

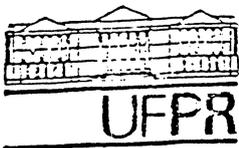
EDUARDO VICENTINI

**FUNÇÃO DE GREEN SEMICLÁSSICA GENERALIZADA:  
APLICAÇÃO A POTENCIAIS CONSTANTES POR PARTES**

Dissertação apresentada ao Departamento de Física como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física. Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Bin Kang Cheng

CURITIBA  
1996



Ministério da Educação  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
Setor de Ciências Exatas  
Departamento de Física

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**ATA DA DEFESA DE TESE DE MESTRADO DO SR. EDUARDO VICENTINI**

**TÍTULO DA TESE: "FUNÇÃO DE GREEN SEMICLÁSSICA GENERALIZADA: APLICAÇÃO  
A POTENCIAIS CONSTANTES POR PARTES"**

**Em sessão pública de Defesa de Tese, iniciada as quatorze horas e trinta minutos, nesta data, após um Seminário sobre o assunto da Tese e arguição pela Banca, esta decidiu atribuir Conceito A**

**Curitiba, 28 de fevereiro de 1996.**

**Banca Examinadora:**

**Prof. Bin Kang Cheng  
Presidente/Orientador-UFPR**

---

**Prof. Marcos Gomes Eleuterio da Luz  
HARYARD UNIVERSITY**

**Profa. Maria Carolina Nemes  
UFMG**

*A Joane pela compreensão e estímulo  
nestes anos de estudo.*

# Agradecimentos

Ao professor Cheng pelos seus ensinamentos e pela confiança e dedicação. Ao amigo Baracho pelo seu companheirismo e pronta disposição. Aos professores e amigos: Cristiano, Marcio e Sérgio pelas sugestões e em especial ao professor Marcos Gomes pelas valiosas discussões que muito contribuíram neste trabalho.

# Resumo

Este trabalho propõe uma modificação na fórmula semiclássica para a função de Green, aplicando em potenciais constantes por partes. Esta modificação consiste em acrescentar um novo fator pré-exponencial à contribuição de cada trajetória clássica possível ao sistema, sendo este composto pelas amplitudes de espalhamento isoladas de cada ponto onde o potencial sofre uma mudança abrupta. Este fator acrescenta à fórmula semiclássica características ondulatórias da partícula, evidentes no processo de espalhamento desta com os potenciais em questão. A fórmula modificada também fornece as amplitudes de espalhamento do sistema e pode ser aplicada, em situações especiais, à potenciais suaves.

# Abstract

This work suggests a modification in the semiclassical formula for the Green's function when applied to piecewise potential. This change consists in the addition of a new pre-exponential factor to the contribution of each possible classical trajectory of the system. This factor is made up of the isolated scattering amplitudes of each point where the potential change abruptly. The quantum behavior of the system, evident in the scattering process, justifies this factor, which enhances the ondulatory characteristics to the semiclassical formula. The modified formula also gives the scattering amplitudes of the system and can be used, in special situations, on smooth potentials.

# Conteúdo

Agradecimentos	i
Resumo	ii
Abstract	iii
Conteúdo	vi
Introdução	1
1 O propagador e a função de Green	3
1.1 O propagador como função de Green . . . . .	3
1.2 O propagador como integral de caminhos . . . . .	7
1.3 A função de Green de energia . . . . .	12
2 Aproximações semiclássicas	17

2.1	A função de onda semiclássica . . . . .	17
2.2	O propagador semiclássico . . . . .	20
2.3	A função de Green semiclássica . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Potencial degrau</b>	<b>24</b>
<b>4</b>	<b>Comprovação do método</b>	<b>33</b>
4.1	A barreira de potencial . . . . .	33
4.2	O poço de potencial finito . . . . .	40
4.3	O potencial delta de Dirac . . . . .	43
4.4	Estados de espalhamento . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Aplicando o método</b>	<b>49</b>
5.1	A barreira de potencial assimétrica . . . . .	49
5.2	O poço de potencial finito e assimétrico . . . . .	52
5.3	Potencial delta de Dirac e degrau acoplados . . . . .	54
5.4	Potencial delta de Dirac e barreira acoplados . . . . .	58
5.5	Poço infinito acoplado com uma barreira . . . . .	60
5.6	Seqüência de potenciais . . . . .	62

<b>6</b>	<b>Discussão</b>	<b>65</b>
	<b>Conclusão</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>Construção esquemática da função de Green</b>	<b>70</b>

# Introdução

Nos últimos anos as aproximações semiclássicas têm exercido tanta influência no estudo dos fenômenos quânticos que alguns autores chamam este período de Mecânica Quântica Pós-Moderna, em contraste com a Mecânica Quântica Antiga e Moderna [1]. Desde os primeiros trabalhos de Wentzel, Kramers e Brillouin (1926), com as equações de onda de Schrödinger e com o propagador semiclássico de Van Vleck (1928), até os trabalhos mais recentes de Gutzwiller (1970) [2], utilizando a função de Green, o sucesso das aproximações semiclássicas se deve a dois principais fatores: conseguem obter resultados, mesmo que aproximados, em problemas difíceis para a Mecânica Quântica, devido à complexidade dos cálculos, e fornecem melhor compreensão do limite clássico destes sistemas.

A função de Green, tanto quanto o propagador, é um recurso cada vez mais valorizado no estudo do comportamento de um sistema quântico, pois possibilita observar melhor a dinâmica do sistema, como por exemplo, o processo de interação da partícula com potenciais e os tempos gastos nestes processos. Dentro da aproximação semiclássica a função de Green também é muito utilizada no estudo de sistemas cujo equivalente clássico apresenta caos.

Devido às características do processo de obtenção das fórmulas semiclássicas, potenciais constantes por partes apresentam problemas justamente no ponto onde ocorre a mudança abrupta do potencial. Este ainda é um grande problema para as aproximações semiclássicas e interessa resolvê-lo, uma vez que estes potenciais são amplamente utilizados na física de semicondutores, modelando interfaces em junções [5].

Neste trabalho é apresentada uma nova forma para a função de Green semiclássica, da

qual é possível obter resultados exatos para potenciais constantes por partes. O capítulo 1 localiza a função de Green na Mecânica Quântica, a partir da definição de propagador. O capítulo 2 apresenta as aproximações semiclássicas para a função de onda (WKB), para o propagador (Van Vleck) e para a função de Green. O capítulo 3 analisa a função de Green exata para o potencial degrau e, a partir de argumentos baseados na compreensão do fenômeno quântico, propõe uma modificação na fórmula semiclássica usual. O capítulo 4 confirma a validade da fórmula modificada para outros potenciais constantes por partes, cujos resultados exatos já foram calculados e se encontram na literatura, e mostra como utilizar mais rapidamente a fórmula para outros potenciais mais complexos. O capítulo 5 aplica a fórmula em diversos potenciais, sendo alguns deles inéditos na literatura, como a barreira assimétrica, o poço retangular assimétrico e o poço duplo retangular. O capítulo 6 discute este novo fator em contraste com as limitações da fórmula semiclássica e amplia sua aplicação para potenciais suaves. Na conclusão enfoca-se o valor do novo método na obtenção de resultados exatos e mostra novas perspectivas.

## Capítulo 1

# O propagador e a função de Green de energia

### 1.1 O propagador como função de Green

A forma integral da equação de Schrödinger, sendo  $t_b > t_a$ , é dada por:

$$\Psi(\mathbf{r}_b, t_b) = \int K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) \Psi(\mathbf{r}_a, t_a) d^3r_a \quad (1.1)$$

onde  $K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a)$  é o propagador e  $\Psi(\mathbf{r}_b, t_b)$  e  $\Psi(\mathbf{r}_a, t_a)$  são funções de onda em dois pontos do espaço-tempo [6]. Conhecendo-se o propagador, o problema quântico está resolvido, pois a função  $\Psi(\mathbf{r}_b, t_b)$  é solução da equação de Schrödinger. Para uma partícula de massa  $m$ , a equação de Schrödinger é dada por:

$$\left[ \mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t_b} \right] \Psi(\mathbf{r}_b, t_b) = 0 \quad (1.2)$$

onde  $\mathcal{H}$  é o operador hamiltoniano, definido como:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}_b, t_b) , \quad (1.3)$$

com  $V(\mathbf{r}_b, t_b)$  representando a energia potencial do sistema e  $\hbar = h/2\pi$ , sendo  $h$  a constante de Planck.

No espaço de configuração , (1.1) tem a seguinte forma:

$$\langle \mathbf{r}_b | \Psi(t_b) \rangle = \int K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) \langle \mathbf{r}_a | \Psi(t_a) \rangle d^3 r_a \quad (1.4)$$

Outra forma de se obter  $|\Psi(t_b)\rangle$ , a partir de  $|\Psi(t_a)\rangle$ , é utilizando-se a relação :

$$|\Psi(t_b)\rangle = \mathcal{U}(t_b, t_a) |\Psi(t_a)\rangle \quad (1.5)$$

onde:

$$\mathcal{U}(t_b, t_a) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{H} dt\right], \quad (1.6)$$

é o operador de evolução temporal.

Multiplicando-se ambos os lados de (1.5) por  $\langle \mathbf{r}_b |$  e valendo-se da completeza:

$$\int |\mathbf{r}_a\rangle \langle \mathbf{r}_a| d^3 r_a = \mathbf{1} \quad (1.7)$$

tem-se:

$$\langle \mathbf{r}_b | \Psi(t_b) \rangle = \int \langle \mathbf{r}_b | \mathcal{U}(t_b, t_a) | \mathbf{r}_a \rangle \langle \mathbf{r}_a | \Psi(t_a) \rangle d^3 r_a \quad (1.8)$$

Comparando (1.8) com (1.4), pode-se identificar o propagador como sendo:

$$K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = \langle \mathbf{r}_b | \mathcal{U}(t_b, t_a) | \mathbf{r}_a \rangle \quad (1.9)$$

Nesta forma o propagador pode ser interpretado como uma amplitude de transição do sistema no estado  $|\mathbf{r}_a\rangle$  no tempo  $t_a$  para o estado  $|\mathbf{r}_b\rangle$  no tempo  $t_b$ .

O propagador também pode ser escrito em função das soluções da equação de Schrödinger. A partir de (1.9) pode-se escrever:

$$K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = \langle \mathbf{r}_b | \mathcal{U}(t_b - t_a) \sum_m |\Psi_m(t_a)\rangle \langle \Psi_m(t_a) | \mathbf{r}_a \rangle \quad (1.10)$$

onde utilizou-se a relação de completeza:

$$\sum_m |\Psi_m(t_a)\rangle \langle \Psi_m(t_a) | = \mathbf{1} \quad (1.11)$$

Desenvolvendo (1.10) obtém-se:

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) &= \sum_m \langle \mathbf{r}_b | \Psi_m(t_b) \rangle \langle \Psi_m(t_a) | \mathbf{r}_a \rangle \\ &= \sum_m \Psi_m^*(\mathbf{r}_b, t_b) \Psi_m(\mathbf{r}_a, t_a) \end{aligned} \quad (1.12)$$

Observando  $K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a)$ , como apresentado em (1.9) ou (1.12), nele não se encontra nada que obrigue  $t_b > t_a$ . Porém, impondo esta condição, introduz-se o conceito de causalidade necessário para a correta interpretação de  $K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a)$  (na verdade,  $t_b < t_a$  é adequadamente interpretado na teoria quântica de campos, quando da descrição do movimento de antipartículas). Assim exposto, é conveniente escrever o propagador como:

$$K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = \Theta(t_b - t_a) K'(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) \quad (1.13)$$

onde  $K'(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a)$  é o propagador válido para qualquer  $t_b$ , como definido em (1.9) e  $\Theta(t_b - t_a)$  é a função Heaviside definida como:

$$\Theta(t_b - t_a) = \begin{cases} 0 & \text{para } t_b < t_a \\ 1 & \text{para } t_b > t_a \end{cases} \quad (1.14)$$

Ao se resolver a equação de Schrödinger para o propagador, como escrito em (1.13), obtém-se:

$$\begin{aligned} \left[ \mathcal{H} - i \hbar \frac{\partial}{\partial t_b} \right] K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) &= \Theta(t_b - t_a) \left[ \mathcal{H} - i \hbar \frac{\partial}{\partial t_b} \right] K'(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) \\ &\quad - i \hbar K'(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) \frac{\partial}{\partial t_b} \Theta(t_b - t_a) \end{aligned} \quad (1.15)$$

$$= -i \hbar \delta(t_b - t_a) K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) \quad (1.16)$$

A primeira parcela do lado direito de (1.15) é nula porque, como se pode ver em (1.12),  $K'(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a)$  pode ser escrito como auto-funções de  $\mathcal{H}$ , que são soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo. O delta de Dirac de (1.16) surge da derivada da função degrau e faz com que todo este lado direito só tenha valor diferente de zero para  $t_b = t_a$ . Em função disto, encontra-se:

$$\left[ \mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t_b} \right] K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = -i\hbar \delta(t_b - t_a) \delta(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a) \quad (1.17)$$

O delta de Dirac em relação à posição é obtido a partir da definição em (1.9), onde o operador de evolução temporal é igual a 1 para  $t_b = t_a$  e  $\langle \mathbf{r}_b | \mathbf{r}_a \rangle = \delta(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)$ .

A equação diferencial em (1.17) satisfaz a equação diferencial de uma função de Green [9].

## 1.2 O propagador como integral de caminhos

Dentro de uma configuração de espaço-tempo, pode-se dividir o intervalo entre  $t_a$  e  $t_b$  em  $N$  partes e escolher  $N - 1$  pontos intermediários entre os pontos extremos  $(\mathbf{r}_b, t_b)$  e  $(\mathbf{r}_a, t_a)$ , conforme mostra a fig. 1.1 (na figura usa-se apenas uma dimensão espacial, mas o mesmo raciocínio é válido para três dimensões). No limite  $N \rightarrow \infty$ , estes pontos definem um caminho  $\mathbf{r}(t)$  que sai de  $\mathbf{r}_a$  no tempo  $t_a$  e chega em  $\mathbf{r}_b$  no tempo  $t_b$ . Para simplificar a notação será usado  $a$  para o ponto  $(\mathbf{r}_a, t_a)$ ,  $b$  para  $(\mathbf{r}_b, t_b)$  e o número  $i$  para o seu ponto  $(\mathbf{r}_i, t_i)$ .

O propagador para um único caminho, como o representado na fig. 1.1, pode ser escrito como [10]:

$$K(b, N - 1)K(N - 1, N - 2) \dots K(2, 1)K(1, a) \quad (1.18)$$

O produto de propagadores em (1.18) deve ser interpretado como a amplitude de probabilidade de um caminho possível de uma partícula sair do ponto  $a$  e chegar no ponto  $b$ . Porém este produto não é a amplitude de probabilidade total  $K(b, a)$ , pois ainda se deve

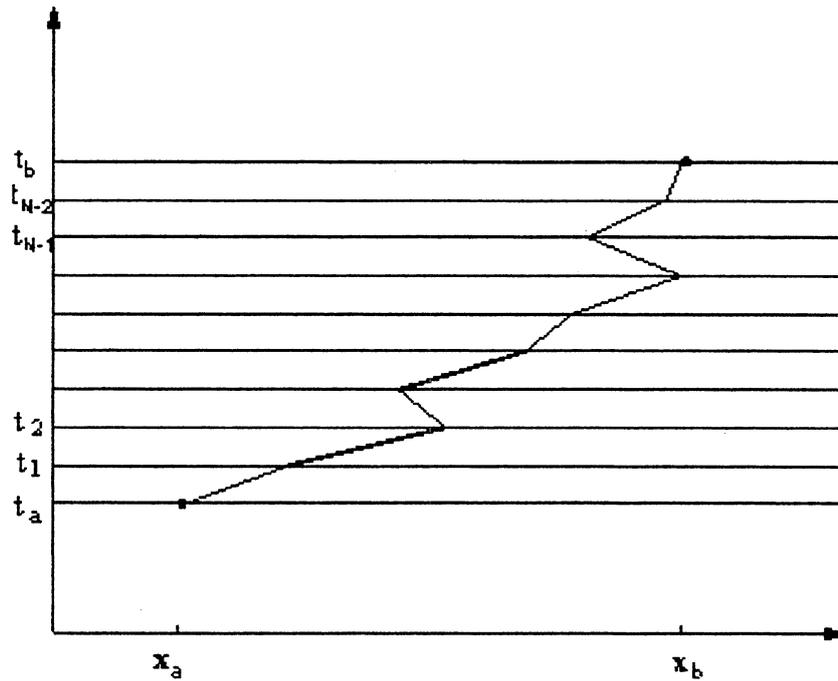


Figura 1.1: Digrama de Feynman, mostrando um possível caminho no espaço-tempo ligando  $(x_a, t_a)$  a  $(x_b, t_b)$ .

integrar cada ponto intermediário em todo o espaço, para que todos os caminhos sejam efetivamente contados.

$$K(b, a) = \int d^3r_{N-1} \int d^3r_{N-2} \dots \int d^3r_2 \int d^3r_1 K(b, N-1) K(N-1, N-2) \dots K(2, 1) K(1, a) \quad (1.19)$$

A expressão em (1.19) já pode ser entendida como uma integral de caminhos.

Feynman pensou o propagador na forma desenvolvida em (1.19): como a ‘soma’ de amplitude de probabilidades referente a cada um dos caminhos possíveis entre  $(r_a, t_a)$  e  $(r_b, t_b)$ . Esta soma pode ser representada como:

$$K(b, a) = \sum_{\substack{\text{todos os} \\ \text{caminhos} \\ \text{possíveis}}} \phi(\mathbf{r}(t)) \quad (1.20)$$

onde  $\phi(\mathbf{r}(t))$  é a amplitude de probabilidade, pois:

$$P(\mathbf{r}(t)) = \phi^*(\mathbf{r}(t)) \phi(\mathbf{r}(t)) \quad (1.21)$$

é a probabilidade de cada caminho.

Aproveitando a sugestão dada por Dirac, em um artigo de 1946, [13, 14], Feynman desenvolveu as amplitudes de probabilidades em função da ação clássica de cada caminho. Relembrando, ação é um funcional definido por [15]:

$$S[\mathbf{r}(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L[\dot{\mathbf{r}}(t), \mathbf{r}(t), t] dt, \quad (1.22)$$

onde  $L$  é a lagrangeana do sistema, dada por:

$$L(\dot{\mathbf{r}}(t), \mathbf{r}(t), t) = \frac{m \dot{\mathbf{r}}(t)^2}{2} - V(\mathbf{r}(t), t) \quad (1.23)$$

e  $V(\mathbf{r}(t), t)$  é a energia potencial do sistema em estudo que, por simplificação, será considerada como função apenas de  $\mathbf{r}$  e  $t$ .

A ação pode ser definida para qualquer caminho ligando  $a$  e  $b$  e, normalmente, pequenas variações em um caminho já produz variações significativas na ação. Sua principal qualidade aparece quando é definida para a trajetória feita por uma partícula clássica, entre os pontos  $a$  e  $b$ . Esta trajetória depende das características descritas pela lagrangeana do sistema

e, neste caso específico, pequenas variações na trajetória da partícula não afetam a ação significativamente, o que permite escrever:

$$\delta S = S[\mathbf{r}(t) + \delta\mathbf{r}(t)] - S[\mathbf{r}(t)] = 0 \quad (1.24)$$

Na expressão acima foram considerados apenas termos de 1.<sup>a</sup> ordem em  $\delta\mathbf{r}(t)$  disto se conclui que o caminho que faz da ação clássica um mínimo (ou um extremo, para ser mais exato) é a trajetória feita por uma partícula clássica. Neste trabalho está sendo utilizado o termo caminho de uma forma mais geral e o termo trajetória para se referir exclusivamente ao caminho que satisfaz (1.24).

Devido às características intrínsecas de um sistema quântico, fica sem sentido classificar um caminho qualquer como a ‘trajetória feita pela partícula’. Por isto Feynman sugeriu que todas as amplitudes de probabilidades dos caminhos possíveis à partícula fossem igualmente prováveis, ou seja, que todas tivessem o mesmo ‘peso’, mas a fase fosse proporcional a ação do caminho a que se refere, na seguinte forma:

$$\phi(\mathbf{r}(t)) = e^{\frac{i}{\hbar}S[\mathbf{r}(t)]} \quad (1.25)$$

Fica claro em (1.25) que a amplitude de cada caminho  $\mathbf{r}(t)$ , apesar de contribuir com fases diferentes, tem a mesma probabilidade, dada por (1.21). Isto foi chamado por Feynman de princípio da democracia.

Assim, a amplitude em (1.25) tem o mesmo significado que o produto em (1.18), considerando o limite  $N \rightarrow \infty$ . Pensando assim já é possível escrever o propagador em (1.20) na forma de integrais de caminho com em (1.19). Porém, um problema ainda permanece: a convergência destas integrais quando se toma o limite de  $N \rightarrow \infty$ .

Ao dividir-se o caminho entre  $a$  e  $b$  em  $N$  partes, na verdade se está subdividindo o intervalo de tempo em  $N$  partes. Chamando cada uma destas subdivisões de  $\epsilon$ , tem-se:

$$\epsilon = \frac{t_b - t_a}{N} . \quad (1.26)$$

Fazendo o mesmo raciocínio que nas integrais de Riemann ordinárias, onde a convergência do integrando é garantida por um fator de normalização, que, no caso, é a própria diferencial que representa a ‘largura’ das subdivisões do intervalo de integração, o integrando do propagador também deve ser multiplicado por fator de normalização proporcional a  $\epsilon$ .

Este fator proporcional a  $\epsilon$  foi deduzido por Feynman no processo de normalização de (1.25). Para isto foi suposto que o sistema tenha uma lagrangeana no tipo da (1.23), ou seja, com energia potencial só dependente de  $\mathbf{r}(t)$  e  $t$ . Chamando de  $C$  esta constante de normalização ele encontrou:

$$C = A^{-N} \quad (1.27)$$

com

$$A = \left( \frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{3/2} . \quad (1.28)$$

Assim, a integral em (1.20) deve ser escrita como:

$$K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \frac{d^3 r_{N-1}}{A} \int \frac{d^3 r_{N-2}}{A} \dots \int \frac{d^3 r_2}{A} \int \frac{d^3 r_1}{A} \prod_{j=1}^N e^{\frac{i}{\hbar} S(j, j-1)} \quad (1.29)$$

sendo que  $j = 0$  equivale ao ponto  $a$  e  $j = N$  ao ponto  $b$ .

Ou, em uma forma mais compacta:

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S(b,a)} \mathcal{D}[\mathbf{r}(t)] , \quad (1.30)$$

que é uma integral de caminho, identificada pelo símbolo  $\mathcal{D}$ .

Feynman definiu o propagador sem utilizar-se das abordagens de Schrödinger e Heisenberg. A partir de sua definição foi possível chegar a resultados já conhecidos da Mecânica Quântica e seu trabalho foi reconhecido como uma terceira abordagem para a mesma.

### 1.3 A função de Green de energia

O propagador, como definido no capítulo anterior, é uma função de Green da variável tempo. Se for considerado apenas os casos onde os tempos finais aparecem no propagador como uma diferença  $\Delta t = t_b - t_a$ , pode-se, sem perda de generalidade, tomar  $t_a = 0$  e  $t_b = t$  (a qualquer momento pode-se fazer  $t = \Delta t$  e retomar a notação anterior). Nestas condições, pode-se tomar a transformada de Laplace do propagador, definida como:

$$G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty K(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a, t) e^{\frac{i}{\hbar} s t} dt \quad (1.31)$$

Aplicando a transformada de Laplace à eq. de Schrödinger para o propagador, em (1.17), tem-se:

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty \left[ \mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; t) e^{\frac{i}{\hbar}st} dt = 0 \quad (1.32)$$

Considerando, inicialmente, o termo da derivada temporal e resolvendo a integral por partes, encontra-se:

$$\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial t} K'(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; t) e^{-\frac{i}{\hbar}st} dt = K'(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; t) e^{\frac{i}{\hbar}st} \Big|_0^\infty + sG(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s) \quad (1.33)$$

Na primeira parcela do lado direito de (1.33), deve-se analisar com detalhes os limites. A variável  $s$  pode ser considerada um número complexo com uma parte imaginária constante e positiva. Assim, no limite  $t \rightarrow \infty$ , este termo será nulo. Para  $t = 0$ , já foi visto no capítulo anterior, na dedução de (2.17), que  $K(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; 0) = \delta(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)$ . Com esta análise, (1.33) pode ser escrito como:

$$\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial t} K'(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; t) e^{\frac{i}{\hbar}st} dt = -\delta(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a) + sG(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s) \quad (1.34)$$

Substituindo (1.34) em (1.32), tem-se:

$$[\mathcal{H} - s] G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s) = -\delta(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a) \quad (1.35)$$

A variável  $s$  está diretamente relacionada com a variável energia, portanto, (1.35) mostra que  $G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s)$  é uma função de Green para a equação de Schrödinger independente do tempo.

$G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s)$  é chamada por muitos autores de função de Green de energia ou função de Green, simplesmente. A fim de simplificar e padronizar a nomenclatura, a expressão

função de Green será utilizada, de agora em diante neste trabalho, para se referir somente a  $G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s)$  e  $K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a)$  será chamado sempre de propagador.

Não existe uma construção para a função de Green como existe para o propagador, como integral de caminhos. Existem, porém, outras formas de obtê-la, utilizando-se métodos alternativos. Estes métodos nem sempre são acessíveis para se determinar o propagador. Portanto, saber obter informações sobre o sistema a partir da função de Green é de grande utilidade.

Antes de falar sobre as informações que se pode obter da função de Green, é importante fazer um curto comentário sobre os outros métodos acessíveis para se determiná-la, uma vez que este trabalho propõe um. Um dos métodos é tentar resolver a equação em (1.35) [16]. Um outro, utilizado por Schulmman [17] e Grosche [18] e foi deduzir a função de Green para sistemas com potenciais acoplados a partir da função de Green, já existente, para um dos potenciais isolados<sup>1</sup>. Outra técnica utiliza-se dos métodos semiclássicos [2, 21, 22].

As possibilidades de explorar a função de Green dependem muito da forma como ela foi obtida. Se não está resolvida a equação de Schrödinger do sistema, ou melhor, não tendo os auto-valores de energia, pode-se utilizar a função de Green para obtê-los. É possível demonstrar que a função de Green contém informações sobre os auto-valores de energia. Para isto basta escrever o propagador como soma das funções de onda do sistema, como em (1.12), e determinar a função de Green utilizando (1.31). Não esquecendo a condição imposta no início do capítulo, onde as variáveis tempo no propagador devem aparecerem como uma diferença  $\Delta t$ . Isto implica que o potencial a que está sujeito o sistema não depende do tempo e as funções de onda podem ser escritas como:

---

<sup>1</sup>Estes dois autores chegaram no mesmo resultado, por caminhos diferentes, para uma fórmula válida apenas para o acoplamento de um potencial Delta de Dirac com um outro, cuja função de Green seja conhecida.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (1.36)$$

onde  $\phi(\mathbf{r})$  é solução da equação de Schrödinger independente do tempo.

E para a função de Green:

$$G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s) = \frac{1}{i\hbar} \sum_m \phi_m^*(\mathbf{r}_a) \phi_m(\mathbf{r}_b) \int_0^\infty e^{\frac{i}{\hbar}(s-E_m)t} dt \quad (1.37)$$

Fazendo as mesmas considerações para  $s$  que em (1.33), tem-se:

$$G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s) = \sum_m \frac{\phi_m^*(\mathbf{r}_a) \phi_m(\mathbf{r}_b)}{s - E_m} \quad (1.38)$$

Sobre o eixo real de  $s$ ,  $G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s)$  apresenta pólos nos auto-valores de energia dos estados ligados. Porém, a dedução acima também pode ser feita para estados contínuos bastando, para isto, trocar o somatório, em (1.12), por uma integral em  $E$ . Neste caso, as energias do sistema contribuirão com cortes no plano complexo  $s$ . Se o sistema apresentar estados ressonantes, estes estados também constituirão pólos em  $G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s)$ , só que para  $s$  fora do eixo real [11].

Por outro lado, se já são conhecidas as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo, pode-se utilizar (1.38) para obter a função de Green. Portanto, (1.8) também constitui um caminho para se obtê-la [19, 20].

Outra potencialidade da função de Green é na obtenção da função de onda propagada, como em (1.1). Basta para isto substituir  $K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a)$  pela transformada inversa de Laplace da função de Green, obtendo assim:

$$\Psi(\mathbf{r}_b, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_a; s) \Psi(\mathbf{r}_a, 0) d\mathbf{r}_a ds \quad (1.39)$$

O fato de, em (1.39), se fazer antes uma integral em  $\mathbf{r}_a$ , envolvendo a função de onda inicial  $\Psi(\mathbf{r}_a, 0)$ , pode facilitar a integral da transformada inversa. Depois da integral em  $\mathbf{r}_a$ , surge mais um pólo e mais um corte. É claro que isto só é possível para poucos casos, porém para os casos onde a integral em  $s$  ainda não é realizável, mesmo depois da integração em  $\mathbf{r}_a$ , sobram ainda as aproximações assintóticas que, apesar de não fornecer uma função de onda propagada exata, mostram o comportamento do sistema no limite da aproximação utilizada [16].

## Capítulo 2

# Aproximações semiclássicas

### 2.1 A função de onda semiclássica

A aproximação semiclássica para a função de onda é discutida em muitos livros textos [6] e é apresentada aqui, de forma sintética, como introdução ao raciocínio semiclássico.

A função de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , solução da equação de Schrödinger, pode ser escrita como:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} e^{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, t)} \quad (2.1)$$

onde

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.2)$$

é a densidade de probabilidade e  $S(\mathbf{r}, t)$  está relacionado com o fluxo de probabilidade, como:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho \nabla S}{m} \quad (2.3)$$

A fase  $S$  tem uma interpretação interessante quando se toma o limite clássico da Mecânica Quântica, que é dado por  $\hbar \rightarrow 0$ . Para aplicar este limite, toma-se a equação de Schrödinger para a função de onda definida em (2.1), obtendo-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \nabla^2 \sqrt{\rho} - \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \nabla^2 S + \frac{2i}{\hbar} \nabla \sqrt{\rho} \cdot \nabla S \right] + V \sqrt{\rho} = i\hbar \left[ \frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right] \quad (2.4)$$

No limite clássico, restam apenas os termos que não contenham  $\hbar$ , que são:

$$\frac{1}{2m} |\nabla S(\mathbf{r}, t)|^2 + V(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (2.5)$$

A equação em (2.5) é conhecida da Mecânica Clássica como a equação de Hamilton-Jacobi e a primeira conclusão que se chega é que, no limite de  $\hbar \rightarrow 0$ , a Mecânica Clássica está contida na Mecânica Ondulatória de Schrödinger. A interpretação semiclássica de  $S$  é que ele é a função principal de Hamilton [15] que é igual a ação definida em (1.22) a menos de uma constante.

Restringindo a análise para um sistema unidimensional e conservativo, a função principal de Hamilton é separável da seguinte forma:

$$S(x, t) = W(x) - E t \quad (2.6)$$

onde  $W(x)$  é chamada de função característica de Hamilton, definida como:

$$W(x) = \int^x p(x') dx' \quad (2.7)$$

Na Mecânica Quântica, sistemas conservativos tem soluções chamadas de estados estacionários, com dependência temporal como mostra (1.36). Para estes casos é possível escrever uma função de onda semiclássica, do tipo da definida em (2.1), como:

$$\Psi_{sc}(x, t) = \left\{ \frac{\text{Const.}}{[|E - V(x)|]^{1/4}} \right\} \exp \left[ \pm \left( \frac{i}{\hbar} \right) \left( \int^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - Et \right) \right] \quad (2.8)$$

sendo o fator pré-exponencial  $\rho(x, t)$  deduzido a partir da equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \frac{\partial S}{\partial x} \right) = 0 \quad (2.9)$$

onde, para estados estacionários,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (2.10)$$

e

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (2.11)$$

A função em (2.8) é conhecida como aproximação WKB<sup>1</sup>.

Retornando a equação de Schrödinger em (2.4), ao se tomar o limite clássico  $\hbar \rightarrow 0$ , está se considerando, por consequência:

---

<sup>1</sup>Devido a G.Wentzel, A.Kramers e L.Brillouin.

$$\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2 . \quad (2.12)$$

Para a função de onda em (2.8), este limite significa:

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}} \ll \frac{2[E - V(x)]}{|\partial V/\partial x|} , \quad (2.13)$$

ou seja, o lado direito, que é um comprimento de onda de de Broglie, deve ser pequeno comparado com as distâncias em que o potencial tem variação apreciável. Para potenciais constantes, (2.8) é um bom resultado, já para outros potenciais, ele só fornece bons resultados para pequenos comprimentos de onda.

A solução WKB também é válida para regiões classicamente proibidas e, neste caso,  $W(x)$  é imaginário e a amplitude da função de onda em nada se altera. Apenas nos pontos de retorno clássico que a amplitude apresentará singularidades, violando a condição em (2.13). Resolve-se este problema encontrando soluções apropriadas da eq.de Schrödinger na região próxima aos pontos de retorno.

## 2.2 O propagador semiclássico

O limite semiclássico para o propagador também é obtido com  $\hbar \rightarrow 0$ . Neste limite, a ação varia muito rapidamente entre os vários caminhos possíveis, fazendo com que as amplitudes de probabilidade que representam estes caminhos se cancelem mutuamente (veja definição (1.30)) e apenas a trajetória clássica e os caminhos próximos à ela sobrevivam. Isto se deve ao fato da ação da trajetória clássica ser um extremo no espaço de trajetórias e, por isto, as variações para os caminhos próximos a ela são pequenas, mesmo comparadas

com  $\hbar$ .

O processo matemático correto para se tomar o limite clássico é expandir a ação em (1.30) em torno da trajetória clássica até o termo de segunda ordem, negligenciando os termos de ordem superior. O termo de ordem mais baixa é a própria ação da trajetória clássica, o termo de primeira ordem é nulo, como já foi citado no capítulo 1, em (1.24) e o termo de segunda ordem foi calculado por Marston Morse na década de 20 e 30 [21, 22]. Morse demonstrou que, para intervalos de tempo pequenos, a variação de segunda ordem é positiva e, portanto, a ação da trajetória clássica é um mínimo. Neste termo de segunda ordem existem uma série de tempos distintos que são chamados de conjugados de  $t_a$  (tempo inicial) e a medida que o intervalo de tempo aumenta, a segunda variação adquire um autovalor negativo cada vez que  $t_b$  (tempo final) passa por um tempo conjugado. Portanto, para intervalos de tempo maiores, a ação da trajetória clássica é classificada como um ponto de sela no espaço dos caminhos possíveis. Morse também demonstrou que este termo é quadrático.

Depois de feita a expansão até segunda ordem, a integração sobre  $dq_i$  pode ser efetuada, uma vez que este termo é quadrático. Como solução final, utilizando-se coordenadas generalizadas, obtém-se:

$$K_{sc}(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = \sum_{\substack{\text{trajetórias} \\ \text{clássicas}}} (2\pi i\hbar)^{-f/2} \sqrt{M} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(q_b, t_b; q_a, t_a) - \kappa \frac{\pi}{2}\right) \quad (2.14)$$

onde

$$M = \det\left(-\frac{\partial^2 S}{\partial q_b \partial q_a}\right) \quad (2.15)$$

provém do termo de segunda ordem da aproximação ,  $\kappa$ , chamado de índice de Morse, é o número de tempos conjugados no intervalo  $t_b - t_a$  e  $f$  é a dimensão do espaço. Esta fórmula para o propagador semiclássico foi primeiro obtida por Van Vleck em 1928 [ref] .

## 2.3 A função de Green semiclássica

A função de Green semiclássica é obtida tomando a transformada de Laplace, como em (1.31), da fórmula de Van Vleck em (2.14), ou seja,

$$G_{sc}(q_b, q_a; E) = \int_0^\infty K_{sc}(q_b, q_a; E) e^{\frac{i}{\hbar}Et} dt \quad (2.16)$$

Efetuar a transformada em (2.16) não é um trabalho simples. A principal contribuição da integral em (1.31) vem da vizinhança, na variável tempo, onde a fase  $[S(q_b, t_b; q_a, t_a) + Et]/\hbar$  varia muito pouco, considerando o limite clássico ( $S \gg \hbar$ ). Desenvolve-se agora uma aproximação de fase estacionária e chega-se na seguinte expressão para a função de Green semiclássica:

$$G_{sc}(q_b, q_a; E) = \sum_{\substack{\text{trajetórias} \\ \text{clássicas}}} \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{(f+1)/2}} \sqrt{D} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(q_b, q_a; E) - i\mu\frac{\pi}{2}\right) \quad (2.17)$$

onde

$$D = \frac{1}{|\dot{q}_b||\dot{q}_a|} \det' \left( -\frac{\partial^2 S}{\partial q_b \partial q_a} \right) , \quad (2.18)$$

$$S(q_a, q_b; E) = \int_{q_a}^{q_b} p dq \quad (2.19)$$

e  $\mu$  é o número de pontos conjugados entre  $q_b$  e  $q_a$ , com energia constante  $E$ .

A expressão  $\det'$  em (2.18) indica a omissão da primeira linha e coluna da matriz. Este determinante é igual a 1 para sistemas unidimensionais.  $S$ , como definida em (2.19) é a ação integral de Euler e Maupertuis (também está relacionada com a função característica de Hamilton, conforme mostra (2.7)). De agora em diante, neste trabalho, como só será utilizada a função de Green, a expressão ação se referirá apenas a definida acima, em (2.19).

A expressão em (2.17) fornece bons resultados para alguns casos, como a partícula livre, que fornece resultado exato e poço de potencial, que determina boa aproximação para os níveis quânticos.

## Capítulo 3

### A função de Green para o potencial degrau: base para uma modificação no método semiclássico.

Pode-se definir o potencial degrau como:

$$V(x) = V_1 \Theta(x), \quad (3.1)$$

onde  $\Theta(x)$  é a função de Heaviside, como definida em (1.14).

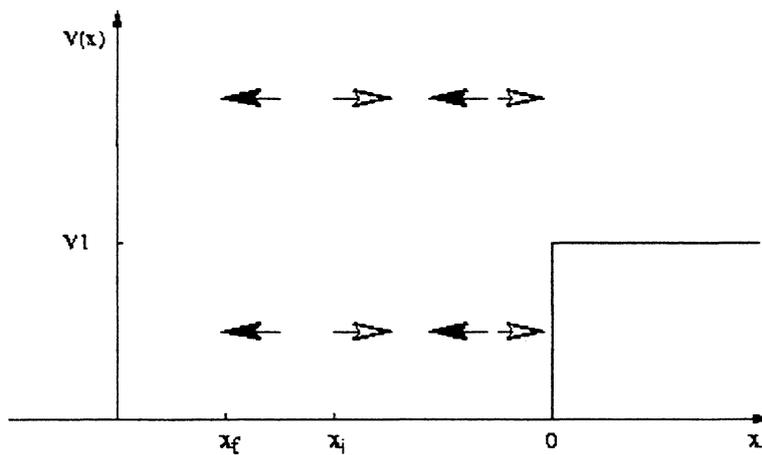


Figura 3.1: Dois caminhos indiretos refletindo no ponto  $x = 0$ . Um com energia menor que  $V_1$  e outro com energia maior.

A função de Green para um potencial degrau já existe calculada na literatura [20, 25]

e pode ser escrita como:

$$G_{-+}^{(deg)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} T_i \exp[ik_1 x_f - ik_0 x_i] \quad (3.2)$$

$$G_{+-}^{(deg)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_1\hbar^2} T_o \exp[-ik_0 x_f + ik_1 x_i] \quad (3.3)$$

$$G_{--}^{(deg)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0 |x_f - x_i|] + R_o \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (3.4)$$

$$G_{++}^{(deg)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_1\hbar^2} \left\{ \exp[ik_1 |x_f - x_i|] + R_i \exp[ik_1(x_f + x_i)] \right\} \quad (3.5)$$

onde

$$T_i = \frac{2k_0}{k_0 + k_1} \quad (3.6)$$

$$T_o = \frac{2k_1}{k_0 + k_1} \quad (3.7)$$

$$R_o = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1} \quad (3.8)$$

$$R_i = \frac{k_1 - k_0}{k_0 + k_1} = -R_o \quad (3.9)$$

com

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3.10)$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}} \quad (3.11)$$

Os sinais ‘+’ e ‘-’ que aparecem junto ao símbolo da função de Green indicam em que região se encontram as posições inicial e final da partícula. O primeiro sinal se refere a

posição inicial e o segundo, a final. O sinal ‘-’ indica que a posição a que se refere está antes do potencial degrau, ou seja,  $x < 0$  e o sinal ‘+’ depois do ‘degrau’,  $x > 0$ . Por exemplo:  $G_{-+}$  indica  $x_i < 0$  e  $x_f > 0$ .

Para proceder a análise semiclássica, calcula-se a ação de cada uma das trajetórias clássicas entre  $x_f$  e  $x_i$ . Como se está trabalhando com um potencial constante por partes, a ação, como definida em (2.19), terá integrando constante por partes também. Assim, é possível escrever:

$$S(x_f, x_i; k) = \hbar \int_{x_i}^{x_f} k(x) dx = \hbar \sum_j k_j d_j \quad (3.12)$$

onde os  $d_j$  's são as distâncias percorridas pela partícula em diferentes regiões, que são caracterizados pelos respectivos  $k_j$  's. Para o potencial degrau pode-se agrupar os caminhos clássicos em quatro grupos, conforme a região onde ficam as posições inicial e final:

a) para  $x_i < 0$  e  $x_f > 0$

$$S_{-+}^{(d)} = \hbar(k_1 x_f - k_0 x_i) \quad (3.13)$$

b) para  $x_i > 0$  e  $x_f < 0$

$$S_{+-}^{(d)} = \hbar(-k_0 x_f + k_1 x_i) \quad (3.14)$$

c) para  $x_i$  e  $x_f < 0$  (dois caminhos)

$$\begin{aligned} S_{--}^{(d)} &= \hbar k_0 |x_f - x_i| \\ S_{--}^{(i)} &= -\hbar k_0 (x_f + x_i) \end{aligned} \quad (3.15)$$

d) para  $x_i$  e  $x_f > 0$  (dois caminhos)

$$\begin{aligned} S_{++}^{(d)} &= \hbar k_1 |x_f - x_i| \\ S_{++}^{(i)} &= \hbar k_1 (x_f + x_i) \end{aligned} \quad (3.16)$$

As letras ‘d’ e ‘i’ classificam os caminhos em direto e indireto, respectivamente. Estes caminhos serão melhor descritos adiante.

Comparando-se a função de Green exata em (3.2)-(3.5) com (3.13)-(3.16), verifica-se que a fase da exponencial corresponde a ação clássica de cada trajetória feita por uma partícula, dividido por  $\hbar$ , como previsto pela fórmula semiclássica em (2.17) e (2.19). Porém, os fatores pré-exponenciais não tem a mesma correspondência. É possível ter uma pista de como adequar tais fatores para este caso, o degrau, observando as funções de Green em (3.4) e (3.5). Nelas aparecem bem claro, além da ação clássica do caminho direto e do indireto, o fator pré-exponencial  $\sqrt{D}$ , definido em (2.18). Apenas que, na parcela referente ao caminho indireto, aparece um fator pré-exponencial  $R$  a mais<sup>1</sup>. Sem se preocupar com uma justificativa, pode-se escrever uma fórmula semiclássica para estas funções de Green, incluindo este fator  $R$ , da seguinte forma:

$$G_{sc,++}^{(deg)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} \left[ \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{--}^{(d)}\right\} + R_i \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{--}^{(i)}\right\} \right] \quad (3.17)$$

A primeira parcela em (3.17), referente a contribuição do caminho direto, é a função de Green da partícula livre, que já foi demonstrado ser a fórmula semiclássica exata [21].

---

<sup>1</sup>É esperado também uma mudança de fase dada pelo índice de Morse, devido a um ponto conjugado que aparece na reflexão em  $x = 0$  (veja discussão no capítulo 2). Porém, este índice será considerado incorporado a este fator  $R$ .

Para entender melhor os limites de validade das aproximações semiclássicas, é importante saber que estas deixam de funcionar bem quando o sistema começa a apresentar características exclusivamente quânticas, como tunelamento, por exemplo. Alguns autores [23, 24] já fizeram comparações entre o propagador exato e o semiclássico (fórmula de Van Vleck), em sistemas bidimensionais e interpretaram os termos extras, que aparecem na fórmula exata, como devidos ao processo de difração quântica. O fator pré-exponencial  $\sqrt{M}$  (veja definição (2.15)), que provém da contribuição de segunda ordem dos caminhos próximos à trajetória clássica, não dá conta destes fenômenos. No caso da função de Green semiclássica, o fator pré-exponencial  $\sqrt{D}$  também é insuficiente para abranger toda a fenomenologia quântica. Pode-se supor que, se fosse possível descobrir que aspectos quânticos a aproximação semiclássica não vê, em um determinado sistema, poder-se-ia complementar tal aproximação e fazê-la exata.

Para uma partícula interagindo com um potencial degrau, supondo  $x_i$  e  $x_f < 0$ , pode-se fazer a seguinte análise:

- (a) ao se considerar apenas o aspecto corpuscular da partícula, tem-se duas trajetórias clássicas, uma direta de  $x_i$  até  $x_f$  e outra possível indireta, onde a partícula sai de  $x_i$  para a direita, reflete em  $x = 0$  e retorna até  $x_f$  se sua energia for menor que a do potencial degrau para  $x > 0$  (fig.3.1),
- (b) porém sabe-se que, da análise quântica, existe sempre a possibilidade de reflexão da partícula no potencial degrau, independente se a energia daquela for maior ou menor que o degrau, sendo esta possibilidade representada pelo coeficiente de reflexão<sup>2</sup>.

O item (a), acima, norteia a construção das contribuições das trajetórias. Para incluir

---

<sup>2</sup>Na Mecânica Clássica existe algo parecido no tratamento matemático de uma onda e, mesmo considerando que na Clássica o coeficiente de reflexão tenha uma interpretação física diferente que na Quântica, pode-se notar que ele é um dos indicadores do comportamento ondulatório da partícula.

o item (b), deve-se fazer a seguinte consideração: quando a trajetória em análise intercepta o potencial no ponto de descontinuidade, sua contribuição deve se dividir em uma parte transmitida e outra refletida. Como, no momento, só se está interessado na parte refletida, só ela deve constar no somatório das contribuições. Porém, esta contribuição deve ter um ‘peso’ diferente daquela referente ao caminho direto, que não intercepta o ponto  $x = 0$ . Este peso deve ser a amplitude de probabilidade de reflexão no potencial degrau, cujo módulo ao quadrado é o coeficiente de reflexão. Aguiar mostrou [20] que este fator  $R_o$  que aparece na fórmula exata é, de fato, esta amplitude. Assim, é possível justificar a fórmula semiclássica em (3.17) afirmando que o caminho indireto deve existir independente da energia da partícula e deve conter a amplitude de reflexão do potencial degrau como um fator pré-exponencial. Com isto inclui-se, na aproximação semiclássica, algo do comportamento quântico que estava faltando. Pela analogia com a onda clássica, este comportamento quântico pode ser atribuído à característica ondulatória da partícula. Para  $x_i$  e  $x_f > 0$  pode-se fazer o mesmo raciocínio. Apenas deve-se utilizar a amplitude de reflexão deste caso, que é  $R_i$ .

Resta agora saber se esta única modificação feita na fórmula semiclássica, que é o acréscimo de um fator que represente a amplitude de espalhamento (reflexão, no caso) no potencial degrau, é suficiente para descrever todo o fenômeno quântico que a fórmula exata descreve. Isto pode ser verificado observando-se as funções de Green exatas em (3.2) e (3.3), onde está implícito que  $x_i$  e  $x_f$  estão em meios diferentes em relação ao potencial degrau. Ao se fazer a análise semiclássica, verifica-se que existe apenas um caminho clássico possível para cada caso, conforme mostra (3.13) e (3.14), desde que  $E > V_1$ . Por analogia com o caso acima analisado, espera-se que o termo que represente este caminho, na fórmula semiclássica, tenha como fator pré-exponencial a amplitude de transmissão no potencial degrau e exista independentemente da energia da partícula. Esta amplitude realmente aparece na fórmula exata e é dada pelos termos  $T_i$  e  $T_o$  em (3.2) e (3.3), respectivamente.

Porém, um novo problema surge: o fato das posições inicial e final estarem em meios diferentes faz com que o fator  $\sqrt{D}$  tenha a seguinte forma:

$$\sqrt{D} = \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k_1 k_0}} \quad (3.18)$$

e este termo não aparece na fórmula exata.

Para que a fórmula semiclássica, nos moldes de (3.17), fique igual a exata, deve-se escrevê-la como:

$$G_{sc, \pm\pm}^{(deg)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} \left| \frac{\dot{x}_d}{\dot{x}_a} \right|^{1/2} T_i \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} S_{\pm\pm}^{(d)} \right\} \quad (3.19)$$

onde  $\dot{x}_d$  é a velocidade da partícula depois de passar pelo ponto onde o potencial degrau muda de valor e  $\dot{x}_a$  a velocidade da partícula antes deste ponto.

O termo  $|\dot{x}_d/\dot{x}_a|^{1/2}$  em (3.19) é conhecido da Mecânica Quântica quando do tratamento adequado do coeficiente de transmissão<sup>3</sup> [7]. Com mais este termo, também justificado no comportamento ondulatório da partícula, já é possível propor uma fórmula para a construção da função de Green semiclássica para o potencial degrau, válida para todos os casos:

$$G_{sc}^{(deg)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{1}{i\hbar} \sum_j \sqrt{D} A \exp\left[ \frac{i}{\hbar} S_j \right] \quad (3.20)$$

A fórmula em (3.20) pode ser construída acompanhando o seguinte método:

---

<sup>3</sup>Este termo também tem uma analogia na Mecânica Clássica: seu quadrado é o índice de refração entre dois meios.

- (a) a função de Green continua sendo uma soma de números complexos, cada um relacionado a um caminho  $j$ . Os caminhos são todas as trajetórias clássicas possíveis, com a mesma energia, ligando  $x_i$  a  $x_f$ . Porém, é permitido que estes caminhos penetrem em regiões classicamente proibidas e sofram reflexões no degrau, mesmo com energia maior que este;
- (b) a fase da exponencial é a ação referente ao caminho dividido por  $\hbar$ . Se o caminho penetrar em uma região classicamente proibida, a ação referente a esta parte do caminho será complexa;
- (c) o fator pré-exponencial  $\sqrt{D}$  já foi discutido anteriormente e é obtido da contribuição de segunda ordem dos caminhos próximos a trajetória clássica;
- (d) o fator  $A$  é uma amplitude de espalhamento do caminho no potencial degrau. Se o caminho analisado reflete no potencial,  $A$  é a amplitude de reflexão, se ele atravessa,  $A$  é a amplitude de transmissão vezes a raiz quadrada do módulo da razão entre as velocidades antes e depois de atravessar o potencial. Esta razão entre velocidades não aparece junto ao coeficiente de reflexão porque não existe mudança de velocidade antes e depois da reflexão. Se o caminho não sofre nenhum tipo de espalhamento no potencial, então  $A = 1$ .

Na descrição deste método utiliza-se o termo “caminho” como um ente isolado da partícula. Apesar destes “caminhos” serem construídos em analogia com a trajetória feita por uma partícula clássica, não quer dizer que a partícula em estudo faz qualquer um destes “caminhos” e quando se fala que um “caminho” interage com o potencial, também não se está afirmando que a partícula sofre esta interação. Estes “caminhos”, apesar de muito vinculados a intuição física, constituem apenas um artifício que nos ajuda a construir a função de Green e entender os fenômenos quânticos.

Pode-se afirmar que a fórmula em (3.20) é suficiente para tratar qualquer potencial cons-

tante por partes, uma vez que este tipo de potencial pode ser decomposto em vários degraus. Para isto, basta que se compute corretamente todas as trajetórias clássicas possíveis entre  $x_i$  e  $x_f$  e faça com que o fator pré-exponencial  $A$  contenha todas as amplitudes de espalhamento dos diversos degraus por onde passa o caminho analisado. Nos próximos capítulos esta análise será demonstrada em diversos potenciais.

## Capítulo 4

# Comprovação do método

### 4.1 A barreira de potencial

Pode-se definir a barreira de potencial (fig. 4.1) como:

$$V(x) = V_1 [\Theta(x) - \Theta(x - a)] \quad (4.1)$$

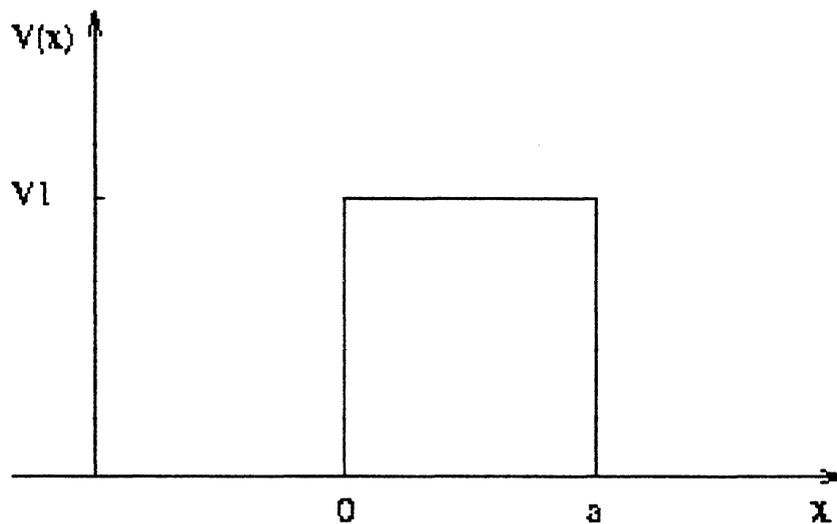


Figura 4.1: Barreira de potencial simétrica

Este potencial também pode ser pensado como a combinação de dois potenciais degrau

como mostra a fig. 4.2. O lado esquerdo da barreira, se olhado isoladamente, é um degrau do tipo  $V_1(x) = V_1 \Theta(x)$  e o lado direito,  $V_2(x) = V_1 \Theta(-x + a)$ .

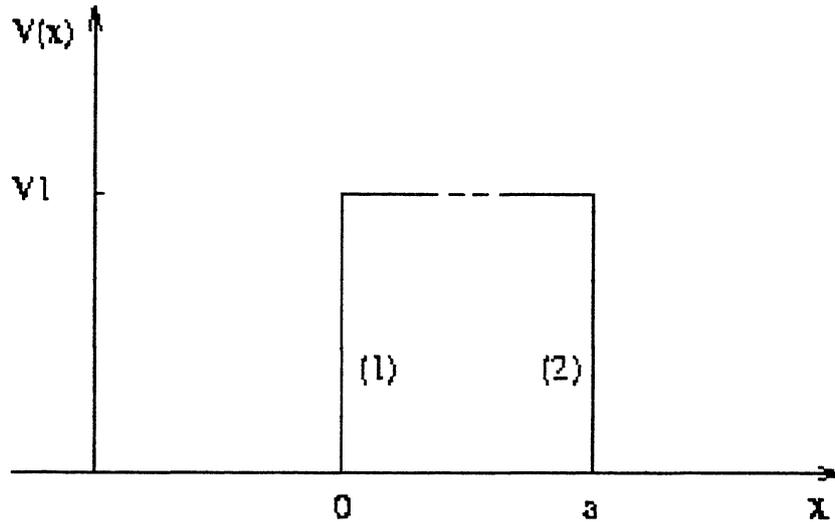


Figura 4.2: Barreira de potencial simétrica dividida em dois potenciais degrau.

Para se construir a função de Green semiclássica para a barreira, deve-se computar os caminhos seguindo todas as trajetórias clássicas com mesma energia entre  $x_i$  e  $x_f$ , considerando também caminhos que penetrem dentro da barreira, onde a energia da partícula é menor que  $V_1$ . Toda vez que um caminho sofrer uma interação com o lado esquerdo da barreira, este lado será tratado como se fosse o potencial degrau  $V_1(x)$  e toda vez que interagir com o lado direito, será tratado como se fosse o potencial degrau  $V_2(x)$ . Assim pode-se utilizar o mesmo método desenvolvido no capítulo 3 e resumido na fórmula (3.20).

As amplitudes de espalhamento para os potenciais degrau,  $V_1(x) = V_2(x)$  são as mesmas definidas em (3.6)-(3.9), pois trata-se do mesmo potencial.  $k_0$  e  $k_1$  também são os mesmos definidos em (3.10) e (3.11).

Não é importante saber, neste primeiro momento, se a energia da partícula é menor ou maior que o potencial em alguma região, pois isto não afetará nem na determinação dos fatores pré-exponenciais, nem no comprimento de cada caminho. Apenas será encontrado

um número de onda  $k_j$  imaginário ou real, conforme o caso, para esta região (veja fórmula (3.12)). Considerando primeiro o caso onde  $x_i < 0$  e  $x_f > a$ , tem-se um caminho direto que sai de  $x_i$  com um número de onda  $k_0$ , interage com o degrau (1) no ponto  $x = 0$  (fig. 4.2), atravessa a região entre 0 e  $a$  com número de onda  $k_1$ , interage com o potencial degrau (2) no ponto  $x = a$  e continua até  $x_f$  agora com número de onda  $k_0$ .

Seguindo a sequência descrita acima pode-se escrever a função de Green para este único caminho clássico. Para melhor utilizar o método do capítulo 3, a contribuição deste caminho clássico será dividido em partes conforme as regiões em que o potencial permanece constante e a contribuição total será o produto destas partes. Cada parte do caminho terá sua respectiva ação e fatores pré-exponenciais. Apenas o fator  $\sqrt{D}$  será único para o caminho inteiro, pois ele se refere apenas às posições inicial e final. Assim, tem-se:

$$\begin{aligned}
 G_{sc,-+}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0; 1 \text{ caminho}) &= \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} \exp[ik_0(0 - x_i)] \\
 &\quad \times \left| \frac{\dot{x}_1}{\dot{x}_0} \right|^{1/2} T_{1i} \exp[ik_1(a - 0)] \\
 &\quad \times \left| \frac{\dot{x}_0}{\dot{x}_1} \right|^{1/2} T_{2o} \exp[ik_0(x_f - a)] \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

onde o número 1 e 2 no subíndice das amplitudes de espalhamento indicam o potencial degrau a que se referem e os subíndices de  $\dot{x}$  indicam a região conforme o potencial. No caso, 0 se refere a região com potencial nulo e 1, a região com potencial  $V_1$ .

Pode-se observar que cada parte em (4.2) é semelhante a forma em (3.20), mas o caminho como um todo guarda a forma exata. É só escrevê-lo da seguinte forma:

$$G_{sc,-+}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0; 1 \text{ caminho}) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} A \exp[ik_0(0 - x_i) + ik_1(a - 0) + ik_0(x_f - a)] \quad (4.3)$$

com

$$A = \left| \frac{\dot{x}_1}{\dot{x}_0} \right|^{1/2} T_{1i} \left| \frac{\dot{x}_0}{\dot{x}_1} \right|^{1/2} T_{2o} \quad (4.4)$$

Quando foi mencionado acima que o caminho “interage” com um lado da barreira (ou com o potencial degrau), queria-se dizer “atravessa” aquele lado da barreira. Esta possibilidade é representada com a amplitude de transmissão do potencial degrau. Porém esta “interação” poderia ser uma reflexão também. Considerando o seguinte caminho: começa em  $x_i$ , atravessa o degrau em  $x = 0$ , reflete no potencial em  $x = a$ , reflete novamente no potencial em  $x = 0$ , atravessa o potencial em  $x = a$  e chega em  $x_f$ . Neste caminho tem-se duas reflexões dentro do potencial antes de continuar até o final. Este caminho está representado na fig. 4.3. Pode-se também considerar outros caminhos com mais reflexões internas. Na verdade tem-se infinitos caminhos possíveis entre  $x_i$  e  $x_f$ . A função de Green é então a soma das contribuições de cada caminho clássico, ou seja:

$$G_{sc,-+}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} \exp[ik_0(0 - x_i)] \left| \frac{\dot{x}_1}{\dot{x}_0} \right|^{1/2} T_{1i} \exp[ik_1 a] \times \left( \sum_{n=0}^{\infty} [R_{2i} R_{1i}]^n \exp[ik_1 2na] \right) \left| \frac{\dot{x}_0}{\dot{x}_1} \right|^{1/2} T_{2o} \exp[ik_0(x_f - a)] \quad (4.5)$$

Efetuando a soma em (4.5) e substituindo  $\sqrt{D}$ , tem-se:

$$G_{sc,-+}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \frac{T_{1i} T_{2o} \exp[ik_1 a]}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \exp[ik_0(x_f - x_i - a)] \quad (4.6)$$

Substituindo as amplitudes de espalhamento dos degraus, definidas em (3.6), (3.7) e (3.9), em (4.6), obtém-se:

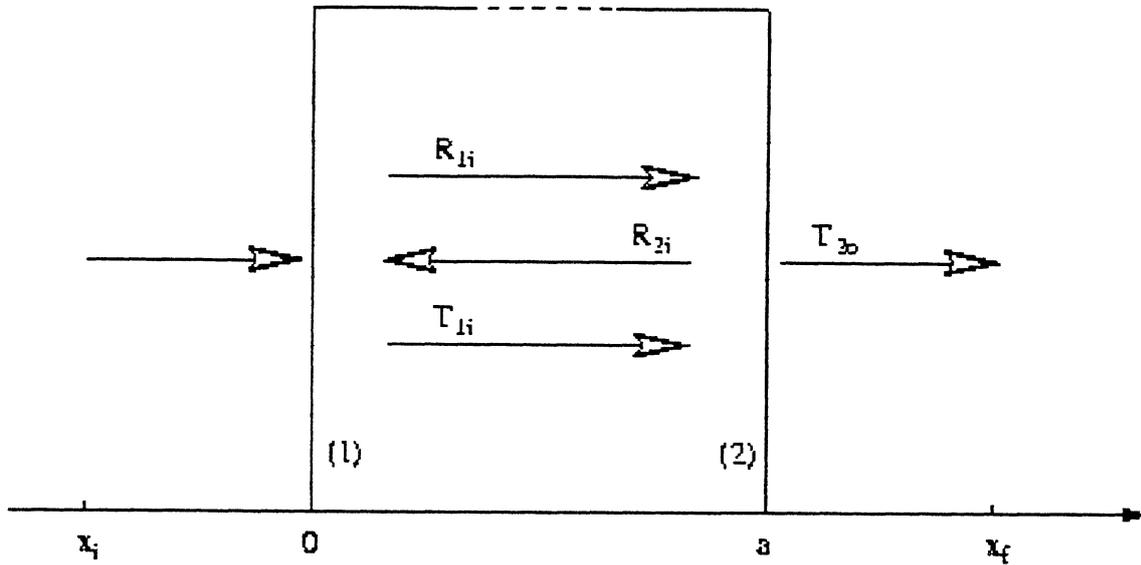


Figura 4.3: Caminho esquemático entre  $x_i$  e  $x_f$  com duas reflexões internas

$$G_{-+}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} f_{-+} \exp[ik_0(x_f - x_i - a)] \quad (4.7)$$

onde

$$f_{-+} = \frac{2k_0k_1}{d_1} \quad (4.8)$$

e

$$d_1 = 2k_0k_1 \cos(k_1a) - i(k_1^2 + k_0^2) \sin(k_1a) \quad (4.9)$$

Antes de discutir este resultado, será calculada a função de Green para outros casos. Para  $x_f$  e  $x_i < 0$ , será utilizado o mesmo processo. Deve-se lembrar que, neste caso, existe um caminho direto isolado, sem interação com o degrau, e um caminho indireto que interage apenas com um dos lados da barreira, o degrau (1). Computando todos os

caminhos tem-se:

$$\begin{aligned}
G_{sc,--}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) &= \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + R_{1o} \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right. \\
&\quad + \exp[ik_0(0 - x_i)] \left| \frac{\dot{x}_1}{\dot{x}_o} \right|^{1/2} T_{1i} R_{2o} \exp[ik_1 2a] \left( \sum_{n=0}^{\infty} [R_{1i} R_{2i}]^n \right. \\
&\quad \left. \left. \times \exp[ik_1 2na] \right) \left| \frac{\dot{x}_0}{\dot{x}_1} \right|^{1/2} T_{1o} \exp[ik_0(0 - x_f)] \right\} \quad (4.10)
\end{aligned}$$

Efetando a soma em (4.10):

$$\begin{aligned}
G_{--}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) &= \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + \left( R_{1o} + \frac{T_{1i} R_{2i} T_{1o} \exp[ik_1 2a]}{1 - R_{1i} R_{2i} \exp[ik_1 2a]} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \\
&= \frac{m}{ik\hbar^2} \left\{ \exp[ik|x_f - x_i|] + f_{--} \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (4.11)
\end{aligned}$$

onde

$$f_{--} = \frac{i(k_1^2 - k_0^2) \text{sen}(k_1 a)}{d1} \quad (4.12)$$

Pode-se agora construir a função de Green rapidamente para outros casos:

para  $x_i > a$  e  $x_f < 0$

$$\begin{aligned}
G_{+-}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) &= \frac{m}{ik_0\hbar^2} \frac{T_{2i} T_{1o} \exp[ik_1 a]}{1 - R_{1i} R_{2i} \exp[ik_1 2a]} \exp[-ik_0(x_f - x_i + a)] \\
&= \frac{m}{ik_0\hbar^2} f_{-+} \exp[-ik_0(x_f - x_i)] \quad (4.13)
\end{aligned}$$

e para  $x_i$  e  $x_f > a$

$$\begin{aligned}
G_{++}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) &= \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + \left( R_{2o} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{T_{2i} R_{1i} T_{2o} \exp[ik_1 2a]}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \right) \exp[ik_0(x_f + x_i)] \right\} \\
&= \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + f_{--} \exp[ik_0(x_f + x_i - 2a)] \right\} \quad (4.14)
\end{aligned}$$

Pode-se também determinar a função de Green para posições inicial ou final dentro da barreira. É calculado o caso onde  $x_i < 0$  e  $0 < x_f < a$ .

$$\begin{aligned}
G_{sc,-0}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) &= \frac{m}{ik_0\hbar^2} \exp[-ik_0 x_i] \left\{ \frac{T_{1i}}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \exp[ik_1 x_f] \right. \\
&\quad \left. + \frac{T_{1i} R_{2i} \exp[ik_1 a]}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \exp[-ik_1(x_f - a)] \right\} \quad (4.15)
\end{aligned}$$

ou, com as devidas substituições:

$$G_{-0}^{(\text{bar})}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \exp[-ik_0 x_i] \left\{ f_{-0}^- \exp[ik_1(x_f - a)] + f_{-0}^+ \exp[-ik_1(x_f - a)] \right\} \quad (4.16)$$

com

$$f_{-0}^- = \frac{2k_0(k_1 + k_0)}{d1} \quad (4.17)$$

$$f_{-0}^+ = \frac{2k_0(k_1 - k_0)}{d1} \quad (4.18)$$

As funções de Green em (4.7), (4.11), (4.13), (4.14) e (4.16) são exatas [16, 20], por isto nelas deixou-se de usar a notação “sc”. Isto mostra a validade deste método para uma barreira de potencial simétrica.

## 4.2 O poço de potencial finito

Pode-se definir o poço de potencial finito (fig.4.4) como:

$$V(x) = -V_1 [\Theta(-x) - \Theta(-x + a)] \quad (4.19)$$

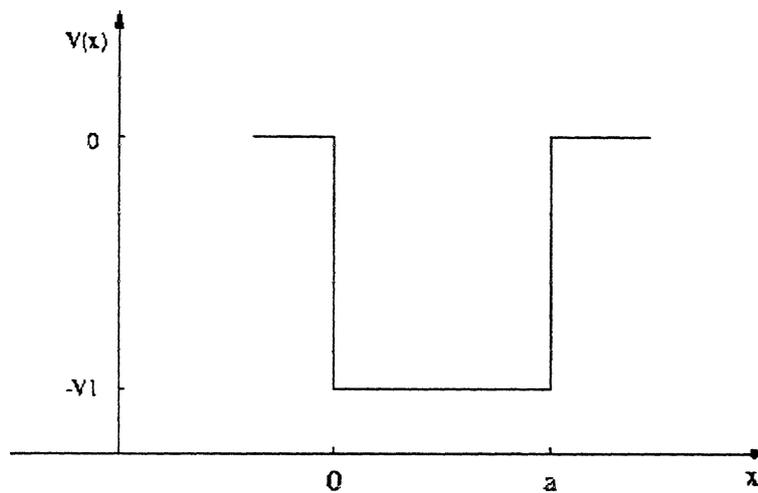


Figura 4.4: poço de potencial

A função de Green para o poço poderia ser obtida a partir da função de Green da barreira, bastando para isto trocar o sinal de  $V_1$ . Porém ele será calculado distintamente da barreira para que também se torne uma demonstração de como utilizar o método apresentado no capítulo anterior.

Este potencial também pode ser dividido em dois degraus, conforme mostra a fig. 4.5. O lado esquerdo do poço é o potencial degrau  $V_1(x) = V_1 [\Theta(-x) - 1]$  e o lado direito é o

potencial degrau  $V_2(x) = V_1 [\Theta(x - a) - 1]$ .

Será calculada a função de Green apenas para um caso especial de maior interesse, que é para a partícula dentro do poço, com  $0 < x_i$  e  $x_f > a$  e energia  $0 < -E < -V_1$ . Assim, os números de onda para cada região, são:

$$i\mu_0 = i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (4.20)$$

$$k'_{11} = \sqrt{\frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}} \quad (4.21)$$

$$(4.22)$$

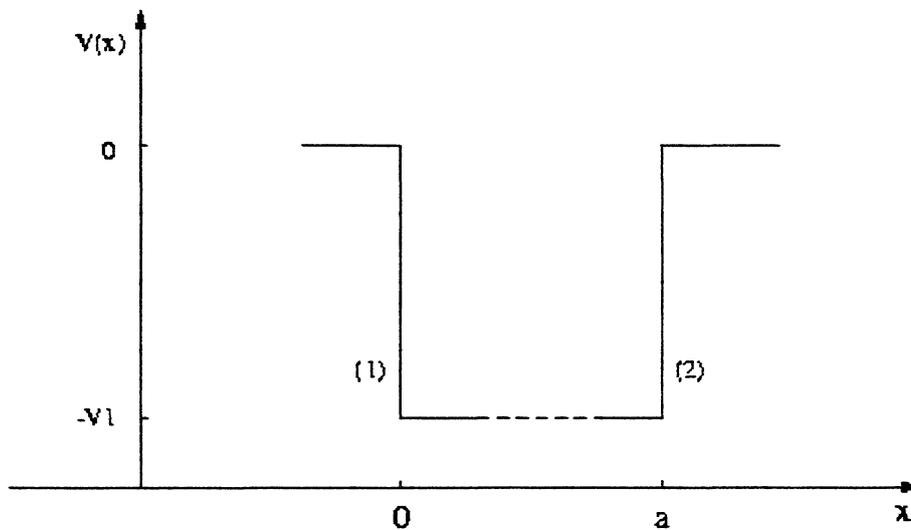


Figura 4.5: Poço de potencial dividido em dois potenciais degrau

São utilizadas apenas as amplitudes de reflexão nos degraus (1) e (2) dadas por:

$$R'_{1o} = R'_{2o} = \frac{k'_{11} - i\mu_0}{k'_{11} + i\mu_0} \quad (4.23)$$

A função de Green semiclássica terá a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
G_{sc,00}^{(poço)}(x_f, x_i; \mu_0) &= \frac{m}{ik'_1 \hbar^2} \frac{1}{1 - R'_{1o} R'_{2o} \exp[ik'_1 2a]} \left\{ \exp[ik'_1(x_f - x_i)] \right. \\
&\quad + R'_{1o} \exp[ik'_1(x_f + x_i)] + R'_{2o} \left( \exp[-ik'_1(x_f + x_i - 2a)] \right. \\
&\quad \left. \left. + R'_{1o} \exp[-ik'_1(x_f - x_i - 2a)] \right) \right\} \quad (4.24)
\end{aligned}$$

Substituindo (4.23) em (4.24) tem-se:

$$\begin{aligned}
G_{00}^{(poço)}(x_f, x_i; \mu_0) &= -\frac{m}{k'_1 \hbar^2} \frac{2}{d_2} \left\{ [k'_1 \cos k'_1(x_f - a) - \mu_0 \sin k'_1(x_f - a)] \right. \\
&\quad \left. \times [k'_1 \cos k'_1 x_i + \mu_0 \sin k'_1 x_i] \right\} \quad (4.25)
\end{aligned}$$

com

$$d_2 = 2k'_1 \mu_0 \cos k'_1 a - (k'^2_1 - \mu_0^2) \sin k'_1 a \quad (4.26)$$

O resultado em (4.25) é idêntico ao calculado por Crandall [25], utilizando outra técnica, constituindo mais uma demonstração da validade do método proposto.

Os pólos de (4.25) fornecem os níveis de energia do sistema. Neste ponto é interessante notar que os estados ligados tem uma relação com os caminhos de múltiplo espalhamento da análise semiclássica. Quando se faz  $d_2 = 0$ , esta se fazendo também (veja eq. (4.24)

$$R'_{1o} R'_{2o} \exp[ik'_1 2a] = 1 . \quad (4.27)$$

Para se conseguir efetuar a soma de todos os caminhos clássicos, pressupõem-se a convergência do somatório (veja eq. (4.5)). Como se trata de uma soma geométrica, na

condição em (4.27) não existe tal convergência, indicando que, para os estados ligados, os caminhos de múltiplo espalhamento tem maior contribuição que para outros estados.

### 4.3 O potencial delta de Dirac

O potencial delta de Dirac pode ser definido como:

$$V(x) = \lambda \delta(x) \quad (4.28)$$

onde  $\lambda$  é uma constante de acoplamento e  $\delta(x)$  é a função delta de Dirac, assim definida:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{para } x = 0 \\ 0 & \text{para } x \neq 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (4.30)$$

Aparentemente o potencial delta de Dirac não pode ser dividido em degraus, condição necessária para a aplicação do método. Porém, já é conhecido que uma barreira de potencial pode ser aproximada a um potencial delta de Dirac [20]. Pode-se observar isto aplicando em uma barreira de potencial, como a definida em (4.1), o seguinte limite:

$$\begin{array}{l} a \rightarrow 0 \\ e \\ V1 \rightarrow \infty \end{array} \quad (4.31)$$

com a condição :

$$V1 a = \lambda \text{ (constante)} \quad (4.32)$$

Fazendo isto, a barreira se transforma em um potencial delta de Dirac, obedecendo as definições em (4.29) e (4.30) e as funções de Green deduzidas em (4.7), (4.11), (4.13) e (4.14), passam a ser:

$$G_{-+}^{(\text{delta})}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} g_{-+} \exp[ik_0(x_f - x_i)] \quad (4.33)$$

$$G_{--}^{(\text{delta})}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + g_{--} \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (4.34)$$

$$G_{+-}^{(\text{delta})}(x_f, x_i; k_0) = G_{-+}^{(\text{delta})}(x_i, x_f; k_0) \quad (4.35)$$

$$G_{++}^{(\text{delta})}(x_f, x_i; k_0) = G_{--}^{(\text{delta})}(x_f, x_i; k_0) \quad (4.36)$$

onde

$$g_{-+} = \frac{1}{1 + \gamma} \quad (4.37)$$

$$g_{--} = -\frac{\gamma}{1 + \gamma} \quad (4.38)$$

com

$$\gamma = \frac{im\lambda}{k_0\hbar^2} \quad (4.39)$$

A funções de Green definidas em (4.33)-(4.36) são exatas e, apesar de não ser utilizado o método semiclassico para deduzi-las, a próxima seção mostra sua relação com ele.

## 4.4 Estados de espalhamento

A solução da equação de Schrödinger para potenciais constantes por partes é obtida através dos estados de espalhamento [7]. Para uma barreira de potencial, como a definida em (4.1), e considerando a partícula inicialmente na região  $x < 0$  e se deslocando da esquerda para a direita, estes estados podem ser escritos como:

$$\psi(x) = \frac{1}{N} \begin{cases} e^{ik_0x} + R_b e^{-ik_0x} & \text{para } x < 0 \\ \beta_b^- e^{ik_1x} + \beta_b^+ e^{-ik_1x} & \text{para } 0 < x < a \\ T_b e^{ik_0x} & \text{para } x > a \end{cases} \quad (4.40)$$

onde  $N$  é uma constante de normalização,  $R_b$  é a amplitude de reflexão na barreira,  $T_b$  a amplitude de transmissão e  $\beta_b^+$  e  $\beta_b^-$  são amplitudes internas ao potencial.

Estes estados de espalhamento podem ser obtidos a partir da função de Green. Tomando-se as funções de Green para a barreira, descritas em (4.7), (4.11) e (4.16) e fazendo-se  $x_i = 0$ ,  $x_f = x$  e  $N = ik_0\hbar^2/m$  obtem-se (4.40), com a relação :

$$T_b = f_{-+} e^{-ik_0a} \quad (4.41)$$

$$R_b = f_{--} \quad (4.42)$$

$$\beta_b^\pm = f_{-0}^\pm e^{\pm ik_1a} \quad (4.43)$$

É interessante notar que, se as posições inicial e final não estiverem dentro da barreira, pode-se utilizar a fórmula (3.20) para determinar a função de Green para a barreira mais rapidamente, sem necessidade de contar os caminhos internos à ela. Por exemplo, se  $x_i < 0$  e  $x_f > a$  pode-se contar apenas um caminho direto de  $x_i$  a  $x_f$  com uma interação com a barreira, descrita pela amplitude de transmissão  $f_{-+}$ . Nos moldes da fórmula (3.20), a

função de Green, para este caso, é:

$$G_{sc,-+}^{(bar)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} A \exp[ik_0(x_f - x_i - a)] \quad (4.44)$$

sendo

$$A = f_{-+} \quad (4.45)$$

Aqui não foi o termo  $|x_a/x_i|^{1/2}$  que normalmente acompanha a amplitude de transmissão porque o meio depois da transmissão é o mesmo que antes dela. Portanto, este termo terá valor igual a 1 e a fase  $\exp[-ik_0a]$ , que também faz parte da amplitude de transmissão, está presente na ação. É interessante notar que a ação irá conter a distância entre  $x_i$  e  $x_f$ , subtraída do comprimento da barreira.

Para o caso onde  $x_i$  e  $x_f < 0$ , tem-se dois caminhos: um direto de  $x_i$  a  $x_f$  sem interação com a barreira e outro indireto, com interação com a barreira. A interação agora é descrita pela amplitude de reflexão  $f_{--}$ . A função de Green semi-clássica conterà, então, estes dois caminhos, e terá a forma:

$$G_{sc,--}^{(bar)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{1}{i\hbar} \sqrt{D} \left\{ A_1 \exp[ik_0|x_f - x_i|] + A_2 \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (4.46)$$

onde

$$A_1 = 1 \quad e \quad (4.47)$$

$$A_2 = f_{--} \quad (4.48)$$

Pode-se fazer a mesma análise para o potencial delta de Dirac. Supondo a partícula partindo de  $x < 0$ , da esquerda para a direita, os estados de espalhamento são dados por:

$$\psi(x) = \frac{1}{N} \begin{cases} e^{ik_0x} + R_\delta e^{-ik_0x} & \text{para } x < 0 \\ T_\delta e^{ik_0x} & \text{para } x > 0 \end{cases} \quad (4.49)$$

sendo  $R_\delta$  a amplitude de reflexão no potencial delta e  $T_\delta$  a amplitude de transmissão.

Para este caso serão utilizadas as funções de Green (4.33) e (4.34) e novamente será feito  $x_i = 0$ ,  $x_f = x$  e  $N = ik_0\hbar^2/m$ , obtendo (4.49) com:

$$T_\delta = g_{-+} \quad e \quad (4.50)$$

$$R_\delta = g_{--} \quad (4.51)$$

Aqui também se verifica que a função de Green para o potencial delta de Dirac pode ser escrita diretamente através da fórmula (3.20), dispensando o uso do potencial degrau. Para  $x_i$  e  $x_f$  em semi-eixos diferentes, separados pelo potencial delta, conta-se apenas um caminho direto, com o fator pré-exponencial  $A = g_{-+}$  e para  $x_f$  e  $x_i$  no mesmo semi-eixo, o caminho indireto terá o fator  $A = g_{--}$ .

Todo potencial constante por partes pode ser construído como uma combinação de degraus, como se estes degraus formassem blocos de encaixe. Porém, a partir dos resultados deste capítulo, pode-se incrementar o método para torná-lo mais prático. Para isto será acrescentado mais dois tipos de blocos de encaixe: a barreira e o delta de Dirac.

A fórmula (3.20) continua válida, bem como o método. O fator pré-exponencial  $A$  deverá conter todas as amplitudes de espalhamento dos potenciais base por onde passe o

caminho em análise. Se uma das interações do caminho é um degrau,  $A$  deve conter a amplitude que represente o tipo de espalhamento que sofreu neste degrau. Se neste mesmo caminho houve uma interação com um potencial delta de Dirac, acrescenta-se a respectiva amplitude de espalhamento. O mesmo se aplica para a barreira de potencial, desde que não exista um ponto extremo do caminho ( $x_i$  ou  $x_f$ ) dentro dela. Se isto ocorrer, deve-se dividir a barreira em dois degraus e considerar todos os caminhos internos como em (4.14)<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Observando a função de Green em (4.16), para  $x_f$  dentro da barreira, observa-se que ela tem uma forma parecida com a fórmula (3.20) se for considerado apenas os fatores pré-exponenciais, porém, o argumento do número complexo não é mais a ação clássica. Para evitar mais adaptações no método é preferível dividir a barreira em dois degraus.

## Capítulo 5

# Aplicando o método

### 5.1 A barreira de potencial assimétrica

Pode-se definir a barreira de potencial assimétrica como:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_1 & 0 < x < a \\ V_2 & x > a \end{cases} \quad (5.1)$$

com  $V_1 > V_2$  (fig. 5.1).

Para se utilizar a fórmula semiclássica, o potencial será dividido em dois degraus como foi feito para o cálculo da barreira simétrica. Neste caso o lado esquerdo da barreira assimétrica é o potencial degrau  $V_1(x) = V_1 \Theta(x)$  e o lado direito,  $V_2(x) = [V_1 - V_2] \Theta(-x + a) - V_2$ .

As amplitudes de espalhamento para o potencial degrau  $V_1(x)$  são as mesmas definidas em (3.6)-(3.9), pois trata-se do mesmo potencial e para o potencial degrau  $V_2(x)$  tem-se:

$$T_{2i} = \frac{2k_2}{k_1 + k_2} \quad (5.2)$$

$$T_{2o} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (5.3)$$

$$R_{2i} = -R_{2o} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad (5.4)$$

com  $k_0$  e  $k_1$  já definidos em (3.10) e (3.11) e

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}} \quad (5.5)$$

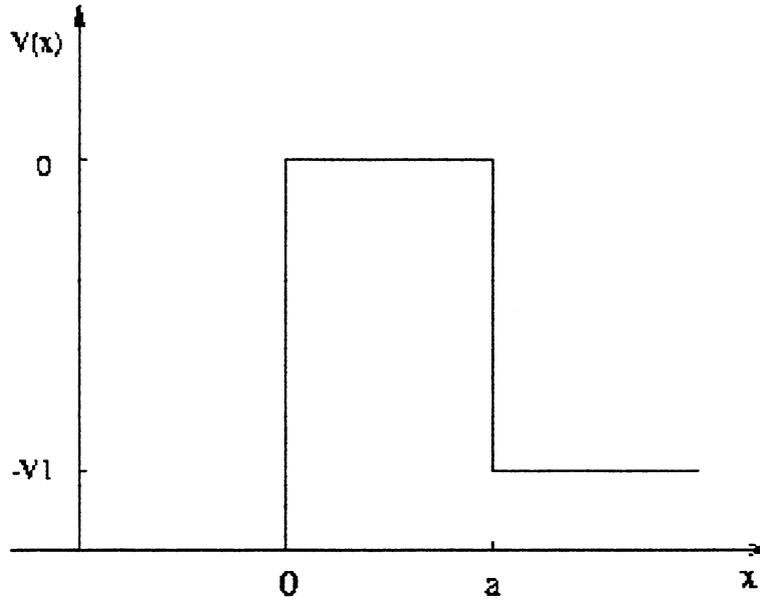


Figura 5.1: Barreira de potencial assimétrica

O procedimento aqui também é igual ao desenvolvido para a barreira simétrica e as funções de Green semiclássicas tem a forma:

$$G_{sc,-+}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \frac{T_{1i} T_{2o} \exp[ik_1 a]}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \exp[ik_2(x_f - a) - ik_0 x_i] \quad (5.6)$$

$$G_{sc,--}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + \left( R_{1o} + \frac{T_{1i} R_{2i} T_{1o} \exp[ik_1 2a]}{1 - R_{1i} R_{2i} \exp[ik_1 2a]} \right) \times \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (5.7)$$

$$G_{sc,+-}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_2\hbar^2} \frac{T_{2i} T_{1o} \exp[ik_1 a]}{1 - R_{1i} R_{2i} \exp[ik_1 2a]} \exp[-ik_0 x_f + ik_2(x_i - a)] \quad (5.8)$$

$$G_{sc,++}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_2\hbar^2} \left\{ \exp[ik_2|x_f - x_i|] + \left( R_{2o} + \frac{T_{2i} R_{1i} T_{2o} \exp[ik_1 2a]}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \right) \times \exp[ik_2(x_f + x_i)] \right\} \quad (5.9)$$

$$G_{sc,-0}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \exp[-ik_0 x_i] \left\{ \frac{T_{1i}}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \exp[ik_1 x_f] + \frac{T_{1i} R_{2i} \exp[ik_1 a]}{1 - R_{2i} R_{1i} \exp[ik_1 2a]} \exp[-ik_1(x_f - a)] \right\} \quad (5.10)$$

Substituindo as respectivas amplitudes de espalhamento obtém-se:

$$G_{-+}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} h_{-+} \exp[ik_2(x_f - a) - ik_0 x_i] \quad (5.11)$$

$$G_{--}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + h_{--} \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (5.12)$$

$$G_{+-}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_2\hbar^2} h_{+-} \exp[-ik_0 x_f + ik_2(x_i - a)] \quad (5.13)$$

$$G_{++}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_2\hbar^2} \left\{ \exp[ik_2|x_f - x_i|] + h_{++} \exp[ik_2(x_f + x_i - 2a)] \right\} \quad (5.14)$$

$$G_{-0}^{(b-ass)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \exp[ik_0 x_i] \left\{ h_{-0}^- \exp[ik_1(x_f - a)] + h_{-0}^+ \exp[-ik_1(x_f - a)] \right\} \quad (5.15)$$

onde

$$h_{-+} = \frac{2k_0 k_1}{d^3} \quad (5.16)$$

$$h_{--} = \frac{k_1(k_0 - k_2)\cos(k_1 a) + i(k_1^2 - k_0 k_2)\sin(k_1 a)}{d_3} \quad (5.17)$$

$$h_{+-} = \frac{k_2}{k_0} h_{-+} \quad (5.18)$$

$$h_{++} = \frac{k_1(k_2 - k_0)\cos(k_1 a) + i(k_1^2 - k_0 k_2)\sin(k_1 a)}{d_3} \quad (5.19)$$

$$h_{-0}^+ = \frac{k_0(k_1 - k_2)}{d_3} \quad (5.20)$$

com

$$d_3 = k_1(k_0 + k_2)\cos(k_1 a) - i(k_1^2 + k_0 k_2)\sin(k_1 a) \quad (5.21)$$

Importante observar que  $h_{-+}$  e  $h_{+-}$ , a menos da fase  $e^{-ik_2 a}$ , são amplitudes de transmissão e  $h_{--}$  e  $h_{++}$  são amplitudes de reflexão.

## 5.2 O poço de potencial finito e assimétrico

Pode-se definir o poço de potencial assimétrico como (fig. 5.2):

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ -V1 & \text{para } 0 < x < a \\ -V2 & \text{para } x > a \end{cases} \quad (5.22)$$

O procedimento aqui será idêntico ao feito para o poço simétrico: será considerado o caso de maior interesse onde  $0 < x_i$  e  $x_f > a$ , com energia  $-V2 < -E < -V1$ . Para o cálculo da função de Green divide-se a barreira em dois degraus, sendo a amplitude de reflexão no degrau esquerdo, chamado de (1), igual a definida em (4.23) e a amplitude de reflexão no potencial degrau do lado direito, (2), igual a:

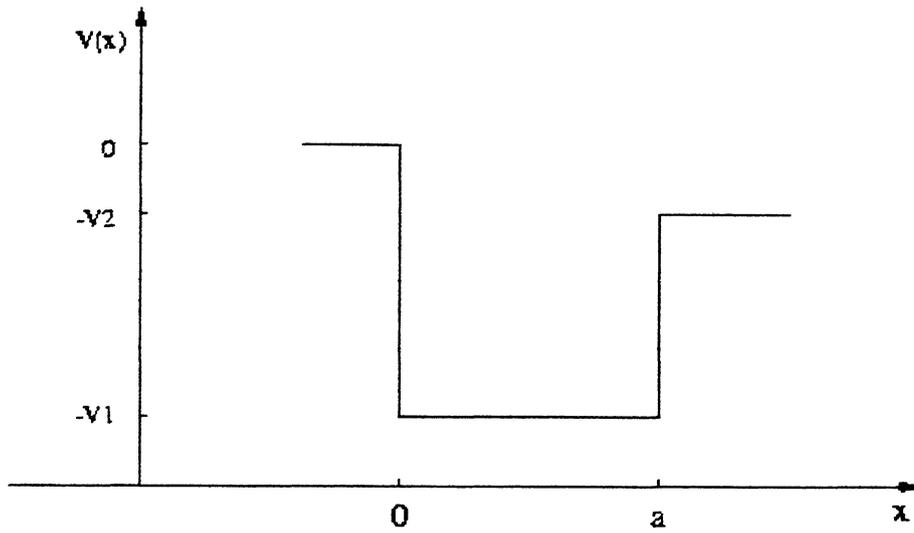


Figura 5.2: poço de potencial assimétrico

$$R_{20} = \frac{k'_{1} - i\mu_2}{k'_{1} + i\mu_2} \quad (5.23)$$

com

$$\mu_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}} \quad (5.24)$$

A função de Green semiclássica terá a mesma forma que em (4.24), porém utiliza-se a amplitude  $R_{20}$  definida em (5.23). Como resultado final tem-se:

$$G_{00}^{(p-ass)}(x_f, x_i; \mu_0) = -\frac{m}{k'_{1}\hbar^2} \frac{2}{d_4} \left\{ [k'_{1} \cos k'_{1}(x_f - a) - \mu_2 \sin k'_{1}(x_f - a)] \right. \\ \left. \times [k'_{1} \cos k'_{1}x_i + \mu_0 \sin k'_{1}x_i] \right\} \quad (5.25)$$

com

$$d_4 = k'_{11}(\mu_0 + \mu_2) \cos k'_{11}a - (k'_{11}{}^2 - \mu_0\mu_2) \sin k'_{11}a \quad (5.26)$$

Os pólos de (5.25), ou seja, os valores de  $E$  que façam  $d_2 = 0$  fornecem os níveis de energia do sistema. Se  $V_1 = V_2$ , (5.25) reduz-se à (4.21), como era esperado.

### 5.3 Potencial delta de Dirac e degrau acoplados

Pode-se definir o potencial, que constitui em um acoplamento de um potencial delta de Dirac e um degrau (fig. 5.3), como:

$$V(x) = \lambda\delta(x) + V_1 \Theta(x - a) \quad (5.27)$$

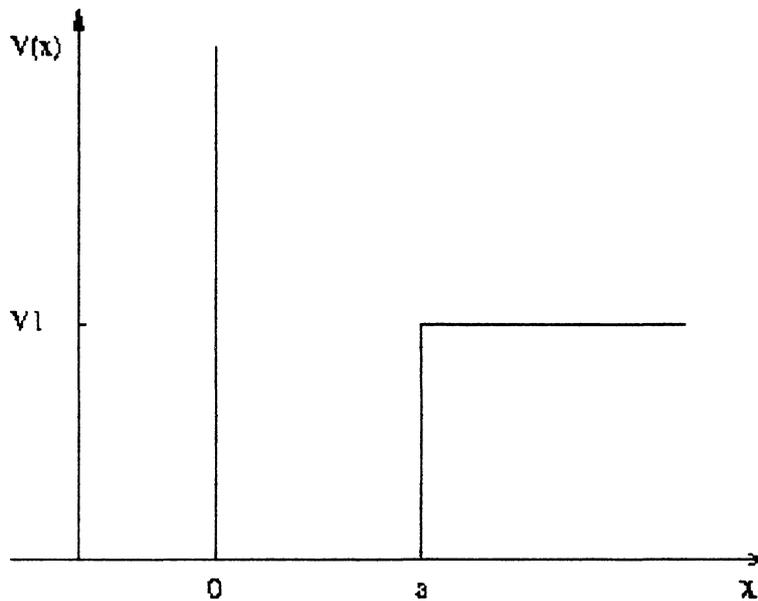


Figura 5.3: Potenciais delta de Dirac e degrau acoplados

Este potencial pode ser dividido em dois blocos básicos: o delta de Dirac e o degrau, o que permite aplicar a versão mais rápida do método de resolução, apresentado ao final do

capítulo 4. É calculada a função de Green para os seguintes casos:

a)  $x_i < 0$  e  $x_f > a$

Neste caso podemos enumerar os caminhos da seguinte forma: 1) começa em  $x_i$ , passa pelo potencial delta, passa pelo potencial degrau e chega em  $x_f$ ; 2) começa em  $x_i$ , passa pelo potencial delta, reflete no degrau, reflete novamente no delta, passa pelo degrau e chega em  $x_f$ , ou seja, com duas reflexões entre os potenciais; 3) sai de  $x_i$  e chega em  $x_f$  com quatro reflexões entre os potenciais. Existem infinitas possibilidades, sempre com mais reflexões internas. A soma da contribuição de todos os caminhos pode ser escrita como:

$$G_{sc,-+}^{(\delta+d)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0(0 - x_i)] g_{-+} \exp[ik_0a] \times \left( \sum_{n=0}^{\infty} (R_o g_{--})^n \exp[ik_0 2na] \right) T_i \exp[ik_1(x_f - a)] \right\} \quad (5.28)$$

A soma converge para:

$$G_{sc,-+}^{(\delta+d)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \frac{g_{-+} T_i \exp[ik_0a]}{1 - g_{--} R_o \exp[ik_0 2a]} \exp[ik_1(x_f - a) - ik_0 x_i] \quad (5.29)$$

E como resultado final obtém-se:

$$G_{-+}^{(\delta+d)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \alpha_{-+}^{(\delta+d)} \exp[ik_1(x_f - a) - ik_0 x_i] \quad (5.30)$$

sendo

$$\alpha_{-+}^{(\delta+d)} = \frac{2k_0}{d_5} \quad (5.31)$$

com

$$d_5 = (k_1 + k_0) e^{-ik_0 a} + 2\gamma(k_0 \cos k_0 a - ik_1 \sin k_0 a) \quad (5.32)$$

b) para  $x_i$  e  $x_f < 0$  tem-se:

$$\begin{aligned} G_{--}^{(\delta+d)}(x_f, x_i; k_0) &= \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \left\{ \exp[ik_0 |x_f - x_i|] + \left( g_{--} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{g_{-+}^2 R_o \exp[ik_0 2a]}{1 - g_{--} R_o \exp[ik_0 2a]} \right) \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \\ &= \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \left\{ \exp[ik_0 |x_f - x_i|] + \alpha_{--}^{(\delta+d)} \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (5.33) \end{aligned}$$

sendo

$$\alpha_{--}^{(\delta+d)} = \frac{(k_1 + k_0) e^{-ik_0 a} - 2\gamma[k_0 \cos k_0 a - ik_1 \sin k_0 a]}{d_5} \quad (5.34)$$

c) para  $x_i < 0$  e  $0 < x_f < a$

$$\begin{aligned} G_{-0}^{(\delta+d)}(x_f, x_i; k_0) &= \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \exp[-ik_0 x_i] \frac{g_{-+}}{1 - g_{--} R_o \exp[ik_0 2a]} \\ &\quad \times \left\{ \exp[ik_0 x_f + R_o \exp[-ik_0(x_f - 2a)]] \right\} \\ &= \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \exp[-ik_0 x_i] \left\{ \alpha_{-0}^{(\delta+d)-} \exp[ik_0(x_f - a)] \right. \\ &\quad \left. + \alpha_{-0}^{(\delta+d)+} \exp[-ik_0(x_f - a)] \right\} \quad (5.35) \end{aligned}$$

sendo

$$\alpha_{-0}^{(\delta+d)\pm} = \frac{-\gamma(k_0^- k_1)}{d_5} \quad (5.36)$$

Os resultados acima podem ser verificados por uma técnica diferente. Existem trabalhos que mostram como determinar a função de Green para um potencial delta de Dirac acoplado a um outro potencial qualquer, desde que se conheça a função de Green isolada deste potencial [17, 18]. Porém o método aqui apresentado é de aplicação mais fácil e rápida.

Este sistema pode permitir a existência de estados ressonantes, ou quasi-níveis. Supondo  $x_i < 0$  e  $x_f > 0$ , ou seja, a posição inicial antes do potencial delta e a final depois dele, estes estados ressonantes começam a aparecer quando se diminui a ‘permeabilidade’ do potencial delta, fazendo  $\lambda \rightarrow \infty$  (veja (5.27)). Neste caso, a maioria dos estados não penetram na região depois do potencial delta, pois, no limite em questão,

$$\alpha_{-+}^{(\delta+d)} \text{ e } \alpha_{-0}^{(\delta+d)} \rightarrow 0 \quad (5.37)$$

e

$$\alpha_{--}^{(\delta+d)} \rightarrow -1 . \quad (5.38)$$

Porém os valores de  $k_0$  que fazem na expressão  $d_5$

$$k_1 \cos(k_0 a) - ik_0 \sin(k_0 a) \rightarrow 0 , \quad (5.39)$$

produzem sensível modificação nos valores das amplitudes  $\alpha_{-+}^{(\delta+d)}$  e  $\alpha_{-0}^{(\delta+d)}$ . Como no caso

dos níveis de energia em estados ligados, estes estados ressonantes estão relacionados, na construção semiclássica, com os caminhos de múltiplos espalhamentos.

## 5.4 Potencial delta de Dirac e barreira acoplados

Um potencial acoplando um delta de Dirac e uma barreira (fig. 5.4) pode ser definido como:

$$V(x) = \lambda\delta(x) + V_1[\theta(x - a) - \Theta(x - b)] \quad (5.40)$$

Para este potencial será utilizado o delta e a barreira como blocos básicos. Apenas no último resultado, onde  $x_f$  será considerado dentro da barreira, que ela será dividida em dois degraus. Nesta seção serão deixados apenas indicados, nos resultados finais, as amplitudes de espalhamento dos potenciais base, sem se fazer as devidas substituições, porque com o resultado nesta forma já é possível fazer discussões qualitativas.

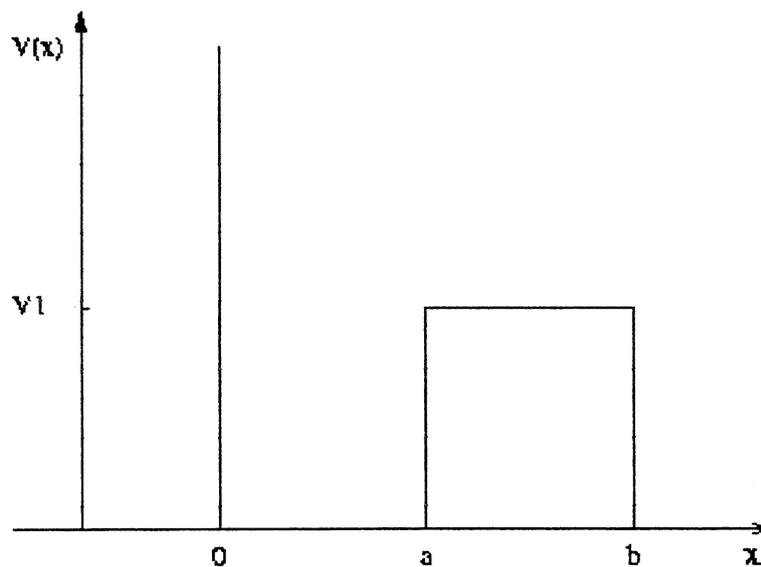


Figura 5.4: Potenciais delta de Dirac e barreira acoplados

A função de Green, para os casos abaixo citados, é:

a)  $x_i < 0$  e  $x_f > b$

$$G_{-+}^{(\delta+b)} = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \alpha_{-+}^{(\delta+b)} \exp[ik_0(x_f - x_i - b)] \quad (5.41)$$

com

$$\alpha_{-+}^{(\delta+b)} = \frac{g_{-+}f_{-+} \exp[ik_0a]}{1 - f_{--}g_{--} \exp[ik_02a]} ; \quad (5.42)$$

b)  $x_i$  e  $x_f < 0$

$$G_{--}^{(\delta+b)} = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + \alpha_{--}^{(\delta+b)} \exp[-ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (5.43)$$

com

$$\alpha_{--}^{(\delta+b)} = g_{--} + \frac{g_{-+}^2 f_{--} \exp[ik_02a]}{1 - g_{--} f_{--} \exp[ik_02a]} ; \quad (5.44)$$

c)  $x_i < 0$  e  $0 < x_f < a$

$$G_{-0}^{(\delta+b)} = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \exp[ik_0x_i] \left\{ \alpha_{-01}^{(\delta+b)-} \exp[ik_0(x_f - a)] + \alpha_{-01}^{(\delta+b)+} \exp[-ik_0(x_f - a)] \right\} \quad (5.45)$$

com

$$\alpha_{-0,1}^{(\delta+b)-} = \frac{g_{-+} \exp[ik_0 a]}{1 - g_{--} f_{--} \exp[ik_0 2a]} e \quad (5.46)$$

$$\alpha_{-0,1}^{(\delta+b)+} = \frac{g_{-+} f_{--} \exp[ik_0 a]}{1 - g_{--} f_{--} \exp[ik_0 2a]} ; \quad (5.47)$$

d)  $x_i < 0$  e  $a < x_f < b$

$$G_{-0}^{(\delta+b)} = \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \exp[-ik_0 x_i] \left\{ \alpha_{-0,2}^{(\delta+b)-} \exp[ik_1(x_i - b)] + \alpha_{-0,2}^{(\delta+b)+} \exp[-ik_1(x_f - b)] \right\} \quad (5.48)$$

com

$$\alpha_{-0,2}^{(\delta+b)-} = \frac{g_{-+} f_{-0} \exp[ik_0 a]}{1 - g_{--} f_{--} \exp[ik_0 2a]} e \quad (5.49)$$

$$\alpha_{-0,1}^{(\delta+b)+} = \frac{g_{-+} f_{-0} \exp[ik_0 a]}{1 - g_{--} f_{--} \exp[ik_0 2a]} \quad (5.50)$$

O resultado em (5.48), (5.49) e (5.50) está resolvido com detalhes no Apêndice A.

Os valores dos  $\alpha^{(\delta+b)}$  fornecem as amplitudes de espalhamento do sistema e também os possíveis estados ressonantes.

## 5.5 Poço infinito acoplado com uma barreira

O potencial poço infinito acoplado com uma barreira (fig. 5.5), pode ser definido como:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{para } x < -b \\ V_1 [\Theta(x+a) - \Theta(x-a)] & \text{para } -b < x < b \\ \infty & \text{para } x > b \end{cases} . \quad (5.51)$$

Este potencial também pode ser considerado um poço duplo.

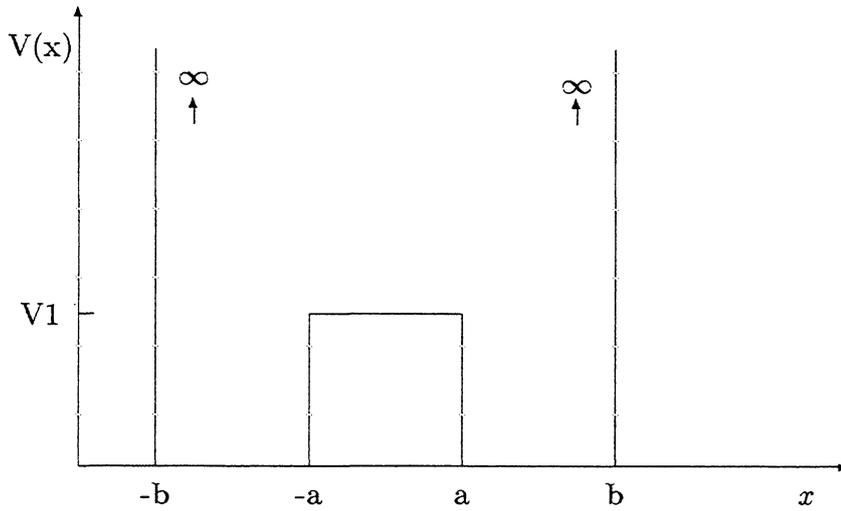


Figura 5.5: Poço infinito acoplado com uma barreira, formando um poço duplo

As paredes infinitas em  $\pm b$  podem ser usadas no método semiclássico aqui desenvolvido, bastando, para isto, considerá-las como degraus, com  $V1 \rightarrow \infty$  (ver eq. (3.1)), ou um potencial delta de Dirac, com  $\lambda \rightarrow \infty$  (ver eq. (4.31)). Assim a amplitude de transmissão nesse potencial será nula (ver definições em (3.6) ou (4.30)) e a amplitude de reflexão será igual a  $-1$  (ver definições (3.8) ou (4.31)). É considerado nesta análise o caso:  $-b < x_i < -a$  e  $a < x_f < b$ .

$$G_{sc}^{(pd)}(x_f, x_i; k_0) = -\frac{m}{ik_0\hbar^2} C \sin k_0(b - x_f) \sin k_0(x_i + b) \quad (5.52)$$

onde

$$C = \frac{1}{d_6} \left\{ 2k_0k_1 \cos(k_1 2a) - i(k_1^2 + k_0^2) \sin(k_1 2a) \right\} 8k_0k_1 \exp[ik_0 2(b - a)] \quad (5.53)$$

com

$$d_6 = \left[ 2k_0k_1 \cos(k_1 2a) - i(k_1^2 + k_0^2) \sin(k_1 2a) + i(k_1^2 - k_0^2) \sin(k_1 2a) \exp[ik_0 2(b - a)] \right]^2 - 4k_0^2 k_1^2 \exp[ik_0 4(b - a)] \quad (5.54)$$

Os valores de  $E$  que fazem  $d_6 = 0$  fornecem os níveis de energia do sistema.

## 5.6 Seqüência de potenciais

Considerando-se duas barreiras em seqüência, separadas por uma região de potencial constante  $V_1$  e de largura  $a$ . Para simplificar a análise, serão consideradas as regiões antes e depois do conjunto, formado pelos dois potenciais, como tendo potencial nulo e que o conjunto comece em  $x = 0$  e termine em  $x = b$  (veja fig. 5.6). As barreiras não necessitam ser iguais. A partir dos resultados anteriores pode-se facilmente escrever a função de Green deste conjunto de potenciais, para dois casos específicos, como:

$$G_{-+}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0 \hbar^2} T_2 \exp[ik_0(x_f - x_i - b)] \quad (5.55)$$

$$G_{--}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + R_2 \exp[ik_0(x_f + x_i)] \} \quad (5.56)$$

sendo

$$T_2 = \frac{T_1 t_2 \exp[ik_1 a]}{1 - R_1 r_2 \exp[ik_1 2a]} \quad (5.57)$$

$$R_2 = R_1 + \frac{T_1 r_2 \exp[ik_1 2a]}{1 - R_1 r_2 \exp[ik_1 2a]} \quad (5.58)$$

onde  $T_1$  e  $R_1$  são amplitudes de espalhamento do primeiro potencial e  $t_2$  e  $r_2$  são amplitudes do segundo potencial, lembrando que  $T_1$  e  $t_2$  são amplitudes do tipo  $f_{-+}$ , definida em (4.8), com uma fase a menos que a amplitude de transmissão encontrada via equação de Schrödinger, como foi mostrado em (4.41).

Desejando-se acrescentar uma terceira barreira ao conjunto, a função de Green terá forma semelhante a (5.55) e (5.56). Apenas os fatores pré-exponenciais  $T_i$  e  $R_i$  serão diferentes e a posição  $b$  em (5.55) terá outro valor, dependendo da posição final do terceiro potencial. Utilizando as amplitudes já deduzidas em (5.57) e (5.58), os novos fatores serão:

$$T_3 = \frac{T_2 t_3 \exp[ik_2 c]}{1 - R_2 r_3 \exp[ik_2 2c]} \quad (5.59)$$

$$R_3 = R_2 + \frac{T_2 r_3 \exp[ik_2 2c]}{1 - R_2 r_3 \exp[ik_2 2c]} \quad (5.60)$$

sendo  $t_3$  e  $r_3$  as amplitudes do terceiro potencial,  $c$  é o comprimento da região que separa o terceiro potencial dos dois primeiros e  $k_2$  é o número de onda nesta região.

Observando (5.59) e (5.60) nota-se que é possível construir uma fórmula de recorrência para uma seqüência com muitas barreiras. Se houver  $N$  barreiras e deseja-se acrescentar mais uma, novamente a função de Green para as  $N + 1$  barreiras será semelhante a (5.55) e (5.56) e os fatores serão:

$$T_{N+1} = \frac{T_N t_{N+1} \exp[ik_N c]}{1 - R_N r_{N+1} \exp[ik_N c]} \quad (5.61)$$

$$R_{N+1} = R_N + \frac{T_N r_{N+1} \exp[ik_N 2c]}{1 - R_N r_{N+1} \exp[ik_N 2c]} \quad (5.62)$$

Resultado idêntico foi encontrado por Rozman [26] resolvendo a matriz de espalhamento

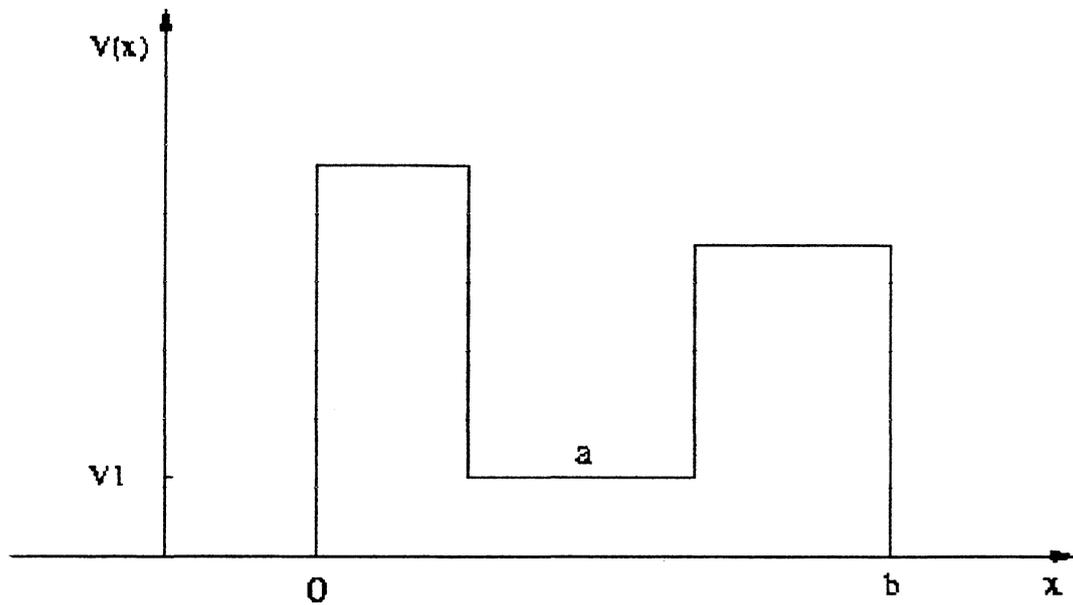


Figura 5.6: Seqüência com duas barreiras separadas por uma região de potencial constante e comprimento 'a'.

para o sistema, que é uma técnica trabalhosa para potenciais complexos. Este resultado pode ser utilizado para outras seqüências de potenciais que não barreiras e também é possível determinar a função de Green para posições inicial ou final dentro da seqüência.

## Capítulo 6

### Discussão

A modificação na fórmula semiclássica para a função de Green, proposta neste trabalho, consiste em colocar um termo ad-hoc como fator pré-exponencial em cada amplitude de probabilidade das trajetórias clássicas. Este termo, chamado de ‘ $A$ ’ em (3.20), está relacionado com as amplitudes de espalhamento dos diversos potenciais degraus em que o sistema possa ser dividido e tem características locais, pois cada trajetória analisada tem este fator construído de acordo com o número de interações que ela sofre nos referidos degraus. A correta computação das contribuições de cada caminho é parte integrante do método. Cada contribuição se subdivide em uma parte transmitida e outra refletida cada vez que encontra um ponto de abrupta variação do potencial (veja apêndice A). Também são contados os caminhos que penetram em regiões classicamente proibidas. O termo referente à contribuição dos caminhos próximos à trajetória clássica é conservado na nova versão da fórmula semiclássica e o índice de Morse é incorporado ao fator  $A$ .

Uma característica interessante destes resultados é a construção do fator pré-exponencial ‘ $A$ ’, que vem do produto de todas as amplitudes de espalhamento que um caminho sofre nos diversos potenciais degraus por onde passa (veja (4.3)). Após somar todas as contribuições dos infinitos caminhos, o novo fator obtido continua sendo uma amplitude de espalhamento do sistema, como foi demonstrado na seção 4.4. Assim, supondo um potencial definido na

seguinte forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ V_1(x) & \text{para } 0 < x < a \\ 0 & \text{para } x > a \end{cases} \quad (6.1)$$

onde  $V_1(x)$  é um potencial constante por partes qualquer e considerando as posições inicial e final fora da região entre 0 e  $a$ , pode-se escrever uma forma generaliza da função de Green, sem a necessidade de contar as contribuições dos caminhos internos ao potencial. A função de Green terá a seguinte forma:

$$G_{-+}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} T \exp[ik_0(x_f - x_i - a)] \quad (6.2)$$

e

$$G_{--}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0\hbar^2} \left\{ \exp[ik_0|x_f - x_i|] + R \exp[ik_0(x_f + x_i)] \right\} \quad (6.3)$$

onde  $T$  é a amplitude de transmissão pelo potencial  $V_1(x)$ , a menos de uma fase  $\exp[-ik_0a]$ , e  $R$  é a amplitude de reflexão.

A partir destes resultados pode-se começar a investigar potenciais suaves pelo mesmo processo. Supondo um potencial suave  $V(x)$ , com  $V(x) \rightarrow 0$  para  $x_f$  e  $x_i \rightarrow \pm\infty$ . Neste caso a função de Green pode ser escrita como em (6.2) e (6.3). Estas mesmas foram sugeridas por Aguiar [20] e recentemente Luz [28] as confirmou isto para o potencial Rosen-Morse ( $V(x) = 1/\cosh(x)^2$ ), desde que que  $x_f$  e  $x_i$  esteja longe o suficiente do potencial. Neste trabalho Luz também demonstrou que quando os pontos inicial e final estão próximos ao ponto de retorno clássico, mas fora deles, as expressões em (6.2) e (6.3) continuam válidas, desde que a energia da partícula seja bem menor que a do potencial. Para

energias maiores, e pontos extremos próximos ao ponto de retorno clássico é esperado que a ação clássica deixe de ser igual a da partícula livre e o fator pré-exponencial deixe de ser simplesmente a amplitude de transmissão ou reflexão. Luz também calculou a função de Green para um potencial Rosen-Morse duplo e a expressão obtida é semelhante a deduzida neste trabalho para uma seqüência de potenciais (5.61) e (5.62), apenas que as amplitudes de reflexão devidas à contribuição dos caminhos de múltiplos espalhamentos entre os potenciais, apresentam uma fase diferente. Esta fase foi chamada por Luz de índice de Morse generalizado.

Este método não traz vantagens para tratar um potencial suave isolado, uma vez que é necessário conhecer as amplitudes de transmissão e reflexão do potencial como um todo, mas conhecendo-se tais amplitudes, pode-se determinar a função de Green para uma seqüência destes potenciais e isto o torna muito vantajoso e o qualifica como um método de múltiplos espalhamentos.

A nova versão aqui apresentada da função de Green semiclássica foi construída em cima de argumentos físicos, sem uma dedução matemática rigorosa. Um tratamento matemático adequado para melhorar as fórmulas semiclássicas usuais, tanto para o propagador quanto para a função de Green, ainda não existe na literatura. Uma possibilidade seria analisar termos de terceira ordem na aproximação da trajetória clássica, da fórmula de Van Vleck, mas opção dos pesquisadores nesta área tem sido procurar formas modificadas para a tal fórmula [23, 24]. Porém, deve-se lembrar que os trabalhos nesta área [idem] sempre utilizam caminhos opcionais que não são trajetórias clássicas, implicando na necessidade de uma análise cuidadosa no termo de primeira ordem, considerado sempre nulo quando o caminho é a trajetória clássica. Independente de sua origem, fica evidente, a partir dos resultados deste trabalho, que a fórmula semiclássica da função de Green deve conter as amplitudes de espalhamento de cada caminho. Em um trabalho recente, Kira et.al. [27] fizeram o

mesmo tratamento para obter o propagador semiclássico. Seus resultados numéricos são bons, mas não conseguiu obter uma fórmula exata.

Importante citar que parte das idéias deste trabalho encontra-se fragmentada na literatura [26], [30], mas aqui elas criam uma versão unificada do problema.

## Conclusão

A nova versão aqui desenvolvida para o método semiclássico para determinação da Função de Green mostra ser satisfatória no tratamento de potenciais constantes por partes, fornecendo resultados exatos. Sua aplicação não se restringe à complexidade destes potenciais, conferindo-lhe vantagens sobre outros métodos já existentes. Como exemplo foram determinadas algumas funções de Green não existentes na literatura, como para os potenciais barreira e poço finito assimétricos e para o poço infinito acoplado com uma barreira (poço duplo). Ela também se mostra vantajosa na determinação de amplitudes de espalhamento do sistema. Para potenciais suaves, o novo método também pode ser aplicado, com poucas reservas, e torna-se vantajoso para obter a função de Green para uma seqüência destes potenciais.

O princípio básico deste método, que é acrescentar termos a fórmula semiclássica, abre novas possibilidades para as aproximações semiclássicas, no tratamento de outros fenômenos quânticos como a difração, por exemplo, que já começa a aparecer em sistemas bidimensionais. Um tratamento mais adequado para potenciais suaves e uma dedução matemática rigorosa para as modificações aqui feitas também constituem importantes investigações que devem suceder este trabalho.

## Apêndice A

### Construção esquemática da função de Green

A função de Green para o potencial delta de Dirac + barreira acoplados, como definido em (5.40), pode ser obtida montando-se um diagrama esquemático com todos os caminhos possíveis. O diagrama é construído da seguinte forma: a cada vez que o caminho encontra um ponto de mudança de potencial, ele se divide em duas partes, que representam as possibilidades de reflexão ou transmissão; continua-se os dois novos caminhos e, se necessário, abre-se mais chaves com mais possibilidades, sempre que o caminho encontra um ponto de espalhamento, até chegar na posição final. Neste diagrama só serão representadas as amplitudes de espalhamento nos potenciais base porque a ação referente a cada caminho é de fácil cálculo e será acrescentada na construção da função de Green. No caso aqui analisado, para  $x_i < 0$  e  $a < x_f < b$ , os potenciais bases serão o delta de Dirac e o degrau, portando no diagrama serão utilizadas as amplitudes de espalhamento destes potenciais e que estão adequadamente definidas nos capítulos 5 e 6.

$$g_{-+} \left\{ \begin{array}{l} A = R_o g_{--} \left\{ \begin{array}{l} A \\ B \end{array} \right. \\ B = T_i \left\{ \begin{array}{l} R_i \left\{ \begin{array}{l} R_i \dots \\ (R_i \text{ ou } 1) \square \end{array} \right. \\ T_o g_{--} \left\{ \begin{array}{l} A \\ B \end{array} \right. \\ (R_i \text{ ou } 1) \square \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

$A$  e  $B$  representam dois grupos de caminhos e o símbolo  $\square$  representa o fim de um caminho.

Ao se observar o diagrama (A.1) pode-se notar que a função de Green deverá ter a forma:

$$G_{-0}^{(\delta+b)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \exp[-ik_0 x_i] g_{-+} [C_A(x_f) + C_B(x_f)] \quad (\text{A.2})$$

onde  $C_A$  e  $C_B$  representam os caminhos do grupo  $A$  e  $B$ , respectivamente, no diagrama. Note que em (A.2) já foi acrescentada a ação da parte do caminho que sai de  $x_i$  e chega até a subdivisão nos caminhos  $C_A$  e  $C_B$ . Continuando os cálculos encontra-se:

$$C_A = \frac{R_o g_{--} C_B \exp[ik_0 2a]}{1 - R_o g_{--} \exp[ik_0 2a]} \quad (\text{A.3})$$

$$C_B = \frac{1}{d7} \left\{ T_i \left( \exp[ik_1(x_f - a)] + R_i \exp[-ik_1(x_f - 2b + a)] \right) + T_i R_i T_o g_{--} C_A \exp[ik_0 2a + ik_1 2(b - a)] \right\} \quad (\text{A.4})$$

com

$$d7 = 1 - R_i \exp[ik_1 2(b - a)] \left( R_i + T_i T_o g_{--} \exp[ik_0 2a] \right) \quad (\text{A.5})$$

Somando os dois caminhos obtém-se:

$$C_A + C_B = \frac{f_{-0}^- \exp[ik_1(x_f - b)] + f_{-0}^+ \exp[-ik_1(x_f - b)]}{1 - g_{--} f_{--} \exp[ik_0 2a]} \quad (\text{A.6})$$

sendo  $f_{-0}^+$  amplitudes referentes a barreira de potencial e definidas no capítulo 6.

Substituindo (A.6) em (A.1) encontra-se:

$$G_{-0}^{(\delta+b)}(x_f, x_i; k_0) = \frac{m}{ik_0 \hbar^2} \frac{g_{-+} \exp[-ik_0(x_i - a)]}{1 - g_{--} f_{--} \exp[ik_0 2a]} \left\{ f_{-0}^- \exp[ik_1(x_f - b)] + f_{-0}^+ \exp[-ik_1(x_f - b)] \right\} \quad (\text{A.7})$$

# Bibliografia

- [1] E.J.Heller, S.Tomsovic. *Phys.Today.* (1993) 38.
- [2] M.C.Gutzwiller. *J.Math.Physics.* **11** (1970) 1791.
- [3] D.Sokolovski. *Phys.Rev.* **A52**(1995) R5. A.Lenef, S.C.Rand. *Phys.Rev A* **49** (1994) 32. P.Landauer, Th.Martin. *Rev.Mod.Physics.* **66** (1994) 217.
- [4] R.Aurich, J.Bolte, F.Steiner. *Phys.Rev.Letters.* **73** (1994) 1356. H.Primack, V.Smilansky. *J.Phys.* **A27** (1994) 4439. P.Seba, K.Zyczkowski. *Phys.Rev.* **A44** (1991) 3457.
- [5] R.Q.Yang. *Phys.Rev.* **B52** (1995) 958 (conf.pg.). N.Notomi, J.Hammersberg, H.Weman, S.Sugiura, M.Okamoto, T.Tamamura, M.Potemski. *Phys.Rev.* **B52** (1995) 11147. Y.Dakhnovskii, H.Metw. *Phys.Rev.* **B51** (1995) 4193. G.Garcia-Calderon, R.Romo, A.Rubio. *Phys.Rev.* **B50** (1994) 15142.
- [6] J.J.Sakurai. *Modern Quantum Mechanics.* Rev.edition. New York, Addison-Wesley, 1994.
- [7] E.Merzbacher. *Quantum Mechanics.* 2.<sup>a</sup> ed. New York, John Wiley & Sons, 1970.
- [8] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F.Laloë. *Quantum Mechanics.* New York, John Wiley & Sons, 1977.
- [9] E.Butikov. *Física Matemática.* Rio de Janeiro, Guanabara Dois, 1978.

- [10] R.P.Feynman, A.R.Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. New York, McGraw-Hill, 1965.
- [11] L.S.Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration*. New York, Wiley, 1981.
- [12] H.Kleinert. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*. 2.<sup>a</sup> ed. New Jersey, World Scientific, 1995.
- [13] P.A.M.Dirac. Rev.Mod.Physics **17** (1945) 195.
- [14] R.P.Feynman. Rev.MOd.Physics **20** (1948) 367.
- [15] H.Goldstein. *Classical Mechanics*. 2.<sup>a</sup> ed. New York, Addison-Wesley, 1980.
- [16] P.Moretti. Phys.Rev. **A46** (1992) 1233.
- [17] B.Gaveau, L.S.Schulman. J.Phys. **a19** (1986) 1833.
- [18] C.Grosche. J.Phys. **A23** (1990) 5205.
- [19] H.Kleinert. I.Mustapic. J.Math.Phys. **33** (1992) 643.
- [20] M.A.M.de Aguiar. Phys.Rev. **A48** (1993) 2567.
- [21] M.C.Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. New York, Springer-Verlag, 1990.
- [22] M.C.Gutzwiller. *The Semi-Classical Quantization of Hamiltonian Systems*. Les Houches, Lectures Notes for Summer School, 1989.
- [23] L.S.Schulman. Phys.Rev.Lett. **49** (1982) 599.
- [24] B.K.Cheng, M.G.E.da Luz. J.Phys. **A25** (1992) 2033. B.K.Cheng. J.Phys. **A23** (1990) 5807.

- [25] R.E.Crandall. J.Phys. A26 (1993) 3627.
- [26] M.G.Rozman, P.Reineker. Phys.Rev. A49 (1994) 3310.
- [27] M.Kira, I.Tittonem, W.K.Lai, S.Stenholm. Phys. Rev. A51 (1995) 2826.
- [28] M.G.E.da Luz. (submetido à publicação ).
- [29] M.G.E.da Luz, E.Vicentini, B.K.Cheng. (submetido à publicação ).
- [30] D.Lessie, J.Spadaró. Am.J.Phys. 54 (1986) 909. P.W.Anderson, D.J.Thouless, E.Abrahams, D.S.Fisher. Phys.Rev. B22 (1980) 3519. J.E.Beam. Am.J.Phys. 38 (1970) 1395.