrow 0$ voltaremos a translação usual [10],

$$T(dx) |x\rangle = |x + dx\rangle. \quad (2.24)$$

O estudo desses casos particulares será a elegância deste trabalho. Até o final deste trabalho vamos estar atentos a estes acontecimentos, pois sempre que γ tende a zero ou γ e β tendem simultaneamente a zero recuperaremos os resultados conhecidos em muitas bibliografias da MQ [7, 25].

Imagine agora duas translações infinitesimais sucessivas de dx' e dx'' . Suponha que primeiramente fizemos um deslocamento em dx' e em seguida em dx'' , no qual podem não ser

feitos na mesma direção [10]. Matematicamente

$$T_{\gamma\beta}(dx')T_{\gamma\beta}(dx'')|x\rangle = |y + dx' + \gamma y dx' + \beta^2 y^2 dx'\rangle,$$

onde $y = x + dx + \gamma x dx'' + \beta^2 x^2 dx''$. Esperamos que essa translação seja igual a uma única translação em $dx' + dx''$,

$$T_{\gamma\beta}(dx' + dx'')|x\rangle = |x + (dx' + dx'') + \gamma(dx' + dx'')x + \beta^2(dx' + dx'')x^2\rangle.$$

Então, podemos concluir que duas translações infinitesimais sucessivas de dx' e depois dx'' é diferente de uma única translação $dx' + dx''$,

$$T_{\gamma\beta}(dx')T_{\gamma\beta}(dx'') \neq T_{\gamma\beta}(dx' + dx''). \quad (2.25)$$

Isto mostra a não aditividade do operador translação infinitesimal quadrática $T_{\gamma\beta}(dx)$, aqui vem o nome da *mecânica quântica não-aditiva* (MQNA).

Por outro lado, se impusermos que quando $dx \rightarrow 0$, o operador de translação transformasse em um operador identidade,

$$\lim_{dx \rightarrow 0} T_{\gamma\beta}(dx) = 1. \quad (2.26)$$

2.4 Princípios das Incertezas e Incertezas Mínimas nos Momento

Para achar o Princípio da Incerteza e a Incerteza Mínima no Momento, primeiramente, temos que encontrar a relação de comutação entre operador $\hat{P}_{\gamma\beta}$ e operador \hat{x} .

Partindo da relação de comutação entre operador posição e operador de translação modificado quadrático

$$[\hat{x}, T_{\gamma\beta}(dx)]|x\rangle = \hat{x}T_{\gamma\beta}(dx)|x\rangle - T_{\gamma\beta}(dx)\hat{x}|x\rangle, \quad (2.27)$$

onde

$$\hat{x}T_{\gamma\beta}(dx)|x\rangle = (x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx)|x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx\rangle,$$

e

$$T_{\gamma\beta}(dx)\hat{x}|x\rangle = xT_{\gamma\beta}(dx)|x\rangle = x|x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx\rangle,$$

desse modo, temos

$$[\hat{x}, T_{\gamma\beta}(dx)]|x\rangle = dx(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)|x + dx + \gamma x dx + \beta^2 x^2 dx\rangle,$$

que pode ser aproximada com o erro da segunda ordem em dx' , por

$$[\hat{x}, T_{\gamma\beta}(dx)]|x\rangle \simeq dx(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)|x\rangle. \quad (2.28)$$

Porém, ao definir o operador translação infinitesimal quadrático em função do momento modificado quadrático como gerador de translação [10],

$$T_{\gamma\beta}(dx) \equiv 1 - \frac{i\hat{P}_{\gamma\beta}dx}{\hbar}, \quad (2.29)$$

e substituindo na equação (2.28) veremos que

$$[\hat{x}, \hat{P}_{\gamma\beta}] = i\hbar(1 + \gamma x + \beta^2 x^2), \quad (2.30)$$

denominada de *relação de comutação quadrática* entre operador posição e operador momentum quadrático. Observe que quando γ e depois β tendem à zero a relação de comutação quadrática entre operador posição e operador momentum quadrático se reduz a relação de comutação usual entre \hat{x} e \hat{P} .

Por conseguinte, com o uso do desvio padrão de x , o princípio da incerteza quadrática fica

$$\Delta x \Delta P_{\gamma\beta} \geq \frac{\hbar}{2} \left[1 + \gamma \langle x \rangle + \beta^2 \langle x \rangle^2 + \beta^2 (\Delta x)^2 \right]. \quad (2.31)$$

Agora, partindo da equação (2.31) podemos obter a incerteza mínima no operador momentum quadrático. Para tal, dividiremos ambos os lados da equação (2.31) por Δx

$$\Delta P_{\gamma\beta} \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \left[1 + \gamma \langle x \rangle + \beta^2 \langle x \rangle^2 + \beta^2 (\Delta x)^2 \right].$$

Derivando a equação anterior em relação Δx e depois igualado a zero, obteremos Δx_0^3 . Ao substituir o resultado de Δx_0 na equação (2.31) ficaremos com

$$\Delta P_{\gamma\beta(\min)} = \Delta P_{\gamma\beta}(\Delta x_0) = \hbar\beta \sqrt{1 + \gamma \langle x \rangle + \beta^2 \langle x \rangle^2}, \quad (2.32)$$

que é a incerteza mínima no operador momentum quadrático da partícula, e é sempre real e maior que zero quando β for diferente de zero.

Além disso, para $\beta \rightarrow 0$ e $\gamma \neq 0$, as equações (2.30) e (2.31) se transformam nas encontradas por Costa et al [11],

$$[\hat{x}, \hat{P}_{\gamma}] = i\hbar(1 + \gamma x), \quad (2.33)$$

e

$$\Delta x \Delta P_{\gamma} \geq \frac{\hbar}{2} [1 + \gamma \langle x \rangle]. \quad (2.34)$$

Podíamos também obter estas duas últimas equações usando as equações (2.7) e (2.23) ao invés das equações (2.6) e (2.22) e depois fazendo β indo para zero como fizemos.

Agora, para o estudo da incerteza mínima no operador momentum linear foi usado

³Valor de Δx que minimiza $\Delta P_{\gamma\beta}$.

o mesmo procedimento do caso quadrático, no qual obtemos

$$\Delta P_{\gamma(\min)} = \frac{\hbar}{2} \left[1 - \frac{1}{\langle x \rangle} \right] \frac{1}{\Delta x} = 0. \quad (2.35)$$

Diferente da incerteza mínima no operador momentum linear a incerteza mínima no operador momento quadrático é diferente de zero, isto se deve ao parâmetro quadrático β .

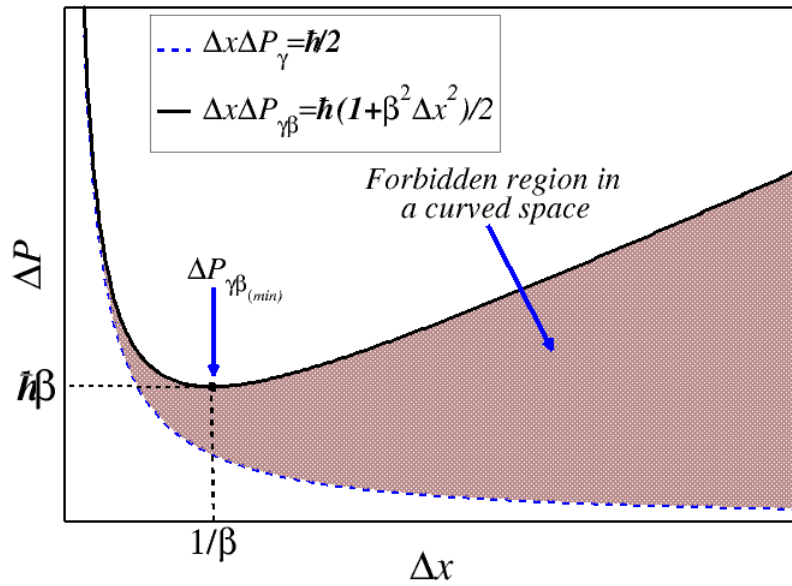


Figura 3 – Incerteza mínima nos momento quando consideramos $\langle x \rangle = 0$. A região sombreada representa os estados proibidos para métrica considerada [5].

Na figura 3, foram mostrados os princípios das incertezas para ambos os casos (quadrático e linear) e suas respectivas incertezas mínimas, quando consideramos $\langle x \rangle = 0$. Nesta figura é mostrado com clareza que só é possível ter incerteza mínima diferente de zero quando usamos a métrica quadrática.

2.5 Operador Momentum no Espaço das Posições

Nesta subseção, vamos avaliar como o operador $\hat{P}_{\gamma\beta}$ se comporta no espaço das posições. Para tal, aplicamos o operador translação infinitesimal quadrático no estado $|\psi\rangle$

$$T(\Delta x') |\psi\rangle = |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_{\gamma\beta}\Delta x'}{\hbar} |\psi\rangle, \quad (2.36)$$

e da relação da completeza temos

$$\int T(\Delta x') |x'\rangle \langle x' | \psi \rangle ds = |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_{\gamma\beta}\Delta x'}{\hbar} |\psi\rangle$$

$$\begin{aligned}
\int |x' + \Delta x'\rangle \langle x' | \psi \rangle ds &= |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_{\gamma\beta}\Delta x'}{\hbar} |\psi\rangle \\
\int |x'\rangle \langle x' - \Delta x' | \psi \rangle ds &= |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_{\gamma\beta}\Delta x'}{\hbar} |\psi\rangle \\
\int |x'\rangle [\langle x' | \psi \rangle - \Delta x' \frac{\partial}{\partial s} \langle x' | \psi \rangle] ds &= |\psi\rangle - \frac{i\hat{P}_{\gamma\beta}\Delta x'}{\hbar} |\psi\rangle.
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Aplicando $\langle x|$ nos dois lados da equação (2.37), observamos que

$$\int \langle x|x'\rangle \frac{\partial}{\partial s} \langle x' | \psi \rangle ds = \frac{i}{\hbar} \langle x|\hat{P}_{\gamma\beta}|\psi\rangle,$$

usando o produto escalar entre os autovetores dos operadores posição para métrica quadrática, equação (2.20), temos

$$\begin{aligned}
\int (1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \delta(x' - x) \frac{\partial}{\partial s} \langle x' | \psi \rangle \frac{dx'}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)} &= \frac{i}{\hbar} \langle x|\hat{P}_{\gamma\beta}|\psi\rangle \\
\frac{\partial}{\partial s} \langle x | \psi \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle x|\hat{P}_{\gamma\beta}|\psi\rangle \\
-i\hbar(1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \psi \rangle &= \langle x|\hat{P}_{\gamma\beta}|\psi\rangle,
\end{aligned}$$

no qual usamos $(1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial s}$. Portanto, podemos concluir que

$$\hat{P}_{\gamma\beta} |\psi\rangle = -i\hbar(1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \frac{d}{dx} |\psi\rangle = -i\hbar D_{\gamma\beta} |\psi\rangle, \tag{2.38}$$

onde

$$D_{\gamma\beta} = (1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \frac{d}{dx}, \tag{2.39}$$

sendo uma derivada deformada no espaço. Ao fazer $\beta \rightarrow 0$ e $\gamma \neq 0$ obtemos o mesmo resultado do Costa et al [11],

$$D_{\gamma} = (1 + \gamma x) \frac{d}{dx}. \tag{2.40}$$

Aplicando a relação de completeza na equação (2.38) chegamos a

$$\langle \phi | \hat{P}_{\gamma\beta} | \psi \rangle = \int \langle \phi | x \rangle \langle x | \hat{P}_{\gamma\beta} | \psi \rangle ds = -i\hbar \int \phi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx,$$

e da integração por parte temos

$$\langle \phi | \hat{P}_{\gamma\beta} | \psi \rangle = i\hbar \int \psi(x) \frac{d}{dx} \phi^*(x) dx = \left[\int \langle \phi | x \rangle \langle x | \hat{P}_{\gamma\beta} | \psi \rangle ds \right]^* = [\langle \psi | \hat{P}_{\gamma\beta} | \phi \rangle]^*. \tag{2.41}$$

Sendo assim, podemos concluir que o operador momentum quadrático é hermitiano no espaço de Hilbert com um peso definido pela equação (2.9), pois os operadores com estas propriedades, equação (2.41), são chamados hermitianos [7].

2.6 Equações de Schrödinger Modificadas

Sabe-se que a equação de Schrödinger dependendo do tempo no espaço das posições é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \Psi(x, t) \rangle = \langle x | H_{\gamma\beta} | \Psi(x, t) \rangle, \quad (2.42)$$

onde o $H_{\gamma\beta}$ é o Hamiltoniano do nosso formalismo, e é dado por

$$H_{\gamma\beta} = \frac{P_{\gamma\beta}^2}{2m} + V(x, t).$$

Desse modo, a equação de Schrödinger dependendo do tempo no espaço das posições fica

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) D_{\gamma\beta}^2 \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t). \quad (2.43)$$

Considerando que o potencial $V(x, t)$ é independente do tempo, então a equação (2.43), pode ser resolvida pelo método de separação de variáveis [7].

Escrevendo a função de onda da equação (2.43) na forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t). \quad (2.44)$$

Substituindo a equação (2.44) na equação (2.43)

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{1}{\psi(x)} D_{\gamma\beta}^2 \psi(x) + V(x). \quad (2.45)$$

Observa que o lado esquerdo da equação (2.45) só depende do tempo enquanto o lado direito só depende da posição, portanto, para que essa igualdade permaneça sempre verdadeira é preciso que ambos sejam iguais a uma constante, então

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = E \Rightarrow \phi = e^{-\frac{iEt}{\hbar}},$$

logo a equação (2.42) fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \frac{d}{dx} \left[(1 + \gamma x + \beta^2 x^2) \frac{d}{dx} \right] \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (2.46)$$

onde E é a energia da partícula, com a particularidade de quando $\gamma = \beta = 0$, recuperaremos a equação Schrödinger na forma usual. Mas se usarmos a equação (2.40), ao invés de (2.39), teríamos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (1 + \gamma x) \frac{d}{dx} \left[(1 + \gamma x) \frac{d}{dx} \right] \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (2.47)$$

que é o mesmo fazendo $\beta \rightarrow 0$ na equação (2.46).

Para que as duas últimas equações fiquem parecidas com as que estamos acostu-

mas a usar na MQ, usamos as definições feitas por da Costa et al [20]. Para equação (2.46) usamos $\phi(s) = \psi(x(s))$ e $U(s) = V(x(s))$, logo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(s)}{ds^2} + U(s)\phi(s) = E\phi(s), \quad (2.48)$$

que chamamos da *equação de Schrödinger modificada quadrática*. Para equação (2.47) usamos $\phi(\chi) = \psi(x(\chi))$ e $U(\chi) = V(x(\chi))$, neste caso temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(\chi)}{d\chi^2} + U(\chi)\phi(\chi) = E\phi(\chi), \quad (2.49)$$

na qual chamamos da *equação de Schrödinger modificada linear* que é a mesma encontrada por Costa et al [11], mas com as mudanças feitas por Da Costa et al [20].

Estas duas últimas equações (2.48) e (2.49), têm as mesmas estruturas da equação de Schrödinger tradicional, mas isso não significa que as soluções dos problemas vão ser as mesmas, porque as condições de contornos podem mudar, então isso altera as soluções e as propriedades do sistema.

As equações (2.48) e (2.49) serão usadas no próximo capítulo para resolver diversos problemas unidimensionais da mecânica quântica. Esses problemas serão divididos em seções, e no final de cada seção serão analisados os resultados obtidos, quando $\gamma = \beta = 0$, ou $\gamma = 0$, e comparados com os resultados já conhecidos em muitos livros da MQ.

3 APLICAÇÕES DO FORMALISMO

No presente capítulo, abordamos alguns problemas unidimensionais análogo aos que aparecem com frequência nos livros didáticos da MQ, no qual usamos o formalismo da MQNA, apresentado no capítulo anterior. Para estes problemas foram usadas equações de Schrödinger modificadas quadrática e linear, equações (2.48) e (2.49), respectivamente.

Para melhor didática, os problemas são divididos em seções. Na primeira seção, discutimos o poço quadrado infinito e, em seguida, estudamos o poço função delta. Na terceira seção, analisamos o modelo de Kronig-Penny e, finalmente, na quarta e última seção, abordamos o problema da barreira de potencial. Todos estes problemas foram resolvidos em dois casos: quadrática e linear.

3.1 Poço quadrado infinito

Poço quadrado infinito é um dos problemas mais populares da MQ e de simples resolução matemática. Ele consiste em uma partícula que se move livremente ao longo do eixo x , exceto nas posições $x = 0$ e $x = a$, onde existem paredes, com a energia potencial dada por

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.1)$$

Uma partícula confinada com este tipo de potencial tem tanto a função de onda como a probabilidade de encontrar a partícula fora do poço nula. Enquanto que dentro do poço a partícula move-se livremente, portanto a função de onda existe e é diferente de zero, mas o potencial é zero nesta região, $V = 0$ [7].

Para resolução deste problema, foram usadas as duas equações de Schrödinger modificadas, quadrática e linear.

3.1.1 Caso quadrático

No caso quadrático, tanto o parâmetro γ como o parâmetro β são diferentes de zero, então para este caso usaremos equação de Schrödinger modificada quadrática (2.48). Para o potencial dada pela equação (3.1), a equação de Schrödinger modificada quadrática diz

$$\frac{d^2\phi(s)}{ds^2} = -k^2\phi(s), \text{ onde } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.2)$$

Na equação (3.2) usamos o fato de que $U(s) = V(x(s)) = 0$, e a solução geral para

esta equação é

$$\phi(s) = A \sin(ks) + B \cos(ks), \quad (3.3)$$

onde A e B são constantes arbitrárias e postas pelas **condições de contornos** do problema. A saber: I) que a função $\psi(x)$ seja sempre contínua; II) que $d\psi/dx$ seja contínuo exceto nos pontos em que o potencial é finito.

Ao devolver as mudanças feitas na equação (2.46) a equação (3.3) fica

$$\psi(x) = A \sin \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) \right] + B \cos \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) \right], \quad (3.4)$$

no qual $\alpha^2 = \gamma^2 - 4\beta^2$. Aplicando a primeira condição de contorno, na qual exigimos que a função de onda seja sempre nula nas fronteiras, ou seja, considerando que

$$\psi(0) = \psi(a) = 0, \quad (3.5)$$

obtemos das equações (3.4) e (3.5) que

$$\psi(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = B = 0. \quad (3.6)$$

Sendo assim, a função de onda dada pela equação (3.4) fica

$$\psi(x) = A \sin \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) \right]. \quad (3.7)$$

Para encontrar a constante A da equação (3.7) será preciso normalizar esta função de onda, isto é:

$$|A|^2 \int_0^a \sin^2 \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) \right] \frac{dx}{(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)} = 1 \rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a_{\gamma\beta}}}, \quad (3.8)$$

onde $a_{\gamma\beta} = \left[\frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)a}{2 + (\gamma - \alpha)a} \right) \right]$.

Portanto, a função de onda na sua forma mais geral (juntando as soluções de dentro e de fora) será

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a_{\gamma\beta}}} \sin \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) \right] & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.9)$$

Entretanto, usando a outra parte da equação (3.5), $\psi(a) = 0$, os possíveis valores de k serão

$$k_n = \frac{n\pi}{a_{\gamma\beta}}, \text{ com } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.10)$$

Consequentemente, a obtenção da equação (3.10) nos leva a obtenção dos possíveis valores de

energia, E :

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m[a_{\gamma\beta}]^2}, \quad (3.11)$$

onde $a_{\gamma\beta}$ corresponde a largura do poço, que fica evidente quando β e depois γ tendem a zero.

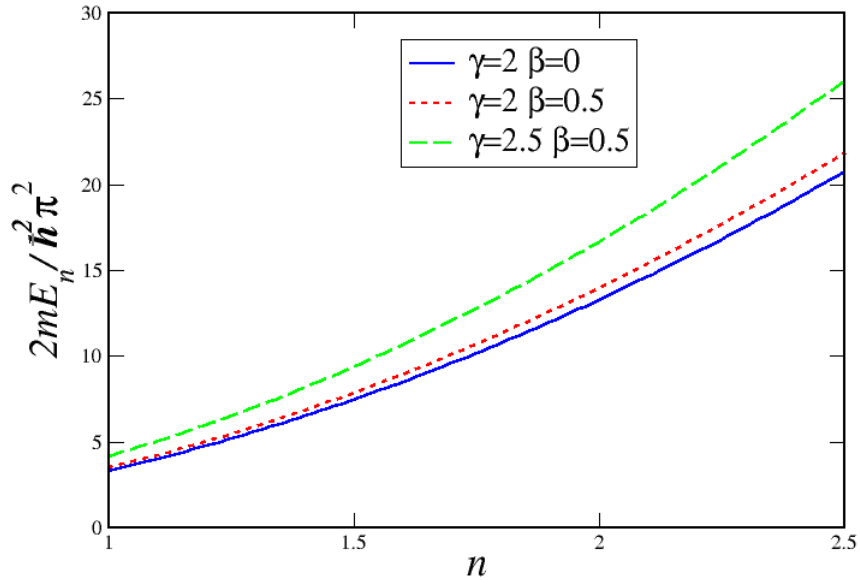


Figura 4 – Níveis de energia de uma partícula confinada em um poço quadrado infinito para os pares $\gamma = 2$ e $\beta = 0$; $\gamma = 2$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2.5$ e $\beta = 0.5$.

Na figura 4, pode-se observar como a energia varia com os parâmetros, γ e β , no qual fica perceptível que a energia aumenta com os parâmetros. Isto deve-se ao fato de que aumento dos dois parâmetros confinam a partícula. E, a energia aumenta quadraticamente com o n .

3.1.2 Caso linear

No caso linear temos $\gamma \neq 0$ e $\beta = 0$, então para este caso vamos usar a equação de Schrödinger modificada linear (2.49). Para o potencial dada pela equação (3.1), a equação de Schrödinger modificada linear fica

$$\frac{d^2\phi(\chi)}{d\chi^2} = -k^2\phi(\chi), \quad (3.12)$$

onde usamos o fato de que $U(\chi) = V(x(\chi)) = 0$. O k é dada pela equação (3.2), e a solução geral da equação (3.12) é

$$\phi(\chi) = F \sin(k\chi) + G \cos(k\chi). \quad (3.13)$$

Usando a equação (2.6) e devolvendo as mudanças feitas na equação (2.47), a

equação (3.13) fica

$$\psi(x) = F \sin \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right] + G \cos \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right], \quad (3.14)$$

onde F e G são constantes arbitrárias e determinadas pelas condições de contornos do problema.

Empregando a primeira condição de contorno de $\psi(x)$ temos

$$\psi(0) = F \sin(0) + G \cos(0) = G = 0,$$

portanto, a função de onda dada pela a equação (3.14) fica

$$\psi(x) = F \sin \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right]. \quad (3.15)$$

Para determinar a constante arbitrária F precisamos normalizar a equação (3.15),

$$|F|^2 \int_0^a \sin^2 \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right] \frac{dx}{(1 + \gamma x)} = 1 \Rightarrow F = \sqrt{\frac{2}{a_\gamma}}. \quad (3.16)$$

onde $a_\gamma = \ln(1 + \gamma a)/\gamma$ corresponde a largura do poço para este formalismo, e fica mais notório quando $\gamma \rightarrow 0$.

Dessa forma, juntando as soluções de dentro e de fora a função de onda na sua forma mais geral fica:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a_\gamma}} \sin \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right], & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.17)$$

que é o mesmo resultado encontrada no artigo de Costa Filho et al [11].

Entretanto, os possíveis valores de k para os quais $k[\ln(1 + \gamma a)]/\gamma$ é um múltiplo de π será

$$k_n = \frac{n\pi}{a_\gamma}, \text{ com } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.18)$$

Por consequência, os possíveis valores de E são

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma_\gamma^2}. \quad (3.19)$$

Na equação (3.19), é notório que também a energia aumenta quadraticamente com o n . Isto fica mais clara na figura 5, onde é mostrado como os níveis de energia aumentam com o parâmetro γ para alguns valores de n .

Se fizermos $\gamma \rightarrow \infty$, na equação (3.19), se houver uma partícula¹, a energia será infinita.

¹O que estamos fazendo é juntar as duas paredes, isto é, pegando a barreira na a e trazer para 0.

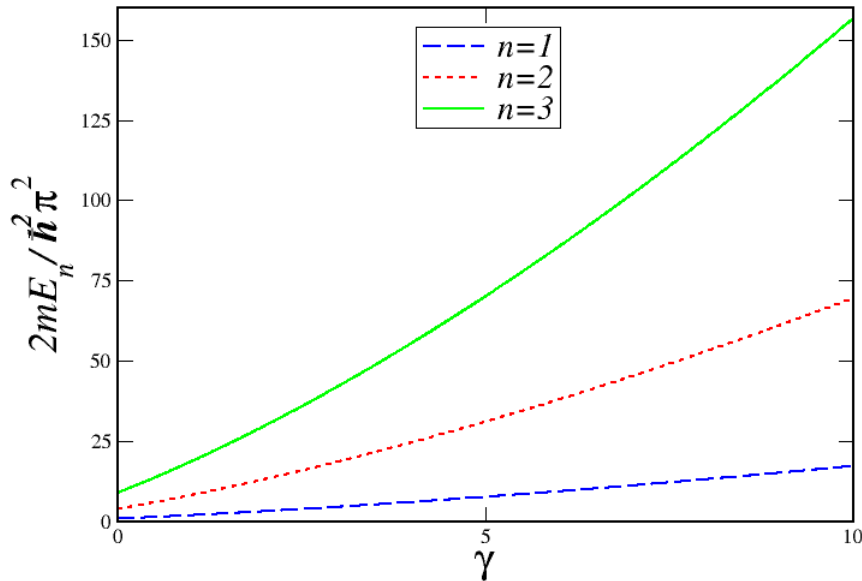


Figura 5 – Níveis de energia de uma partícula confinada em um poço quadrado infinito para os primeiros estados $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$.

As equações (3.11) e (3.19) têm muitas coisas em comum, alias a única diferença entre elas é o parâmetro β . Ao fazer o parâmetro β indo a zero na equação (3.11), as duas equações ficarão idênticas. Além disso, fazendo os parâmetros β e γ indo a zero na equação (3.11) ou fazer γ indo a zero na equação (3.19) obteremos o mesmo resultado para poço quadrado infinito na MQ usual.

3.2 Poço função delta

A função delta foi chamada deste nome em homenagem ao trabalho pioneiro do físico inglês Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984) em 1927. Desde então, a função delta tornou-se uma ferramenta primordial para a ciência e engenharia, com diversas aplicações que vão da teoria quântica até o controle de processos industriais [26].

Além da função delta, Dirac desenvolveu outros conceitos fundamentais na MQ, entre os quais podemos destacar, Equação de Dirac que descreve o comportamento do férmio, a Representação de Dirac que incorpora a Mecânica Matricial de Heisenberg com a Mecânica Ondulatória de Schrödinger em um único formalismo matemático, a notação Bra-Ket que é a notação utilizada para descrever os estados quânticos e a Delta de Dirac [27–30].

Nesta seção, estudaremos o poço função delta, um potencial nulo em todos os lugares exceto no ponto $x = x_d$, onde o potencial tem valor infinito. Este potencial é representado

matematicamente da seguinte forma:

$$V(x) = -\alpha\delta(x - x_d), \quad (3.20)$$

onde x_d é a posição para a qual o potencial diverge e α é um parâmetro positivo com as dimensões do *comprimento* \times *energia* [20].

O estudo do potencial dado pela equação (3.20) foi dividido em dois estados, ligado ($E < 0$) e o de espalhamento ($E > 0$), tanto para caso quadrático quanto para caso linear.

3.2.1 Caso quadrático

Para este caso, foi analisado primeiramente o estado ligado em três regiões: $x < x_d$, $x > x_d$ e $x = x_d$, e depois o estado de espalhamento em duas regiões: $x < x_d$, $x > x_d$.

No estado ligado, nas regiões $x < x_d$ e $x > x_d$ temos $V(x) = 0 \rightarrow U(s) = 0$, então a equação de Schrödinger modificada quadrática para este caso é

$$\frac{d^2\phi(s)}{ds^2} = q^2\phi(s), \text{ onde } q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.21)$$

Então, as soluções para esta equação com as variáveis são

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{-\frac{q}{\alpha}\ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)}, & \text{se } x > x_d \\ Be^{\frac{q}{\alpha}\ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)}, & \text{se } -\frac{2}{\gamma+\alpha} < x < x_d \\ 0, & \text{se } x < -\frac{2}{\gamma+\alpha}, \end{cases} \quad (3.22)$$

na qual usamos a primeira condição de contorno para mostrar que $F = B$. Nesta equação a função de onda é nula no intervalo $x < -2/(\gamma + \alpha)$, devido a propriedade da função logarítmica.

Para região $x = x_d$, posição para a qual o potencial diverge foi usada a equação (2.46). Ao substituir a equação (3.20) na equação (2.46) e integrar no intervalo, $x_d - \varepsilon \leq x \leq x_d + \varepsilon$, temos

$$\int_{x_d-\varepsilon}^{x_d+\varepsilon} [z(x)]^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{x_d-\varepsilon}^{x_d+\varepsilon} t(x)z(x) \frac{d\psi}{dx} dx = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \int_{x_d-\varepsilon}^{x_d+\varepsilon} \delta(x - x_d)\psi(x) dx. \quad (3.23)$$

onde $z(x) = 1 + \gamma x + \beta^2 x^2$ e $t(x) = \gamma + 2x\beta^2$. Usando a integração por parte no primeiro membro e a propriedade de delta de Dirac no segundo obteremos a seguinte expressão:

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx}\Big|_{x_d+\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx}\Big|_{x_d-\varepsilon} \right) = -\frac{2m\gamma\beta\alpha}{\hbar^2} \psi(x_d), \quad (3.24)$$

onde $m_{\gamma\beta} = m/(1 + \gamma x + \beta^2 x^2)^2$. A equação (3.24) mostra a descontinuidade da função de onda

na região $x = x_d$. Pela ação da equação (3.24) a equação (3.22) nos fornece

$$\begin{cases} d\psi/dx|_+ = -\frac{qB}{1+\gamma x+\beta^2 x^2} & \text{para } (x > x_d), \\ d\psi/dx|_- = \frac{qB}{1+\gamma x+\beta^2 x^2} & \text{para } (-\frac{2}{\gamma+\alpha} < x < x_d). \end{cases} \quad (3.25)$$

Substituindo a equação (3.25) na equação (3.24) temos

$$q = \frac{m\alpha}{\hbar^2 (1 + \gamma x + \beta^2 x^2)}, \quad (3.26)$$

e da equação (3.21) a energia permitida será

$$E = -\frac{q^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{m\gamma\beta\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (3.27)$$

Por fim, normalizamos a função de onda ψ para achar a constante arbitrária B ,

$$B = \sqrt{q} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m\alpha}{1 + \gamma x + \beta^2 x^2}}. \quad (3.28)$$

Com a determinação da constante arbitrária B , a função de onda para estados ligados fica completa, equação (3.22).

A seguir falaremos de estados de espalhamentos, $E > 0$, no qual analisaremos duas regiões, $x < x_d$ e $x > x_d$, onde também $V(x) = 0 \rightarrow U(x) = 0$. Então, a equação de Schrödinger modificada quadrática diz

$$\frac{d^2 \phi(s)}{ds^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(s) = -k^2 \phi(s), \quad (3.29)$$

onde k é dada pela equação (3.2). Logo, as soluções gerais com as variáveis devolvidas são

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\left[\frac{ik}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} + Be^{\left[-\frac{ik}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]}, & \text{se } x > x_d \\ Fe^{\left[\frac{ik}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} + Ge^{\left[-\frac{ik}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]}, & \text{se } -\frac{2}{\gamma+\alpha} < x < x_d. \end{cases} \quad (3.30)$$

Usando a primeira condição de contorno para ψ nas equações (3.30) obtemos

$$F + G = A + B, \quad (3.31)$$

e a derivada da equação (2.30) nos dá

$$\begin{cases} d\psi/dx = \frac{ik}{(1+\gamma x+\beta^2 x^2)} (A - B) & \text{para } (x > x_d) \\ d\psi/dx = \frac{ik}{(1+\gamma x+\beta^2 x^2)} (F - G) & \text{para } (-\frac{2}{\gamma+\alpha} < x < x_d). \end{cases} \quad (3.32)$$

Da equação de descontinuidade, equação (2.24), encontramos que

$$F - G = A(1 + 2i\lambda) - B(1 - 2i\lambda) \text{ onde } \lambda \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k(1+\gamma x+\beta^2 x^2)}. \quad (3.33)$$

Depois de aplicarmos as condições de contornos necessárias, ficamos com duas equações e cinco incógnitas (A , B , F , G e k). A normalização não pode nos ajudar a explicar essas incógnitas, mas sabemos que $\exp(iks)$ representa uma onda movendo-se para direita enquanto que $\exp(-iks)$ representa uma onda movendo-se para esquerda. Portanto, na primeira equação da (3.30), A é amplitude de uma onda vinda da esquerda, e B é a amplitude da onda voltando para esquerda, e na segunda equação, F é amplitude de um onda movendo para a direita, e G é a amplitude da onda vinda da direita [7].

Se nesse nosso espalhamento² a direção do disparo das partículas foi da esquerda para direita[7], então

$$G = 0, \quad (3.34)$$

logo, ficamos com A (amplitude da onda incidente), B (amplitude da onda refletida) e F (amplitude da onda transmitida).

Empregando as equações (3.31), (3.33) e (3.34) temos

$$F = \frac{1}{1 - i\lambda}A, \text{ e } B = \frac{i\lambda}{1 - i\lambda}A. \quad (3.35)$$

Desse modo, a probabilidade de uma partícula incidente seja refletida é

$$R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\lambda^2}{1 + \lambda^2}, \quad (3.36)$$

no qual R é conhecida como **coeficiente de reflexão**, e a probabilidade de uma partícula incidente seja transmitida é

$$T \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \lambda^2}, \quad (3.37)$$

onde T é conhecida como **coeficiente de transmissão**. A soma dessas duas probabilidades deve ser igual a 1,

$$R + T = 1. \quad (3.38)$$

Observe que R e T são funções de λ , então das equações (3.2), (3.33), (3.36) e (3.37), os coeficientes de reflexão de e transmissão serão

$$R_{\gamma\beta} = \frac{1}{1 + (2\hbar^2 E / m_{\gamma\beta} \alpha^2)}, \text{ e } T_{\gamma\beta} = \frac{1}{1 + (m_{\gamma\beta} \alpha^2 / 2\hbar^2 E)}. \quad (3.39)$$

De acordo com a equação dos coeficientes, equação (3.39), pode-se observar que quanto maior for a energia maior será a probabilidade de transmissão e, conseqüentemente, menor será a probabilidade de reflexão.

Da figura 6, no qual representamos a equação (3.39), percebe-se que o aumento do parâmetro γ gera o afastamento entre os dois picos, e que o parâmetro β , ao contrário do

²Em um experimento de espalhamento típico, as partículas são disparadas em uma única direção.

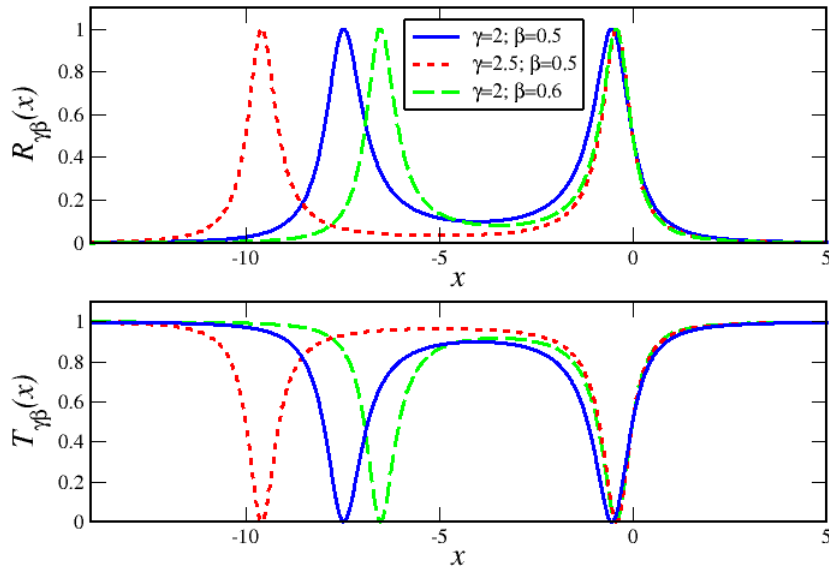


Figura 6 – A parte de cima representa a probabilidade de reflexão e a parte de baixo representa a probabilidade de transmissão para os pares $\gamma = 2$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2.5$ e $\beta = 0.5$; $\gamma = 2$ e $\beta = 0.6$. Também representa a soma destas duas probabilidades.

parâmetro γ , causa aproximação dos picos. Nela também fica comprovada equação (3.38), isto é, quanto maior será a probabilidade de transmissão menor será a probabilidade de reflexão e vice-versa, no qual o valor máximo será sempre 1.

3.2.2 Caso linear

Nesta subseção foi usado quase o mesmo procedimento usado na subseção anterior. A única diferença foi considerar o parâmetro $\beta = 0$, e a equação usada foi a equação de Schrödinger modificada linear (2.49) em substituição da equação de Schrödinger modificada quadrática (2.48).

Para estados ligados $E < 0$, a equação de Schrödinger modificada linear nas regiões $x < x_d$ e $x > x_d$ é

$$\frac{d^2\phi(\chi)}{d\chi^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi(\chi) = q^2\phi(\chi), \quad (3.40)$$

onde q é dada pela equação (3.21), de modo que, as soluções gerais nas duas regiões (com as mudanças devolvidas) são

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{-\frac{q}{\gamma}\ln(1+\gamma x)} & \text{se } x > x_d \\ Be^{\frac{q}{\gamma}\ln(1+\gamma x)} & \text{se } -\frac{1}{\gamma} < x < x_d \\ 0 & \text{se } x < -\frac{1}{\gamma}. \end{cases} \quad (3.41)$$

na qual usamos a primeira condição de contorno para mostrar que $F = B$. Em $x = x_d$ temos potencial diferente de zero, $V \neq 0$, portanto a abordagem vai ser diferente da usadas nas duas anteriores.

Ao substituir a equação (3.20) na equação (2.47) e depois integrar no intervalo, $x_d - \varepsilon \leq x \leq x_d + \varepsilon$, vemos que

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_d-\varepsilon}^{x_d+\varepsilon} [r(x)]^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \frac{\hbar^2\gamma}{2m} \int_{x_d-\varepsilon}^{x_d+\varepsilon} r(x) \frac{d\psi}{dx} dx = -\alpha \int_{x_d-\varepsilon}^{x_d+\varepsilon} \delta(x-x_d) \psi(x) dx, \quad (3.42)$$

onde $r(x) = 1 + \gamma x$. Executando as mesmas operações que fizemos na equação (2.23) vamos ficar com

$$\Delta \left(\frac{d\psi}{dx} \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d\psi}{dx} \Big|_{x_d+\varepsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x_d-\varepsilon} \right) = -\frac{2m\gamma\alpha}{\hbar^2} \psi(x_d), \quad (3.43)$$

onde $m_\gamma = m/(1 + \gamma x)^2$. A equação (3.43) mostra a descontinuidade da função de onda em $x = x_d$.

Aplicando a derivada na equação (3.41) temos

$$\begin{cases} d\psi/dx|_+ = -\frac{qB}{(1+\gamma x)} & \text{para } x > x_d \\ d\psi/dx|_- = \frac{qB}{(1+\gamma x)} & \text{para } -\frac{1}{\gamma} < x < x_d. \end{cases} \quad (3.44)$$

Substituindo a equação (3.44) na equação da descontinuidade da função de onda, (3.43), chegamos à

$$q = \frac{m\alpha}{\hbar^2(1 + \gamma x)}.$$

Consequentemente, nos leva a obtenção energia permitida

$$E = -\frac{q^2\hbar^2}{2m} = -\frac{m\gamma\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (3.45)$$

Da normalização da função de onda concluímos que

$$B = \sqrt{q} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m\alpha}{(1 + \gamma x)}}. \quad (3.46)$$

que é a constante arbitrária da função de onda, equação (3.41).

Para o estado de espalhamentos, $E > 0$, a equação de Schrödinger modificada linear nas duas regiões, $x < x_d$ e $x > x_d$, com $V(x) = 0 \rightarrow U(x) = 0$, fica

$$\frac{d^2\phi(\chi)}{d\chi^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(\chi) = -k^2 \phi(\chi), \quad (3.47)$$

onde k é dada pela equação (3.2). As soluções gerais com as variáveis devolvidas ficam

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\left[\frac{ik}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} + Be^{\left[-\frac{ik}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} & \text{se } x > x_d \\ Fe^{\left[\frac{ik}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} + Ge^{\left[-\frac{ik}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} & \text{se } -\frac{1}{\gamma} < x < x_d. \end{cases} \quad (3.48)$$

A partir da primeira condição de contorno para ψ é evidente que

$$F + G = A + B, \quad (3.49)$$

e da derivada em $x = 0$ temos

$$\begin{cases} d\psi/dx = \frac{ik}{(1+\gamma x)}(F - G) & \text{para } (x > x_d) \\ d\psi/dx = \frac{ik}{(1+\gamma x)}(A - B) & \text{para } (-\frac{1}{\gamma} > x > x_d). \end{cases} \quad (3.50)$$

Usando a equação (3.50) na equação da descontinuidade, (3.43), ficamos com

$$F - G = A(1 + 2i\xi) - B(1 - 2i\xi) \text{ onde } \xi \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k(1+\gamma x)}. \quad (3.51)$$

De novo, ficamos com duas equações e cinco incógnitas A , B , F , G e k . Diante disso, a normalização não pode nos ajudar a explicar essas incógnitas. Então, a nossa preocupação será encontrar as probabilidades reflexão e transmissão dessa partícula incidente, que nos ajude a entender o problema.

Ao considerar que nesse espalhamento a direção do disparo da partícula é da esquerda para direita, então a amplitude da onda vinda da direita será zero,

$$G = 0. \quad (3.52)$$

Das equações (3.49), (3.51) e (3.52) obtemos

$$F = \frac{1}{1 - i\xi}A, \text{ e } B = \frac{i\xi}{1 - i\xi}A. \quad (3.53)$$

Usando as equações (3.36) e (3.37), a probabilidade de uma partícula incidente seja refletida é

$$R_\gamma \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\xi^2}{1 + \xi^2} = \frac{1}{1 + 2\hbar^2 E / m_\gamma \alpha^2}, \quad (3.54)$$

e a probabilidade de uma partícula incidente seja transmitida é

$$T_\gamma \equiv \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \xi^2} = \frac{1}{1 + m_\gamma \alpha^2 / 2\hbar^2 E}. \quad (3.55)$$

Mediante as equações (3.55) e (3.54), fica claro que a probabilidade de transmissão aumenta com a energia e , por conseguinte, a probabilidade de reflexão diminui com ela. Também é comprovada a equação (3.38).

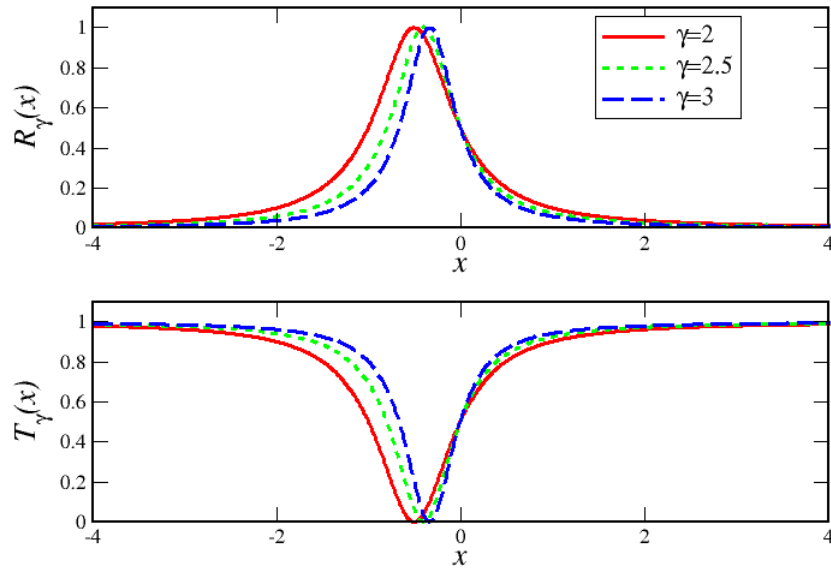


Figura 7 – A parte de cima representa a probabilidade de reflexão e a parte de baixo representa a probabilidade de transmissão para os seguintes γ : 2, 2.5 e 3. A soma destas duas probabilidades é sempre 1.

Na figura 7 está representada as probabilidades de transmissão e de reflexão, as equações (3.54) e (3.55). Ela também comprova a equação (3.38), no qual a soma das duas probabilidades é sempre 1.

Ao fazer β indo a zero nas equações (3.39), ficarão iguais as equações (3.54) e (3.55). E por outro lado, se fizemos $\gamma = 0$, as equações (3.54) e (3.55) ficarão iguais às encontradas em muitas literaturas da MQ.

3.3 O modelo de Kronig-Penny

O modelo Kronig-Penney é um modelo elaborado em 1931 por dois físicos, Ralph Kronig e William George Penney. Este modelo serve para descrever os estados energéticos de um elétron de uma estrutura cristalina, nos quais os íons se dispõem de modo a exibir uma periodicidade espacial que afeta o movimento dos elétrons livres no metal, internamente [25, 31].

O potencial que mostra esse periodicidade é dado da seguinte forma:

$$V(x) = V(x + a). \quad (3.56)$$

Para um Hamiltoniano independente do tempo, o termo da energia cinética continua inalterado mesmo quando $x \rightarrow x + a$. Para um potencial nulo a energia é dada por $E = \hbar^2 k^2 / 2m$,

neste caso, a função de onda será

$$\psi(x) = e^{ikx}. \quad (3.57)$$

Para o deslocamento de $x \rightarrow x + a$ temos

$$\psi(x + a) = e^{ik(x+a)} = e^{ika}\psi(x), \quad (3.58)$$

que é nada mais que uma *função de onda Bloch*.

A equação (3.58) mostra que quando fizemos a translação de $x \rightarrow x + a$ na função de onda, a solução será a solução original multiplicada por um fator de fase, e^{ika} , com a mesma densidade de probabilidade da função original,

$$|\psi(x + a)|^2 = |\psi(x)|^2. \quad (3.59)$$

Nesta seção, o nosso trabalho será entender quais são as variações causadas pelas métricas quando usamos o modelo de Kronig-Penny.

Para uma simplificação matemática, vamos considerar uma série de potenciais repulsivos tipo função delta [20],

$$V(x) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta\left(\frac{x - a_n}{1 + \gamma a_n}\right), \quad (3.60)$$

onde $a_n = [(1 + \gamma a)^n - 1] / \gamma$ é a posição dos íons na rede cristalina [20].

3.3.1 Caso quadrático

Para este caso, a solução da equação de Schrödinger modificada quadrática no intervalo $0 \leq x \leq a$, no qual o é potencial nulo, é a seguinte:

$$\psi(x) = A \sin \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) \right] + B \cos \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) \right], \quad (3.61)$$

e a constante k vem da equação (3.2). Usando as funções de Bloch deformadas, a solução imediatamente à esquerda de $x = 0$, isto é, na região definida por $-a/(1 + \gamma a + \beta^2 a^2) \leq x \leq 0$, é

$$\begin{aligned} \psi(x) = & A_{\gamma\beta} \sin \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) + \frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)a}{2 + (\gamma - \alpha)a} \right) \right] + \\ & B_{\gamma\beta} \cos \left[\frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)x}{2 + (\gamma - \alpha)x} \right) + \frac{k}{\alpha} \ln \left(\frac{2 + (\gamma + \alpha)a}{2 + (\gamma - \alpha)a} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Partindo da primeira condição de contorno da função de onda em $x = 0$ temos

$$A_{\gamma\beta} \sin[ka_{\gamma\beta}] + B_{\gamma\beta} \cos[ka_{\gamma\beta}] = B. \quad (3.63)$$

Entretanto, a descontinuidade da função de onda (equação (3.24)), em $x = 0$, nos

leva à

$$B_{\gamma\beta} \sin [ka_{\gamma\beta}] - A_{\gamma\beta} \cos [ka_{\gamma\beta}] + A = \frac{2g_{\gamma\beta}}{k} B, \quad (3.64)$$

onde $g_{\gamma\beta} = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$. Trabalhando as equações (3.63) e (3.64) em função de $A_{\gamma\beta}$ e $B_{\gamma\beta}$ chegamos a

$$\begin{cases} A_{\gamma\beta} = B \left(\sin [ka_{\gamma\beta}] - \frac{2g_{\gamma\beta}}{k} \cos [ka_{\gamma\beta}] \right) + A \cos [ka_{\gamma\beta}], \\ B_{\gamma\beta} = B \left(\cos [ka_{\gamma\beta}] + \frac{2g_{\gamma\beta}}{k} \sin [ka_{\gamma\beta}] \right) - A \sin [ka_{\gamma\beta}]. \end{cases} \quad (3.65)$$

Se exigimos que as funções de onda (3.61) e (3.62) sejam relacionadas por

$$\psi(x+a) = e^{ira_{\gamma\beta}} \psi(x), \quad (3.66)$$

então, essa relação é satisfeita se

$$\begin{cases} A_{\gamma\beta} = e^{ira_{\gamma\beta}} A \\ B_{\gamma\beta} = e^{ira_{\gamma\beta}} B. \end{cases} \quad (3.67)$$

Ao transportar isso para equação (3.64) encontramos a seguinte condição de consistência:

$$\begin{cases} B \left(\sin [ka_{\gamma\beta}] - \frac{2g_{\gamma\beta}}{k} \cos [ka_{\gamma\beta}] \right) + A \cos [ka_{\gamma\beta}] = e^{ira_{\gamma\beta}} A \\ B \left(\cos [ka_{\gamma\beta}] + \frac{2g_{\gamma\beta}}{k} \sin [ka_{\gamma\beta}] \right) - A \sin [ka_{\gamma\beta}] = e^{ira_{\gamma\beta}} B. \end{cases} \quad (3.68)$$

Portanto,

$$\cos [ra_{\gamma\beta}] = \cos [ka_{\gamma\beta}] + \left(\frac{\rho}{ka} \right) \sin [ka_{\gamma\beta}]. \quad (3.69)$$

no qual consideramos $g_{\gamma\beta}a = \rho$.

Este é um resultado muito interessante, pois o lado esquerdo desta equação está sempre limitada no intervalo ± 1 , no qual há restrições dos possíveis valores de energia $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ [25]. O lado direito está representado na figura 8, nela é possível observar que a curva do lado direito transcende os limites proibidos por alguns valores, e também os parâmetros γ e β causam translação na função de onda para direita.

3.3.2 Caso linear

Para este caso, usaremos as mesmas ideias usadas anteriormente, a única diferença vai ser considerar o parâmetro $\beta = 0$, e a equação de Schrödinger modificada quadrática será substituída pela equação de Schrödinger modificada linear. Então, no intervalo, $0 \leq x \leq a$, (com $V(x) = 0$) a equação de Schrödinger modificada linear nos dá

$$\psi(x) = A \sin \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right] + B \cos \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) \right]. \quad (3.70)$$

Partindo da equação dos estados deformados de Bloch, então a solução na região

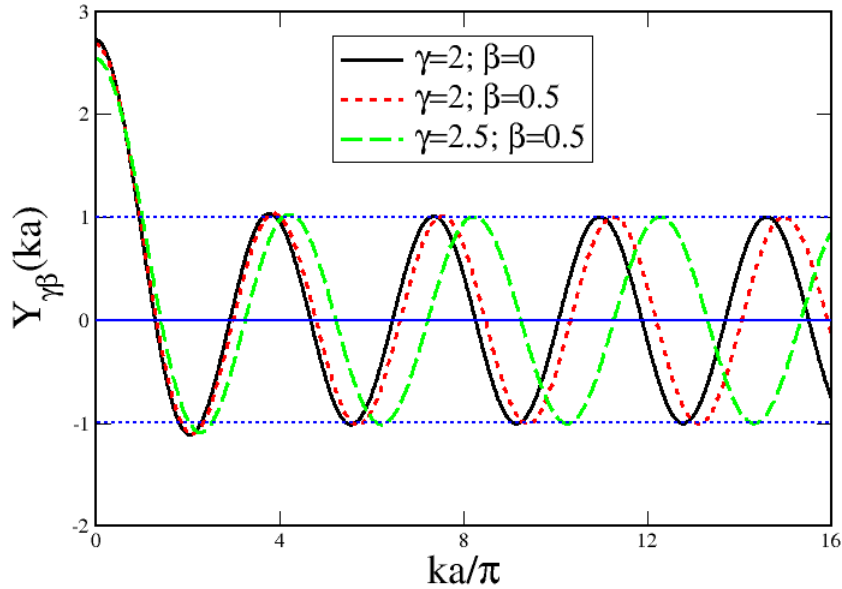


Figura 8 – Gráfico da equação (3.69) em função de ka/π para caso quadrática, onde $\rho = \pi/2$. As linhas horizontais representam os limites ∓ 1 . As regiões de x , para quais a curva está fora da faixa, são proibidas.

$-a/(1 + \gamma a) \leq x \leq 0$ fica

$$\psi(x) = A_\gamma \sin \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) + \frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right] + B_\gamma \cos \left[\frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma x) + \frac{k}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right]. \quad (3.71)$$

Ao operar a condição da continuidade da função de onda em $x = 0$, chegamos a

$$A_\gamma \sin [ka_\gamma] + B_\gamma \cos [ka_\gamma] = B. \quad (3.72)$$

Da equação da descontinuidade, equação (3.43), temos que

$$B_\gamma \sin [ka_\gamma] - A_\gamma \cos [ka_\gamma] + A = \frac{2g_\gamma}{k} B, \quad (3.73)$$

na qual $g_\gamma = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$. Solucionando as equações (3.72) e (3.73) em função de A_γ e B_γ , chegaremos à

$$\begin{cases} A_\gamma = B \left(\sin [ka_\gamma] - \frac{2g_\gamma}{k} \cos [ka_\gamma] \right) + A \cos [ka_\gamma], \\ B_\gamma = B \left(\cos [ka_\gamma] + \frac{2g_\gamma}{k} \sin [ka_\gamma] \right) - A \sin [ka_\gamma]. \end{cases} \quad (3.74)$$

A mesma exigência que fizemos na subseção anterior vale também aqui, isto é,

$$\psi(s + s_a) = e^{irs_a} \psi(s) \quad (3.75)$$

que também é satisfeita quando

$$\begin{cases} A_\gamma = e^{ira_\gamma}A, \\ B_\gamma = e^{ira_\gamma}B. \end{cases} \quad (3.76)$$

Dessa forma temos

$$\begin{cases} B \left(\sin [ka_\gamma] - \frac{2g_\gamma}{k} \cos [ka_\gamma] \right) + A \cos [ka_\gamma] = e^{irs_a}A, \\ B \left(\cos [ka_\gamma] + \frac{2g_\gamma}{k} \sin [ka_\gamma] \right) - A \sin [ka_\gamma] = e^{irs_a}B. \end{cases} \quad (3.77)$$

Portanto,

$$\cos [ra_\gamma] = \cos [ka_\gamma] + \left(\frac{\eta}{ka} \right) \sin [ka_\gamma], \quad (3.78)$$

na qual consideramos $g_\gamma a = \eta$.

A equação (3.78) é um resultado muito fascinante, da mesma forma que o lado esquerdo da equação (3.69) é sempre limitada no intervalo ± 1 aqui também acontece a mesma coisa. A única diferença é que na equação (3.78), o γ é o único parâmetro e a sua variação causa também a translação da função de onda. O lado direito da figura 9 transcende os limites proibidos por mesmo motivo da explicado na figura 8.

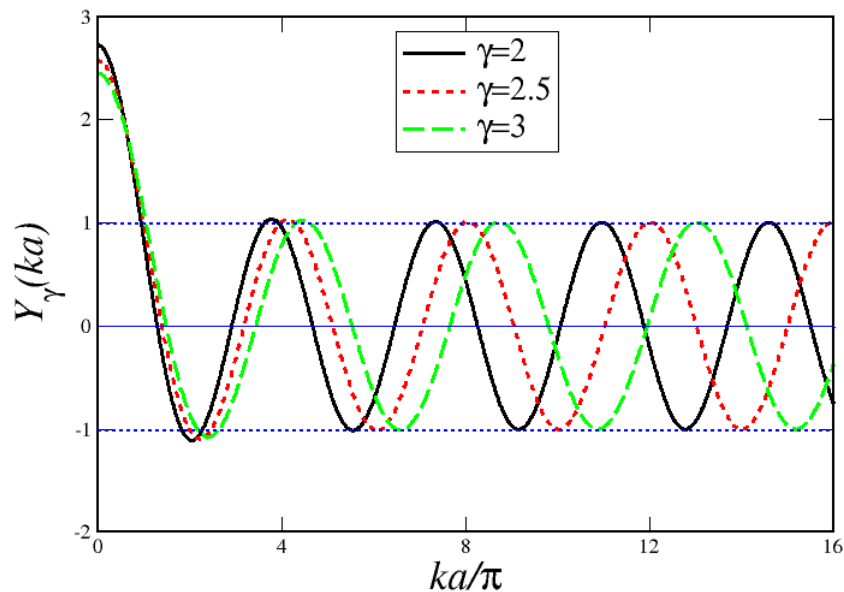


Figura 9 – Gráfico da equação (3.78) em função de ka/π para caso linear, onde $\rho = \pi/2$. As linhas horizontais representam os limites ± 1 . As regiões de x , para quais a curva está fora da faixa, são proibidas.

3.4 Barreira de potencial

A barreira de potencial consiste em uma partícula quântica de massa m que incide sobre uma barreira, no qual ela impede que essa atravessa para o outro lado, como está mostrada na figura 10. Nesta figura a energia potencial V_0 , define a altura e a distância a define a largura da barreira [32].

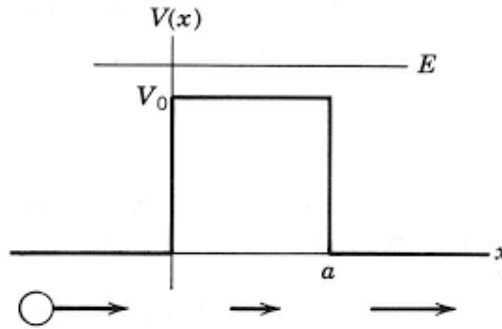


Figura 10 – Gráfico da barreira de potencial com energia potencial V_0 definindo a altura e a distância a a largura da barreira.

Na MC essa partícula vai conseguir ultrapassar a barreira só se a sua energia cinética for maior que a energia potencial da barreira. Mas isso não acontece na MQ, pois de acordo com o fenômeno de tunelamento essa partícula vai conseguir ultrapassar mesmo que a sua energia cinética for menor que a energia potencial da barreira[33].

Uma das vantagens deste modelo, é a simplicidade matemática que proporciona, através do qual, é possível explicar todos os comportamentos físicos mais relevantes.

Para melhor interpretação, este modelo será resolvido em duas partes. Inicialmente, começaremos com $E < V_0$ e, a seguir, $E > V_0$.

3.4.1 Caso quadrático

No caso quadrático, o estado ligado ($E < V_0$) foi analisado em três regiões: duas externas, $-2/(\gamma + \alpha) < x < 0$ e $x > a$, e uma interna, $0 < x < a$.

De acordo com aparato do nosso problema, nas regiões fora da barreira o potencial é nulo, portanto a equação de Schrödinger modificada quadrática nesta região fica

$$\frac{d^2 \phi(s)}{ds^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(s) = q^2 \phi(s), \quad (3.79)$$

na qual q é dada pela equação (3.21). As soluções da equação (3.79) nas regiões externas são

$$\begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{\left[\frac{iq_1}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} + Be^{\left[-\frac{iq_1}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} & \text{para } (-2/(\gamma + \alpha)) < x < 0, \\ \psi_2(x) = Ce^{\left[\frac{iq_1}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} + De^{\left[-\frac{iq_1}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} & \text{para } (x > a), \end{cases} \quad (3.80)$$

onde $q_1^2 = 2mE/\hbar^2$. A função de onda é nula no intervalo, $-\infty < x < -2/(\gamma + \alpha)$, devido propriedade da função logarítmica.

Na região de dentro da barreira temos potencial diferente de zero, portanto a equação de Schrödinger modificada quadrática nesta região diz

$$\frac{d^2\phi(s)}{ds^2} = -\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\phi(s), \quad (3.81)$$

com a solução

$$\psi_3(x) = Fe^{\left[\frac{q_2}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} + Ge^{\left[-\frac{q_2}{\alpha} \ln\left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x}\right)\right]} \text{ para } (0 < x < a), \quad (3.82)$$

onde $q_2^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Ao empregar as condições de contorno que obriga que as funções de ondas e as suas derivadas sejam iguais nas fronteiras (em $x = 0$) temos

$$A + B = F + G, \quad (3.83)$$

e

$$ik_1(A - B) = k_2(F - G) \Rightarrow A - B = -i\sigma(F - G), \quad (3.84)$$

onde chamamos $\sigma = q_2/k_1$.

Se a partícula incidida foi da esquerda para direita, então $D = 0$ na equação (3.80), e das condições de contorno nas fronteiras, para $x = a$, teremos

$$\begin{cases} Fe^{q_2 a \gamma \beta} + Ge^{-q_2 a \gamma \beta} = \eta, \\ Fe^{q_2 a \gamma \beta} - Ge^{-q_2 a \gamma \beta} = \frac{i}{\sigma} \eta, \end{cases} \quad (3.85)$$

com $\eta = Ce^{iq_1 a \gamma \beta}$. As possíveis soluções da equação (3.85) são

$$\begin{cases} F = \eta \left(\frac{\sigma+i}{2\sigma}\right) e^{-q_2 a \gamma \beta}, \\ G = \eta \left(\frac{\sigma-i}{2\sigma}\right) e^{q_2 a \gamma \beta}. \end{cases} \quad (3.86)$$

Ao substituir a equação (3.86) nas equações (3.83) e (3.84) e resolvendo-as em função de A e B chegamos a

$$A = \eta \left[\cosh[q_2 a \gamma \beta] + \frac{i}{2} \left(\sigma - \frac{1}{\sigma} \right) \sinh[q_2 a \gamma \beta] \right], \quad (3.87)$$

e

$$B = -\frac{i}{2} \eta \left(\sigma + \frac{1}{\sigma} \right) \sinh[q_2 a \gamma \beta], \quad (3.88)$$

na qual usamos as funções hiperbólicas (particularmente, seno hiperbólico e cosseno hiperbólico) [34, 35]. Em vista disso, os coeficientes de probabilidades de reflexão (R) e de transmissão (T)

ficam

$$R_{\gamma\beta_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{q_2}{q_1} + \frac{q_1}{q_2} \right)^2 \sinh^2[q_2 a_{\gamma\beta}]}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_2}{q_1} + \frac{q_1}{q_2} \right)^2 \sinh^2[q_2 a_{\gamma\beta}]}, \quad (3.89)$$

$$T_{\gamma\beta_1} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_2}{q_1} + \frac{q_1}{q_2} \right)^2 \sinh^2[q_2 a_{\gamma\beta}]}. \quad (3.90)$$

Ao examinar as equações (3.89) e (3.90), observa-se que quando $a \rightarrow 0$, o único coeficiente de probabilidade que vai restar será a de transmissão, T . Fisicamente falando, é como se fosse não existisse a barreira, portanto a partícula vai passar livremente sem nenhum obstáculo.

Na figura 11, é perceptível que tanto a contribuição do parâmetro γ quanto o parâmetro β fazem o pico se dilatar, e que a soma das probabilidades é sempre igual a 1, comprovando a equação (3.38).

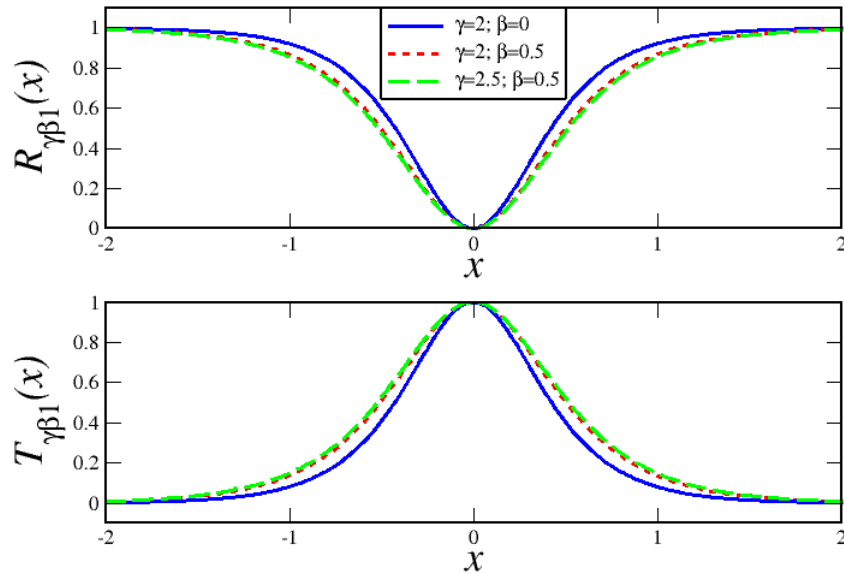


Figura 11 – Gráfico de barreira de potencial para caso quadrático. Estado ligado ($E < V_0$) nas três regiões: duas externas, $-2/(\gamma + \alpha) < x < 0$ e $x > a$, e uma interna, $0 < x < a$.

No estado de espalhamento ($E > V_0$), tal como no estado ligado, foi também analisado em três regiões: duas externas e uma interna.

Nas regiões externas a equação (3.80) continua válida no estado de espalhamento, mas a equação da região interna não. Então, a solução da equação (2.81) na região interna do estado de espalhamento fica

$$\psi_4(x) = Me^{\left[\frac{iq_3}{\alpha} \ln \left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x} \right) \right]} + Ne^{\left[-\frac{iq_3}{\alpha} \ln \left(\frac{2+(\gamma+\alpha)x}{2+(\gamma-\alpha)x} \right) \right]} \text{ para } (0 < x < a), \quad (3.91)$$

onde $q_3 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. A condição de contorno na fronteira $x = 0$ para função de onda e para sua derivada nos leva a

$$A + B = M + N, \quad (3.92)$$

e

$$k_1(A - B) = k_3(M - N) \Rightarrow A - B = \rho(M - N), \quad (3.93)$$

onde $\rho = q_3/q_1$. Para $x = a$, a condição do contorno nos fornece os valores de M e N ,

$$\begin{cases} M = \eta \left(\frac{\rho+1}{2\rho} \right) e^{-iq_3 a_{\gamma\beta}}, \\ N = \eta \left(\frac{\rho-1}{2\rho} \right) e^{iq_3 a_{\gamma\beta}}. \end{cases} \quad (3.94)$$

Ao operar equação (3.94) nas equações (3.92) e (3.93) e resolver em função de A e B temos

$$A = \eta \left[\cos [q_3 a_{\gamma\beta}] - \frac{i}{2} \left(\frac{1}{\rho} + \rho \right) \sin [q_3 a_{\gamma\beta}] \right], \quad (3.95)$$

e

$$B = \eta \frac{i}{2} \left(\rho - \frac{1}{\rho} \right) \sin [q_3 a_{\gamma\beta}], \quad (3.96)$$

no qual contamos com ajuda da equação de identidade de Euler³ [30]. Sendo assim, os coeficientes de reflexão e de transmissão são

$$R_{\gamma\beta_2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{q_3}{q_1} - \frac{q_1}{q_3} \right)^2 \sin^2 [q_3 a_{\gamma\beta}]}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_3}{q_1} - \frac{q_1}{q_3} \right)^2 \sin^2 [q_3 a_{\gamma\beta}]}, \quad (3.97)$$

$$T_{\gamma\beta_2} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_3}{q_1} - \frac{q_1}{q_3} \right)^2 \sin^2 [q_3 a_{\gamma\beta}]}, \quad (3.98)$$

onde a soma também é igual a 1.

Ao analisar as equações (3.97) e (3.98), também é notório que quando $a = 0$, o único coeficiente de probabilidade que vai restar será o de transmissão T . A mesma explicação física feita para equações (3.89) e (3.90), aqui também é aplicável.

Observando a figura 12, podemos notar que no caso de estado de espalhamento sempre vai existir coeficiente de transmissão, isto é, vai existir sempre a probabilidade da partícula passar. Também da figura 12, observamos que a probabilidade da partícula ser transmitida será sempre maior que a de reflexão.

³Essa fórmula estabelece conexões profundas entre funções exponenciais, trigonométricas e números complexos [30].

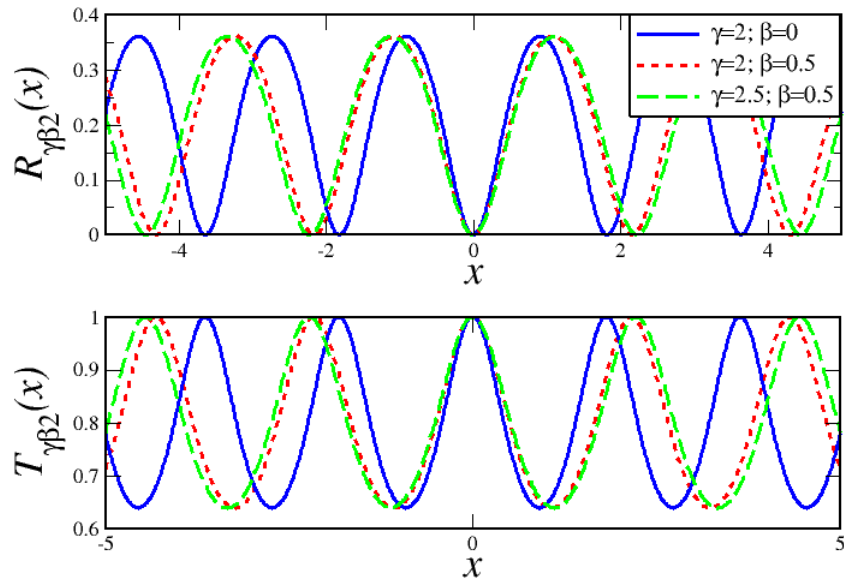


Figura 12 – Gráfico de barreira de potencial para caso quadrático. Estado de espalhamento ($E > V_0$) nas três regiões: duas externas, $-2/(\gamma + \alpha) < x < 0$ e $x > a$, e uma interna, $0 < x < a$.

3.4.2 Caso linear

Neste caso, usamos a equação de Schrödinger modificada linear para analisar os dois estados (ligado e de espalhamento) nas três regiões, $-\frac{1}{\gamma} < x < 0$, $x > a$ e $0 < x < a$.

Para $E < V_0$ (estados ligados), a equação Schrödinger modificada linear nas regiões externa diz

$$\frac{d^2\phi(\chi)}{d\chi^2} = -q^2\phi(\chi), \quad (3.99)$$

onde q é dada pela equação (3.21). As soluções nestas regiões são

$$\begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{i\left[\frac{q_1}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} + Be^{-i\left[\frac{q_1}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} & \text{para } \left(-\frac{1}{\gamma} < x < 0\right), \\ \psi_2(x) = Ce^{i\left[\frac{q_1}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} + De^{-i\left[\frac{q_1}{\gamma}\ln(1+\gamma x)\right]} & \text{para } (x > a), \end{cases} \quad (3.100)$$

na qual devolvemos as variáveis necessárias. Devido as propriedades das funções logarítmicas, a função de onda, $\psi_1(x)$, é nula na região $\infty \leq x \leq -\frac{1}{\gamma}$.

Na região interna $0 < x < a$, temos potencial diferente de zero, então a equação Schrödinger modificada linear nesta região fica

$$\frac{d^2\phi(\chi)}{d\chi^2} = -\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\phi(\chi), \quad (3.101)$$

e a solução nesta região é

$$\psi_3(x) = Fe^{\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma x)\right]} + Ge^{-\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma x)\right]} \text{ para } (0 < x < a). \quad (3.102)$$

Operando as condições de contorno na fronteira da função de onda em $x = 0$, obtemos

$$A + B = F + G, \quad (3.103)$$

e para sua derivada

$$iq_1(A - B) = q_2(F - G) \Rightarrow A - B = -i\sigma(F - G), \quad (3.104)$$

onde $\sigma = q_2/q_1$. Se a partícula foi incidida da esquerda para direita como na subseção anterior, tam-se que $D = 0$ na equação (3.100). Das condições de contorno em $x = a$ temos

$$\begin{cases} Fe^{\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} + Ge^{-\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} = \eta, \\ Fe^{\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} - Ge^{-\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} = \frac{1}{\sigma}\eta, \end{cases} \quad (3.105)$$

onde $\eta = Ce^{i\left[\frac{q_1}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]}$. Resolvendo a equação (3.105) para F e G chegamos

$$\begin{cases} F = \eta \left(\frac{\sigma+i}{2\sigma}\right) e^{-\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]}, \\ G = \eta \left(\frac{\sigma-i}{2\sigma}\right) e^{\left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]}. \end{cases} \quad (3.106)$$

Usando as equações (3.106), (3.103) e (3.104) e as funções hiperbólicas teremos

$$A = \eta \left[\cosh \left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right] + \frac{i}{2} \left(\sigma - \frac{1}{\sigma} \right) \sinh \left[\frac{q_2}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right] \right], \quad (3.107)$$

e

$$B = -\frac{i}{2}\eta \left(\sigma + \frac{1}{\sigma} \right) \sinh \left[\frac{k_2}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right]. \quad (3.108)$$

Portanto, o coeficiente de reflexão fica

$$R_{\gamma_1} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sinh^2 \left[\frac{k_2}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right]}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sinh^2 \left[\frac{k_2}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right]}, \quad (3.109)$$

e o de transmissão

$$T_{\gamma_1} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sinh^2 \left[\frac{k_2}{\gamma} \ln(1 + \gamma a) \right]}. \quad (3.110)$$

Também a soma dos dois coeficientes é 1.

Da mesma forma que examinamos as equações (3.89) e (3.90), os mesmos raciocí-

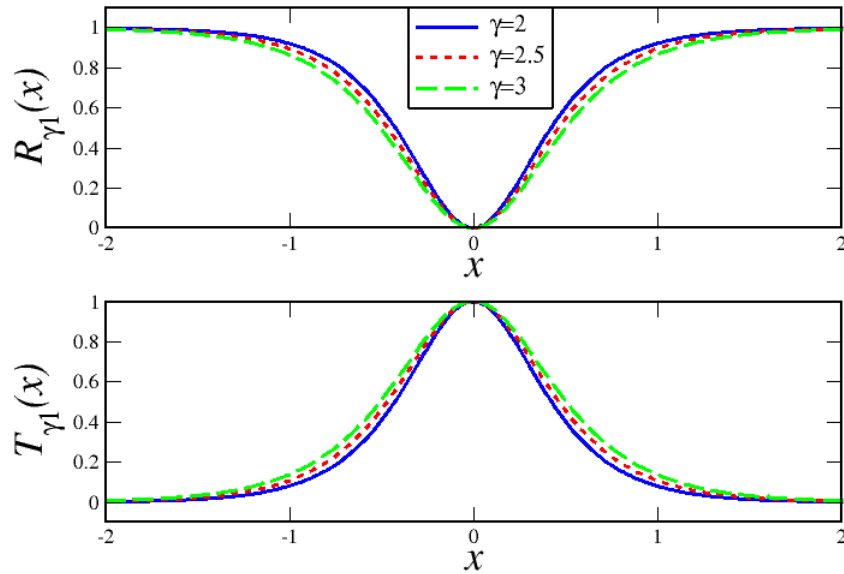


Figura 13 – Gráfico de barreira de potencial para caso linear. Estado ligado ($E < V_0$) nas três regiões: duas externas, $-\frac{1}{\gamma} < x < 0$, $x > a$, e uma interna, $0 < x < a$.

nios valem aqui também para equações (3.109) e (3.110), quando, o $a \rightarrow 0$.

A figura 13 mostra como os parâmetros γ e β dilatam o pico quando são aumentados, e também comprovam a equação (3.38).

Para estados espalhados ($E > V_0$), foi usado o mesmo procedimento usado na seção anterior. Para região externa a equação (3.100) continua válida, e a solução na região interna muda, isto é

$$\psi_4(x) = Me^{\left[\frac{iq_3}{\gamma} \ln(1+\gamma x)\right]} + Ne^{\left[-\frac{iq_3}{\gamma} \ln(1+\gamma x)\right]} \text{ para } (0 < x < a). \quad (3.111)$$

Aplicando as condições de contornos que usamos anteriormente em $x = 0$, temos

$$A + B = F + G, \quad (3.112)$$

e

$$k_1(A - B) = k_2(M - N) \Rightarrow A - B = \rho(M - N), \quad (3.113)$$

onde $\rho = q_3/q_1$. E para $x = a$, as condições do contorno nos leva à

$$\begin{cases} Me^{\left[\frac{iq_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} + Ne^{\left[-\frac{iq_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} = \eta, \\ Me^{\left[\frac{iq_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} - Ne^{\left[-\frac{iq_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a)\right]} = \frac{1}{\rho} \eta. \end{cases} \quad (3.114)$$

Resolvendo a equação (3.114) em função M e N teremos

$$\begin{cases} M = \eta \left(\frac{\rho+1}{2\rho} \right) e^{-i\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a)}, \\ N = \eta \left(\frac{\rho-1}{2\rho} \right) e^{i\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a)}. \end{cases} \quad (3.115)$$

Ao usar a equação (3.115) nas equações (3.112) e (3.113) e resolver para A e B chegamos a

$$A = \eta \left[\cos \left(\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a) \right) - \frac{i}{2} \left(\frac{1}{\rho} + \rho \right) \sin \left(\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a) \right) \right], \quad (3.116)$$

e

$$B = \eta \frac{i}{2} \left(\rho - \frac{1}{\rho} \right) \sin \left[\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a) \right]. \quad (3.117)$$

Finalmente, o coeficiente de reflexão R e de transmissão T ficam

$$R_{\gamma_2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{q_3}{q_1} - \frac{q_1}{q_3} \right)^2 \sin^2 \left[\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a) \right]}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_3}{q_1} - \frac{q_1}{q_3} \right)^2 \sin^2 \left[\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a) \right]}, \quad (3.118)$$

$$T_{\gamma_2} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q_3}{q_1} - \frac{q_1}{q_3} \right)^2 \sin^2 \left[\frac{q_3}{\gamma} \ln(1+\gamma a) \right]}, \quad (3.119)$$

com a soma dos dois coeficientes igual a 1.

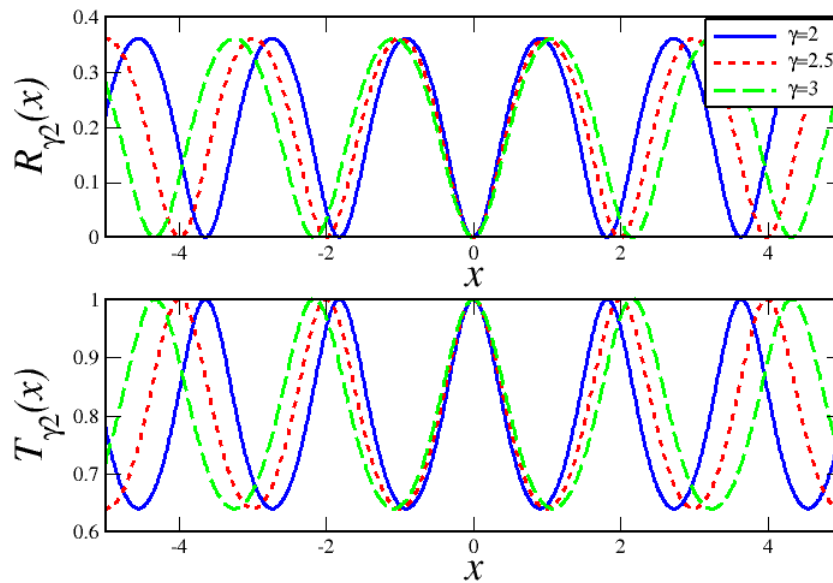


Figura 14 – Gráfico de barreira de potencial para caso linear. Estado de espalhamento ($E > V_0$) nas três regiões: duas externas, $-\frac{1}{\gamma} < x < 0$, $x > a$, e uma interna, $0 < x < a$.

Das equações (3.118) e (3.119), também é notório que quando $a = 0$, a probabilidade de transmissão da partícula é total.

Olhando para figura 14, podemos notar que no caso de estado de espalhamento a probabilidade da partícula ser transmitida sempre vai existir e maior que a de reflexão.

Ao longo deste capítulo, foram resolvidos quatros problemas unidimensionais em que cada um foi resolvido em dois casos no qual denominamos de caso quadrático e linear. No caso quadrático, a equação de Schrödinger depende de dois parâmetros, β e γ , enquanto que no caso linear ele só depende do único parâmetro, γ . Aliás sempre que consideramos o parâmetro $\beta = 0$ em qualquer resultado no caso quadrático o resultado obtido é idêntico ao caso linear.

4 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Nesta dissertação, foi apresentado e aplicado o formalismo da mecânica quântica não-aditiva também chamado de formalismo do operador translação dependente da posição, um formalismo obtido ao tentar entender como a translação do espaço na mecânica quântica depende da métrica.

No capítulo 1, foi feita uma contextualização dos principais conceitos que foram importantes nos capítulos posteriores no qual falamos de alguns trabalhos que foram importantes no desenvolvimento deste formalismo. Além disso foram apresentados em suma o objetivo do trabalho.

No capítulo 2, revisitamos o formalismo matemático do operador translação dependente da posição. Para isso, definimos uma métrica que nos leva a uma nova definição do produto interno e das suas propriedades, que através do qual chegamos a uma nova relação de completude. Além disso, usamos as definições do Braga [5] e Costa et al [11] para operador de translação infinitesimal modificado que nos permite mostrar a não aditividade do deslocamento espacial. Como consequências disso, obtemos dois novos operadores momentos, duas novas relações de comutação entre os operadores posição e momento modificado, e consequentemente, duas equações tipo Schrödinger. A partir destas duas equações tipo Schrödinger, usamos as mudanças de variáveis necessárias e obtemos duas equações mais simplificadas que denominamos de equações de Schrödinger modificadas quadrática e linear, (2.48) e (2.49), respectivamente.

No capítulo 3, foi aplicado o formalismo obtido no capítulo anterior em alguns problemas unidimensionais analogos aos que aparece com muitas frequências nos livros didáticos de mecânica quântica, dos quais foram divididos em seções. Na primeira seção, começamos com o Poço quadrado infinito no qual observamos que aumento em qualquer dos dois parâmetros, γ e β , implica aumento na energia do nosso sistema e, também fica evidente que o aumento do parâmetro γ é mais intensa. Em seguida, na segunda seção, falamos de Poço delta onde é notório que aumento em qualquer dos dois parâmetros, γ e β implica no aumento da probabilidade de transmissão e consequentemente a diminuição da probabilidade de reflexão. Na terceira seção, abordamos o modelo de Kronig-Penny onde verificamos que aumento dos dois parâmetros, γ e β , causam a translação na função de onda que é mais acentuado no aumento do parâmetro γ . Finalmente, na quinta seção, foi a Barreira de potencial no qual foi notório que quando o $a = 0$, a probabilidade de transmissão uma partícula é total, e no caso de estado de espalhamento a probabilidade da partícula ser transmitida sempre vai existir e maior que a de reflexão.

Em suma, este formalismo nos possibilitou entender o comportamento das métricas,

quadrática e linear, e as variações dos parâmetros γ e β nos diferentes problemas da MQ.

Como proposta de trabalhos futuros, ambicionamos estudar aplicação deste formalismo em outros problemas tais como, partículas livres, oscilador harmônico unidimensional e poço duplo. Também ansiamos analisar os comportamentos das métricas pares e ímpares para os termos maiores que nosso termo quadrático, e entender de que forma influenciam nos princípios das incertezas de cada caso. Além disso, também objetivamos trabalhar este formalismo com problemas bidimensionais e tridimensionais. Pesamos também estender nossos estudos em outros sistemas de coordenadas.

REFERÊNCIAS

- [1] Pessoa Junior, O. Histórias contrafactuais: o surgimento da física quântica. *Estudos Avançados*, 14, 39,p. 175-204, 2000.
- [2] A interpretação da mecânica quântica. *Revista eletrônica Com Ciência*, SBPC/Labjor, maio/2001. 2001b.
- [3] O experimento WS de 1950 e as suas implicações para a segunda revolução da mecânica quântica.
- [4] CHIBENI, S. S. O Surgimento da física quântica. São Paulo, [19-?]. Notas de aula do Departamento de Filosofia da Unicamp - IFCH. Disponível em: <https://www.unicamp.br/chibeni/textosdidaticos/fisquantica.pdf>. Acesso em 02 Jun. 2020.
- [5] BRAGA, J. P. M. Mecânica quântica não-aditiva. 2015. 62 f. Tese (Doutorado em Física) - Centro de Ciências, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2015.
- [6] R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics Vol. III: Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1965).
- [7] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, 2nd Edition, 2005).
- [8] PFRIMER, Frederico Rodrigues. Sobre os formalismos matemáticos da mecânica quântica: Dirac, von Neumann e algebra C^* . 2013. 94 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Goiás, Goiânia, 2013.
- [9] J. von Neumann, “Mathematical foundations of quantum mechanics” (Princeton University Press, 1955).
- [10] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addisson-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1994).
- [11] R. N. Costa Filho, M. P. Almeida, G. A. Farias e J. S. Andrade Jr., Displacement Operator for Quantum Systems with Position-dependent Mass, *Phys. Rev. A* 84, 050102-1 - 050102-4 (2011).
- [12] S. H. Mazharimousavi, “Revisiting the displacement operator for quantum systems with position-dependent mass,” *Phys. Rev. A* 85, 034102 (2012).
- [13] R. N. Costa Filho. et al. Morse potential derived from first principles. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 101, p. 10009, 01 2013.
- [14] M. A. Rego-Monteiro and F. D. Nobre,. Classical field theory for a non-Hermitian Schrodinger equation with position-dependent masses, *Phys. Rev. A* 88, 032105 (2013).
- [15] R. N. Costa Filho. et al. Extended uncertainty from first principles. *Physics Letters B*, v. 755,02 2016.
- [16] J. P. Braga and R. N. Costa Filho,. Nonadditive quantum mechanics as a Sturm–Liouville problem, *Int. J. Mod. Phys. C* 27, 1650047 (2016).

- [17] R.A. El-Nabulsi, A new approach to the schrodinger equation with position-dependent mass and its implications in quantum dots and semiconductors. *Eur.Phys. J. P135*, 34 (2020)
- [18] R.A. El-Nabulsi, Dirac Equation with Position-Dependent Mass and Coulomb-like Field in Hausdorff Dimension. *Eur.Phys. J. P135*, 34 (2020)
- [19] R.A. El-Nabulsi, Some implications of three generalized uncertainty relations in statistical mechanics of an ideal gas. *Eur.Phys. J. P135*, 34 (2020).
- [20] B. G. da Costa, I. S. Gomez, M. A. F. dos Santos, *EPL* 129, 10003 (2020).
- [21] DOLCE O., POMPEO J. N. *Fundamentos de Matemática Elementar - Vol. 9 - Geometria Plana - 9ª Ed.* 2013.
- [22] DOLCE O., POMPEO J. N. *Fundamentos de Matemática Elementar - Vol. 10 - Geometria Espacial - 7ª Ed.* 2013.
- [23] Lima, Elon Lages (2013). *Espaços métricos*. Col: Coleção Projeto Euclides 5ª ed. [S.l.]: IMPA. 299 paginas.
- [24] R. N. Costa Filho, G. Alencar, B. Skagerstam and J. S. Andrade Jr., Morse potential derived from first principles *EPL* 101, 10009-p1 - 10009-p4 (2013).
- [25] GASIOROWICZ, Stephen. *Quantum physics*. John Wiley e Sons, 2007.
- [26] D.A.V. Tonidandel e A.E.A. Araújo, A função delta revisitada: De Heaviside a Dirac . *Rev. Bras. Ens. Fis.* v. 37, n. 3, 3306 (2015)
- [27] P. A. M. Dirac R. H. Fowler. The fundamental equations of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 109(752): 642–653, (1925).
- [28] P. A. M. Dirac. On the theory of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 112(762): 661–677, (1926).
- [29] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 117(778): 610–624, (1928).
- [30] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. partii. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 118(779): 351–361, (1928).
- [31] NETO, Bernhard Georg Enders. *ESTRUTURAS PERIÓDICAS*. 1999. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Uberlândia.
- [32] DONANGELO, Raul Jose; CAPAZ, Rodrigo Barbosa. *Introdução Mecânica Quântica*. (2019). Rio de Janeiro: Fundação CECIERJ. 2ª ed. v.1: 125 paginas.
- [33] B. N. Sismanoglu¹, J. C. do Nascimento, E. C. B. de Barros Aragão, Visualizando tunelamento quântico através da geração de microplasmas, *Phys. Rev.* v. 37, n. 1, 1312 (2015).
- [34] STEWART, J. *Cálculo*. 7.ed. Tradução de E. Garibaldi. São Paulo: Cengage Learning, 2013. v.1.
- [35] DA SILVA, C. M.; DA CRUZ, S. R., Complexidade irreduzível da identidade de Euler. *Origem em Revista*. 2018.