

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

---

Estudo do Degrau de Potencial em  
Mecânica Quântica Quaterniônica

---

*Tiago Marques Madureira*

Curitiba - 2006

# Estudo do Degrau de Potencial em Mecânica Quântica Quaterniônica

---

*Tiago Marques Madureira*

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Matemática Aplicada, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Setor de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Gisele Cristina Ducati  
Departamento de Matemática - UFPR

Co-orientador: Prof. Dr. Stefano De Leo  
Departamento de Matemática Aplicada - UNICAMP

Curitiba - 2006

# Agradecimentos ► Agradecimentos

Agradeço a Deus pelas oportunidades que têm me dado.

Agradeço aos meus orientadores pelos ensinamentos.

Agradeço a CAPES pelo auxílio financeiro.

Agradeço a minha família pelo incentivo e compreensão.

# Resumo Resumo

Nesta dissertação, com a finalidade de investigar diferenças entre mecânica quântica complexa e mecânica quântica quaterniônica, resolvemos analiticamente a equação de Schrödinger na presença do degrau de potencial quaterniônico. Apresentamos a solução analítica para estados estacionários e discutimos, aplicando o método de fase estacionária, os tempos de reflexão e transmissão. O estudo da solução analítica para estados estacionários e a análise dos tempos de reflexão e transmissão nos permitem mostrar diferenças qualitativas entre as formulações complexa e quaterniônica da mecânica quântica. Em particular, a presença de uma perturbação quaterniônica no potencial complexo altera os tempos de reflexão e transmissão. Para uma partícula com energia total maior do que a energia potencial, tais tempos não são nulos. A não instantaneidade da reflexão e transmissão é, conseqüentemente, um puro efeito quaterniônico. Para completeza apresentamos também os casos limites complexo e puramente quaterniônico.

Palavras-chave: Quatérnion; equação de Schrödinger quaterniônica; degrau de potencial quaterniônico; mecânica quântica quaterniônica.

# Abstract Abstract

In this dissertation, with the purpose to investigate differences between complex and quaternionic quantum mechanics, we analytically solve the Schrödinger equation in the presence of a quaternionic potential step. We present the analytic solution for the stationary states and discuss, by using the stationary phase method, the reflection and transmission times. The study of the analytic solution for the stationary states and the reflection and transmission times analysis allows to show the qualitative differences between complex and quaternionic formulation of quantum mechanics. In particular, the presence of a quaternionic perturbation on the complex potential modifies the reflection and transmission times which are not null in the case of a particle with total energy greater than the potential energy. The reflection and transmission are not instantaneous, they reveal a purely quaternionic effect. To complete the study we present the complex and purely quaternionic limit case.

Keywords: Quaternion; quaternionic quantum mechanics; quaternionic step potential; quaternionic Schrödinger equation.

# Sumário

Resumo	iii
Abstract	iv
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Equação de Schrödinger Quaterniônica</b>	<b>7</b>
2.1 Álgebra Quaterniônica . . . . .	7
2.2 Equação de Schrödinger em $\mathbb{C}$ . . . . .	9
2.3 Equação de continuidade . . . . .	11
2.4 Estados estacionários: Separação de variáveis . . . . .	13
2.4.1 Potencial quaterniônico constante . . . . .	15
<b>3 Degrau de Potencial Quaterniônico</b>	<b>17</b>
3.1 Equação de continuidade para o de grau de potencial . . . . .	18
3.1.1 Região I . . . . .	19
3.1.2 Região II - Zona A: Reflexão parcial . . . . .	20
3.1.3 Região II - Zona B: Reflexão total . . . . .	22
3.1.4 Região II - Zona C: Reflexão total . . . . .	22
3.1.5 Conclusões: Coeficientes de Reflexão e Transmissão . . . . .	24
3.2 Caso: $\mathbf{E} > \sqrt{\mathbf{V}_1^2 + \mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	24
3.2.1 Ondas planas . . . . .	25
3.2.2 Fase: onda refletida e onda transmitida . . . . .	26
3.2.3 Limite complexo . . . . .	27
3.3 Caso: $\sqrt{\mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2} < \mathbf{E} < \sqrt{\mathbf{V}_1^2 + \mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	28
3.3.1 Ondas planas . . . . .	28

---

3.3.2	Fase da onda refletida . . . . .	29
3.3.3	Limite complexo . . . . .	30
3.4	Caso: $\mathbf{E} < \sqrt{\mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	30
3.4.1	Onda plana . . . . .	31
3.4.2	Fase da onda refletida . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Tempos de Reflexão e Transmissão</b>	<b>33</b>
4.1	Caso geral . . . . .	33
4.1.1	$\mathbf{E} > \sqrt{\mathbf{V}_1^2 + \mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	35
4.1.2	$\sqrt{\mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2} < \mathbf{E} < \sqrt{\mathbf{V}_1^2 + \mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	38
4.1.3	$\mathbf{E} < \sqrt{\mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	40
4.2	Limite complexo . . . . .	41
4.2.1	$\mathbf{E} > \mathbf{V}_1$ . . . . .	41
4.2.2	$\mathbf{E} < \mathbf{V}_1$ . . . . .	42
4.3	Limite puramente quaterniônico . . . . .	43
4.3.1	$\mathbf{E} > \sqrt{\mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	43
4.3.2	$\mathbf{E} < \sqrt{\mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$ . . . . .	44
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>46</b>
<b>A</b>	<b>Figuras</b>	<b>49</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>60</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Durante as primeiras décadas do século XIX estudiosos como Jean R. Argand (1768 - 1822), Gaspar Wessel (1745 - 1818) e Carl Friedrich Gauss (1777 - 1855) conceberam os números complexos como pontos no plano bidimensional. William Rowan Hamilton (1805 - 1865) procurou uma maneira de interpretar geometricamente os números complexos. Em 1833, comunicou a Academia Irlandesa significativo artigo em que a álgebra dos números complexos era definida como uma álgebra de pares ordenados de números reais, definição que usamos até hoje. Do ponto de vista físico, o sistema de números complexos é conveniente para o estudo de vetores e de rotações no plano. Fascinado pela relação dos números complexos com a geometria bidimensional, Hamilton, assim como muitos outros matemáticos, tentou estender a idéia ao espaço tridimensional procurando generalizar a álgebra de pares ordenados para ternas ordenadas de números reais. A pergunta que por mais de uma década atormentou a Hamilton era a seguinte: uma vez conhecida a regra para multiplicar números complexos,  $a + ib$ , como fazer para multiplicar ternas ordenadas,  $a + ib + jc$ ? Em uma carta enviada a seu filho, Hamilton escreveu [20]:

*“Every morning in the early part of the above-cited month [october 1843], on my coming down to breakfast, your little brother William Edwin, and yourself, used to ask me, “Well, Papa, can you multiply triplets”? Whereto I was always obliged to replay, with a sad shake of the head: “No, I can only add and subtract them”.”*



Após muita dedicação e também frustração, Hamilton estava finalmente decidido a desistir da sua procura. Porém, no dia 16 de outubro de 1843, ao caminhar ao longo do canal Real em Dublin, acompanhado por sua esposa, Hamilton concebeu a idéia de operar sobre quádruplas ordenadas da forma  $a + ib + jc + kd$ , onde  $a, b, c, d$  são números reais e  $i, j, k$  unidades imaginárias, impondo assim uma quarta dimensão ao espaço geométrico. Nesse momento, que podemos chamar de “vandalismo matemático”, escreveu com uma faca sobre uma pedra da ponte Brougham a fórmula fundamental

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1.$$

Na carta enviada a seu filho Archibald H. Hamilton em 5 de agosto de 1865, Hamilton descreve este momento de inspiração que o levou a criação dos quatérnions [20]:

*“I was walking in to attend and preside, and your mother was walking with me, along the Royal Canal, to which she had perhaps driven; and although she talked with me now and then, yet an under-current of thought was going on in my mind, which gave at last a result, where of it is not too much to say that I felt at once the importance. An electric circuit seemed to close; and a spark flashed forth, the herald (as I foresaw, immediately) of many long years to come of definitely directed thought and work, by myself if spared, and at all events on the part of others, if I should even be allowed to live long enough distinctly to communicate the discovery. Nor could I resist the impulse - unphilosophical as it may have been - to cut with a knife on a stone of Brougham Bridge, as we passed it, the fundamental fórmula with the symbols,  $i, j, k$ ; namely,*

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1. ”$$

Os vestígios de tal descoberta não podem ser encontrados hoje, mas em 1956 uma placa exibindo a fórmula foi erguida no local em homenagem e honra a Hamilton.

Dentre as importantes contribuições que a álgebra dos quatérnions proporcionou está a não comutatividade da multiplicação. Esta era especialmente importante porque forçava os matemáticos a abandonar a opinião de que a lei comutativa da multiplicação era necessária. Hamilton acreditou que a álgebra dos quatérnions

---

transformaria o campo da física-matemática e se tornaria tão importante historicamente quanto a invenção do cálculo. Suas expectativas não foram concretizadas, mas suas idéias tiveram papel histórico no desenvolvimento da álgebra matricial e na introdução da álgebra vetorial. Hamilton dedicou o resto de sua vida ao estudo dos quatérnions e suas aplicações. Escreveu vários textos promovendo o uso de quatérnions em física. Em 1853 foi publicado *Lectures on Quaternions* [19], no qual Hamilton apresentou detalhada teoria de um sistema não comutativo algébrico. Sua mais famosa obra na teoria de quatérnions *Elements of Quaternions* [18] foi editada e publicada por seu filho, William Edwin Hamilton, em 1866, um ano seguinte a morte de Hamilton.

Na década de 1850, Peter Guthrie Tait (1831 - 1901) aplicava quatérnions em problemas físicos de eletricidade e magnetismo. Tait havia estudado junto com James Clerk Maxwell (1831 - 1879) em Edimburgo na Universidade de Cambridge e compartilhavam o mesmo interesse em física-matemática. Tait e Maxwell se correspondiam por cartas e em algumas destas discutiam sobre quatérnions. Em 7 de novembro de 1870, Maxwell escreveu a Tait uma carta na qual discutia a terminologia de quatérnions para “coisas” como *gradiente*, *divergente*, *Laplaciano* e *rotacional*. Na mesma época Maxwell escreveu um manuscrito sobre aplicações de quatérnions em eletromagnetismo [25]. Neste manuscrito Maxwell escreveu:

*“ The invention of the Calculus of Quaternions by Hamilton is a step towards the Knowledge of quantities related to space which can only be compared for its importance with the invention of triple coordinates by Descartes. The limited use which has up to the present time been made of Quaternions must be attributed partly to the repugnance of most mature minds to new methods involving the expenditure of thought.”*

Os quatérnions chegam ao conhecimento de J. Willard Gibbs (1839 - 1903) através do *Treatise on Electricity and Magnetism* [24] de Maxwell. Gibbs criou uma notação moderna sobre o produto escalar e vetorial, divulgando amplamente suas notas de aula para estudiosos nos Estados Unidos e na Europa. Cópias das notas de Gibbs foram elogiadas por Oliver Heaviside (1850 - 1925). No seu livro, *Electromagnetic Theory* [22], Heaviside desenvolveu sua própria análise vetorial.

---

Ao introduzir as teorias de eletricidade e magnetismo na Alemanha, os métodos vetoriais foram bem aceitos e vários livros sobre análise vetorial foram escritos. Neste momento os quatérnions começavam a perder seu espaço na comunidade científica.



Nos últimos anos a tentativa de se compreender a importância da mecânica quântica quaterniônica tem resultado em significativo avanço no desenvolvimento de estruturas matemáticas quaterniônicas e suas aplicações em Física. O progresso feito em problemas de autovalores para operadores diferenciais quaterniônicos lineares sobre  $\mathbb{C}$  e  $\mathbb{R}$  [9, 10], tem possibilitado resolver a equação de Schrödinger na presença de potenciais quaterniônicos sem a necessidade de se traduzir a um par de equações complexas acopladas [5, 6]. Recentemente, nos artigos *Quaternionic differential operators* [12] e *Real linear quaternionic differential operators* [14], é discutida a resolução de equações diferenciais ordinárias quaterniônicas, em particular, equações diferenciais de segunda ordem com coeficientes constantes lineares sobre  $\mathbb{H}$ ,  $\mathbb{C}$  e  $\mathbb{R}$ . Aplicações para técnicas de resolução de equações diferenciais quaterniônicas podem ser encontradas em mecânica quântica não relativística, especificamente na resolução da equação de Schrödinger na presença de potenciais quaterniônicos constantes. O estudo da equação de Schrödinger tem possibilitado investigar diferenças entre mecânica quântica quaterniônica e mecânica quântica complexa (usual). A primeira proposta experimental para distinguir a teoria quântica complexa da quaterniônica, é apresentada por Peres [28]. Ele sugere um teste, envolvendo um feixe de nêutrons atravessando uma placa de dois materiais diferentes, na procura da não comutatividade da variação das fases quando a ordem das placas é invertida. Este experimento foi realizado por Kaiser, George e Werner [23]. O resultado experimental mostrou que a variação das fases comutam melhor que uma parte em  $3 \times 10^4$ .

A partir dos experimentos propostos por Peres [28], da primeira análise teórica de Davies e McKellar das duas barreiras de potenciais quaterniônicos [5, 6], ao estudo detalhado e esquemático no desenvolvimento da mecânica quântica quaterniônica no famoso livro de Adler [1], o estudo de possíveis desvios da mecânica quântica

complexa tem sido pesquisado e discutido na literatura. No artigo *Quaternionic potentials in non relativistic quantum mechanics* [13] são apresentados resultados sobre desvios da mecânica quântica complexa por potenciais quaterniônicos. Neste é desenvolvida a fenomenologia completa de barreiras de potenciais quaterniônicos discutindo a barreira de potencial invariante com relação a reversão temporal e a barreira de potencial que viola a invariância com relação a reversão temporal. O mais recente trabalho sobre potenciais quaterniônicos, *Quaternionic bound states* [11], apresenta as soluções de estados ligados para um poço de potencial esfericamente simétrico.

Nesta dissertação voltamos à análise da mecânica quântica quaterniônica não relativística estudando a solução analítica para estados estacionários da partícula na presença do degrau de potencial quaterniônico e os tempos de reflexão e transmissão neste potencial, verificando se existem diferenças entre a mecânica quântica quaterniônica e complexa. A importância de resolver analiticamente um sistema quântico quaterniônico se traduz na possibilidade de entender onde e quando, caso existam, desvios da teoria complexa podem ser observados. Podemos discutir diferenças *quantitativas* e *qualitativas* entre as teorias quaterniônica e complexa. A solução analítica também desempenha importante papel na compreensão dos efeitos que potenciais quaterniônicos introduzem na fase de ondas estacionárias. A presença da perturbação quaterniônica num potencial complexo pode provocar uma mudança no tempo de reflexão e/ou no tempo de transmissão da partícula.

Para o desenvolvimento de nosso trabalho estruturamos esta dissertação da seguinte forma: começamos o capítulo 2 introduzindo os conceitos básicos sobre quatérnions. Discutimos a extensão do potencial complexo para o potencial quaterniônico apresentando a equação de continuidade para a mecânica quântica quaterniônica. Aplicamos o *método de separação de variáveis* obtendo as soluções estacionárias da equação de Schrödinger e mostramos a resolução desta equação na presença de um potencial quaterniônico constante.

No capítulo 3 determinamos a solução analítica da equação de Schrödinger no degrau de potencial quaterniônico obtendo as funções de onda estacionárias e a densidade de corrente em cada uma das regiões do potencial, incluindo os coeficientes de probabilidade de reflexão e transmissão da partícula. Procedemos como na teoria

usual para determinarmos os estados estacionários da partícula na presença do degrau de potencial quaterniônico e calcularmos a fase da onda estacionária refletida. Terminamos o capítulo mostrando como se reobtem o caso limite complexo. Os gráficos das ondas planas para o degrau de potencial são apresentados no apêndice.

Dividimos o capítulo 4 em três seções. Na primeira seção estudamos os tempos de reflexão e transmissão para o degrau de potencial quaterniônico. Os tempos das ondas incidente, refletida e transmitida são obtidos aplicando-se o *método de fase estacionária*. Nesta seção mostramos diferenças qualitativas entre a teoria quântica quaterniônica e a complexa. A reflexão não é instantânea em nenhum dos casos de energia estudados, e para a região de energia total da partícula maior que o módulo do potencial a reflexão e transmissão ocorrem para tempos *negativos*. Na segunda seção procuramos reobter os resultados apresentados na teoria usual estudando o caso limite complexo. A terceira parte do capítulo é dedicada ao caso puramente quaterniônico. Neste caso o potencial introduz o tempo de atraso ou de adiantamento na reflexão. No apêndice apresentamos os gráficos que ilustram a evolução do tempo da onda refletida para o degrau de potencial quaterniônico.

# Capítulo 2

## Equação de Schrödinger

### Quaterniônica

Neste capítulo discutiremos a solução geral da equação de Schrödinger na presença de potenciais quaterniônicos constantes. Começaremos com uma breve introdução à álgebra quaterniônica. Em seguida apresentaremos a generalização do potencial complexo para o potencial quaterniônico e discutiremos a equação de continuidade. Por fim, utilizando recentes técnicas matemáticas desenvolvidas na teoria de operadores diferenciais quaterniônicos, resolveremos a equação de Schrödinger com potencial quaterniônico constante.

#### 2.1 Álgebra Quaterniônica

Denotaremos por  $\mathbb{H}$  (em homenagem a Hamilton) o conjunto dos números  $q$ , chamados *quatérnions*, escritos na forma

$$q = q_0 + iq_1 + jq_2 + kq_3, \quad (2.1)$$

onde  $q_{0,1,2,3}$  são números reais e  $i, j, k$  unidades imaginárias que satisfazem a seguinte regra de multiplicação:

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1. \quad (2.2)$$

O termo  $iq_1 + jq_2 + kq_3$  é chamado parte *imaginária* do quatérnion  $q$ , enquanto que  $q_0$  é chamado parte *real*. Em correspondência, denominaremos o quatérnion  $q$  de:

real, se  $q = q_0$ , com  $q_{1,2,3} = 0$ ,  
 puramente quaterniônico, se  $q \in \text{span}\{j, k\}$ ,  
 puramente imaginário, se  $q \in \text{span}\{i, j, k\}$ .

Sobre o conjunto  $\mathbb{H}$  definiremos a adição e a multiplicação de acordo com as leis usuais da aritmética, com exceção da lei comutativa da multiplicação. A não comutatividade dos quatérnions pode ser observada em (2.2) de onde obtemos, pela propriedade associativa,

$$ij = -ji = k, \quad ki = -ik = j, \quad \text{e} \quad jk = -kj = i. \quad (2.3)$$

Análogo ao conjugado de um número complexo, podemos definir o *conjugado* de um quatérnion  $q \in \mathbb{H}$  por

$$\bar{q} = q_0 - iq_1 - jq_2 - kq_3. \quad (2.4)$$

Segue desta definição que, para quaisquer  $p, q \in \mathbb{H}$ , a conjugação do produto destes quatérnions é determinada pelo produto dos seus conjugados em ordem contrária, isto é,

$$\overline{pq} = \bar{q}\bar{p}.$$

É importante observar que  $\bar{q}q$  e  $q\bar{q}$  são ambos iguais ao número real

$$q\bar{q} = \bar{q}q = |q|^2 = q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2. \quad (2.5)$$

A *norma* de  $q$  é então definida por  $N(q) \equiv |q|$ . Em particular, para  $|q| = 1$ , o quatérnion  $q$  é dito *quatérnion unitário*. Se tivermos  $q \neq 0$ , usando  $|q|$  podemos definir o seu *inverso*  $q^{-1}$  como sendo

$$q^{-1} = \bar{q}/|q|^2, \quad (2.6)$$

o qual satisfaz, pela equação (2.5), a igualdade

$$q^{-1}q = qq^{-1} = 1.$$

Então o conjunto dos quatérnions  $\mathbb{H}$ , com as operações da adição e da multiplicação, já mencionadas, formam um anel de divisão.

Podemos ainda representar um quatérnion  $q$  sob outras formas, que em determinadas aplicações podem ser mais interessantes do que a expressa na equação (2.1). Temos a *forma vetorial*

$$q = q_0 + \mathbf{h} \cdot \mathbf{q},$$

onde  $\mathbf{h} = (i, j, k)$  e  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ , com o produto escalar usual, e a *forma polar*

$$q = |q|e^{\mathcal{I}\theta},$$

com  $\mathcal{I} = (\mathbf{h} \cdot \mathbf{q})/|\mathbf{q}|$  e  $\tan \theta = |\mathbf{h} \cdot \mathbf{q}|/q_0$ , ( $0 \leq \theta \leq \pi$ ). Em lugar de representarmos um quatérnion  $q$  em termos de suas 4 componentes reais, podemos representá-lo em termos de 2 componentes complexas. Tal representação é denominada *forma simplética* do quatérnion, a qual é expressa por

$$q = z + jw,$$

com  $z, w \in \mathbb{C}$  (corpo dos complexos) definidos por

$$z = q_0 + iq_1 \quad \text{e} \quad w = q_2 - iq_3.$$

## 2.2 Equação de Schrödinger em $\mathbb{C}$

A teoria de Schrödinger da mecânica quântica especifica quais as leis do movimento ondulatório que as partículas de certos sistemas microscópicos obedecem. Para cada sistema físico temos uma função de onda associada que o representa e que contém toda a informação física necessária. A equação de Schrödinger nos dá qual a forma da função de onda  $\psi(\mathbf{r}, t)$  caso saibamos qual a força que atua sobre a partícula associada, especificando a energia potencial  $V(\mathbf{r}, t)$  correspondente. Isto significa que a função de onda  $\psi(\mathbf{r}, t)$  é uma solução da equação de Schrödinger para aquela energia potencial. Num sistema unidimensional a equação de Schrödinger é determinada por

$$\partial_t \psi(x, t) = \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V(x, t) \right] \psi(x, t), \quad (2.7)$$

onde

$$V : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{e} \quad \psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}.$$



A função de onda  $\psi(x, t)$  é em geral uma função complexa, com  $|\psi(x, t)|$  assumindo um valor significativo onde se espera que a partícula esteja e um valor pequeno em qualquer outro lugar. A probabilidade de que, ao se fazer uma medição no instante  $t$ , a partícula descrita pela função de onda  $\psi(x, t)$  seja encontrada numa posição entre  $x$  e  $x + dx$  é definida por

$$P(x, t)dx = \psi(x, t)\bar{\psi}(x, t)dx. \quad (2.8)$$

Sobre a função de onda e suas derivadas primeiras estão as restrições de serem contínuas, unívocas e finitas. Além disso, como a integral de (2.8) determina a probabilidade total de se encontrar a partícula em algum lugar do espaço, num instante  $t$ ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1,$$

$\psi(x, t)$  está restrita ao conjunto das funções *quadrado integráveis*. Para um potencial independente do tempo a equação diferencial (2.7) torna-se

$$\partial_t \psi(x, t) = \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V(x) \right] \psi(x, t) \quad (2.9)$$

tendo como solução a função de onda

$$\psi(x, t) = \varphi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad (2.10)$$

onde  $E$  é a energia total da partícula no sistema. A solução estacionária  $\varphi(x)$  é obtida da equação de Schrödinger *independente do tempo*

$$\mathcal{H}\varphi(x) = E\varphi(x), \quad (2.11)$$

onde  $\mathcal{H}$  é o operador *Hamiltoniano*,

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x).$$

A equação (2.11) descreve um problema de autovalores com a autofunção  $\varphi(x)$  associada ao autovalor  $E$ . Esta equação possui soluções *quadrado integráveis* somente para certos valores de  $E$  [4]. Os estados estacionários das funções de onda são soluções particulares de (2.9). Podemos obter soluções mais gerais pela superposição destas, de modo que

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad c_n \in \mathbb{C}, \quad (2.12)$$

onde o índice  $n$  indexa os valores que a energia  $E$  pode assumir.

## 2.3 Equação de continuidade

Estudaremos a partir deste momento a equação (2.7) generalizando o potencial real  $V(x, t)$  para um potencial quaterniônico e discutindo a solução estacionária da equação de Schrödinger na presença de um potencial quaterniônico constante.

Ao generalizarmos o potencial real  $V(x, t)$  na equação (2.7) para o potencial quaterniônico

$$V(x, t) = V_0(x, t) + iV_1(x, t) + jV_2(x, t) + kV_3(x, t) \quad (2.13)$$

obtemos

$$\partial_t \Psi(x, t) = \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V_0(x, t) - iV_1(x, t) - jV_2(x, t) - kV_3(x, t) \right] \Psi(x, t), \quad (2.14)$$

com

$$V_{0,1,2,3} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{e} \quad \Psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{H}.$$

Mostraremos que  $V_1(x, t)$  deve ser a função identicamente nula para que a lei da conservação da norma seja mantida. Por simplicidade vamos omitir as dependências espacial e temporal nas funções da equação acima. Denotando por  $\bar{\Psi}$  o conjugado quaterniônico de

$$\Psi = \Psi_0 + i\Psi_1 + j\Psi_2 + k\Psi_3,$$

isto é,

$$\bar{\Psi} = \Psi_0 - i\Psi_1 - j\Psi_2 - k\Psi_3,$$

da equação (2.14) encontramos

$$\partial_t \Psi = \frac{1}{\hbar} \left[ i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi - (iV_0 - V_1 + kV_2 - jV_3) \Psi \right] \quad (2.15)$$

e

$$\partial_t \bar{\Psi} = -\frac{1}{\hbar} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 \bar{\Psi}) i - \bar{\Psi} (iV_0 + V_1 + kV_2 - jV_3) \right]. \quad (2.16)$$

Aplicando a regra de derivação para o produto de funções, respeitando a não comutatividade da multiplicação de funções quaterniônicas, temos

$$\partial_t (\bar{\Psi} \Psi) = (\partial_t \bar{\Psi}) \Psi + \bar{\Psi} \partial_t \Psi. \quad (2.17)$$

Multiplicando à esquerda da equação (2.15) por  $\bar{\Psi}$  e à direita da equação (2.16) por  $\Psi$ , de (2.17) resulta

$$\begin{aligned}\partial_t(\bar{\Psi}\Psi) &= \left[-\frac{\hbar}{2m}(\nabla^2\bar{\Psi})i + \bar{\Psi}\frac{V_1}{\hbar}\right]\Psi + \bar{\Psi}\left[i\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\Psi + \frac{V_1}{\hbar}\Psi\right] \\ &= -\frac{\hbar}{2m}[(\nabla^2\bar{\Psi})i\Psi - \bar{\Psi}i\nabla^2\Psi] + \frac{2}{\hbar}V_1\bar{\Psi}\Psi.\end{aligned}\quad (2.18)$$

Integrando, por partes, o primeiro termo à direita da igualdade acima, das condições de continuidade e limitação da função  $\Psi(x, t)$  e de sua derivada primeira com respeito a variável  $x$ , temos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [(\partial_{xx}\bar{\Psi})i\Psi - \bar{\Psi}i\partial_{xx}\Psi] dx = 0.$$

Sabemos que a densidade de probabilidade (2.8) integrada ao longo de todo o espaço deve valer 1, ou seja,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\Psi}\Psi dx = 1.$$

Então, integrando a equação (2.18) encontramos

$$\partial_t \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\Psi}\Psi dx = \frac{2}{\hbar}V_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\Psi}\Psi dx.\quad (2.19)$$

Esta equação afirma que a parte  $i$  do potencial quaterniônico viola a *lei de conservação da norma*, e portanto é necessário impor

$$V_1 = 0.$$

Voltando à equação (2.18), agora com  $V_1 = 0$ , podemos estabelecer a equação de continuidade

$$\partial_t P(x, t) + \nabla \cdot J(x, t) = 0,\quad (2.20)$$

onde

$$P(x, t) = \bar{\Psi}(x, t)\Psi(x, t)$$

é a densidade de probabilidade e

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2m} \{ [\nabla\bar{\Psi}(x, t)] i\Psi(x, t) - \bar{\Psi}(x, t)i\nabla\Psi(x, t) \}\quad (2.21)$$

é a densidade de corrente.

## 2.4 Estados estacionários: Separação de variáveis

Como visto na discussão anterior, a conservação da norma requer que a generalização do potencial real  $V(x, t)$  seja

$$V_0(x, t) + jV_2(x, t) + kV_3(x, t),$$

isto é, contenha as partes puramente quaterniônicas, além da parte real padrão. Por consequência, daqui para a frente, redefinimos a parte real e as partes puramente quaterniônicas da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} V_0(x, t) &\rightarrow V_1(x, t) \\ V_2(x, t) &\rightarrow V_3(x, t) \\ V_3(x, t) &\rightarrow -V_2(x, t). \end{aligned}$$

Então,

$$V(x, t) = V_1(x, t) + jV_3(x, t) - kV_2(x, t).$$

A substituição deste potencial na equação de Schrödinger complexa, resulta em

$$\partial_t \Psi(x, t) = \frac{1}{\hbar} \left[ i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - iV_1(x, t) - jV_2(x, t) - kV_3(x, t) \right] \Psi(x, t). \quad (2.22)$$

Esta é a conhecida equação de Schrödinger para a mecânica quântica quaterniônica [1]. Para *estados estacionários quaterniônicos* a equação de Schrödinger é caracterizada por

$$\partial_t \Psi(x, t) = \frac{1}{\hbar} \left[ i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - iV_1(x) - jV_2(x) - kV_3(x) \right] \Psi(x, t). \quad (2.23)$$

Para encontrarmos uma solução desta equação diferencial parcial quaterniônica aplicamos o método de *separação de variáveis*, isto é, a solução que procuramos é o produto de duas funções quaterniônicas,  $\Phi(x)$  e  $\chi(t)$ , na forma

$$\Psi(x, t) = \Phi(x)\chi(t). \quad (2.24)$$

É importante observarmos que, devido à não comutatividade dos quatérnions, a posição das funções quaterniônicas na equação acima não é uma escolha mas é imposta pelo método de separação de variáveis. Então, ao substituirmos (2.24) na equação (2.23) obtemos

$$\Phi(x)\dot{\chi}(t) = \frac{1}{\hbar} \left\{ \left[ i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - iV_1(x) - jV_2(x) - kV_3(x) \right] \Phi(x) \right\} \chi(t).$$

Consideremos um quatérnion unitário  $\mathbf{u}$ . Multiplicando a equação acima pelo fator  $\bar{\mathbf{u}}\Phi(x)^{-1}$ , à direita, e por  $\hbar\chi(t)^{-1}\mathbf{u}$ , à esquerda, resulta que

$$\hbar\bar{\mathbf{u}}\dot{\chi}(t)\chi(t)^{-1}\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}\Phi(x)^{-1} \left[ i\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - iV_1(x) - jV_2(x) - kV_3(x) \right] \Phi(x)\mathbf{u}. \quad (2.25)$$

O lado esquerdo da equação acima é uma função que independe da variável  $x$  e o lado direito é uma função que independe da variável  $t$ . Então as funções devem necessariamente ser iguais a uma constante quaterniônica, a qual denotaremos por  $\lambda$ . Isto implica que a equação diferencial parcial (2.23) resulta no seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\dot{\chi}(t) = \frac{\mathbf{u}\lambda\bar{\mathbf{u}}}{\hbar}\chi(t), \quad (2.26)$$

$$\mathcal{A}_{\mathbb{H}}\Phi(x) = \Phi(x)\mathbf{u}\lambda\bar{\mathbf{u}}, \quad (2.27)$$

onde  $\mathcal{A}_{\mathbb{H}}$  é o operador *anti-Hermitiano*

$$\mathcal{A}_{\mathbb{H}} = \left[ i\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - iV_1(x) - jV_2(x) - kV_3(x) \right].$$

Na equação (2.27) temos um problema de autovalores quaterniônicos à direita [9] com o operador  $\mathcal{A}_{\mathbb{H}}$  linear sobre  $\mathbb{H}$ . A anti-Hermiticidade de  $\mathcal{A}_{\mathbb{H}}$  implica que  $\lambda = -\bar{\lambda}$ , e conseqüentemente os autovalores são da forma

$$\lambda = iE_1 + jE_2 + kE_3, \quad (E_1, E_2, E_3) \in \mathbb{R}^3.$$

Escolhendo uma transformação unitária  $\mathbf{u}$  de tal maneira que

$$\mathbf{u}\lambda\bar{\mathbf{u}} = -iE, \quad \text{onde } E = \sqrt{E_1^2 + E_2^2 + E_3^2} \in \mathbb{R},$$

e substituindo em (2.26), obtemos como solução da função temporal

$$\chi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\chi(0). \quad (2.28)$$

A posição do quatérnion unitário  $\chi(0)$  deve-se à ação da unidade imaginária  $i$  à esquerda da função  $\chi(t)$  em (2.26). Portanto, as soluções estacionárias da equação de Schrödinger (2.23) são funções de onda quaterniônicas da forma

$$\Psi(x, t) = \Phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (2.29)$$

### 2.4.1 Potencial quaterniônico constante

Na mecânica quântica não relativística, a equação de Schrödinger de tratamento matemático mais simples é a que apresenta potenciais constantes. O estudo da equação de Schrödinger com potenciais constantes pode ser justificado pelo fato de um potencial físico apresentar características qualitativas que podem ser razoavelmente aproximadas por um potencial constante e contínuo por regiões. Com o objetivo de estudarmos, no próximo capítulo, a equação de Schrödinger na presença do degrau de potencial quaterniônico, vamos agora determinar a solução geral da equação diferencial parcial quaterniônica (2.27) para o caso particular em que o potencial seja constante.

Sejam as funções  $V_{1,2,3} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  tais que

$$V_1(x) = V_1, \quad V_2(x) = V_2 \quad \text{e} \quad V_3(x) = V_3,$$

onde  $V_{1,2,3}$  são constantes reais. Logo, a equação de Schrödinger independente do tempo, na presença do *potencial quaterniônico constante*  $V(x)$ , é dada por

$$\left[ i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - iV_1 - jV_2 - kV_3 \right] \Phi(x) = -\Phi(x)iE. \quad (2.30)$$

Observe que devido a ação da unidade imaginária  $i$  à direita da autofunção  $\Phi(x)$ , a equação diferencial ordinária de segunda ordem com coeficientes constantes é linear (à direita) sobre  $\mathbb{C}$  e sua solução é do tipo [12]

$$\Phi(x) = qe^{\nu x}, \quad \text{com} \quad q \in \mathbb{H} \quad \text{e} \quad \nu \in \mathbb{C}. \quad (2.31)$$

Como a equação quaterniônica é linear sobre  $\mathbb{C}$ , encontraremos quatro soluções linearmente independentes. Escrevendo o quatérnion  $q$  na sua forma simplética,  $q = u + jv$ , ao introduzirmos  $qe^{\nu x}$  em (2.30), por um simples cálculo obtemos

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \nu^2 u - V_1 u + V_3 v \right) - iV_2 v + j \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nu^2 v - V_1 v - V_3 u - iV_2 u \right) = -(u - jv)E.$$

Separando a parte complexa da parte puramente quaterniônica, encontramos

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \nu^2 + E - V_1 \right) u + (V_3 - iV_2) v = 0 \quad (2.32)$$

e

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \nu^2 - E - V_1 \right) v - (V_3 + iV_2) u = 0. \quad (2.33)$$

O produto dos termos à esquerda das equações acima resulta em

$$\nu^4 - 2 \left( \frac{2m}{\hbar^2} V_1 \right) \nu^2 + \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 (V_1^2 + V_2^2 + V_3^2 - E^2) = 0. \quad (2.34)$$

As raízes desta equação complexa são dadas por  $\pm\nu_-$  e  $\pm\nu_+$  onde

$$\nu_{\pm} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( V_1 \pm \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2} \right)}. \quad (2.35)$$

Para determinarmos  $u$  e  $v$ , substituímos  $\nu_{\pm}$  nas equações (2.32) e (2.33) obtendo

$$\begin{aligned} v &= -i \frac{V_2 - iV_3}{E + \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2}} u, & u \in \mathbb{C} & \text{ para } \nu_-, \\ u &= i \frac{V_2 + iV_3}{E + \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2}} v, & v \in \mathbb{C} & \text{ para } \nu_+. \end{aligned}$$

Assim, a constante quaterniônica  $q = u + jv$  é definida por:

$$q = (1 + jw)u \quad \text{com } w = -i \frac{V_2 - iV_3}{E + \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2}} \quad \text{para } \nu_-, \quad (2.36)$$

$$q = (z + j)v \quad \text{com } z = i \frac{V_2 + iV_3}{E + \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2}} \quad \text{para } \nu_+. \quad (2.37)$$

Portanto, a solução geral da equação de Schrödinger independente do tempo na presença de um potencial quaterniônico constante é

$$\Phi(x) = (1 + jw)(e^{\nu_- x} c_1 + e^{-\nu_- x} c_2) + (z + j)(e^{\nu_+ x} c_3 + e^{-\nu_+ x} c_4), \quad (2.38)$$

onde  $c_{1,2,3,4}$  são coeficientes complexos determinados pelas condições de contorno.

# Capítulo 3

## Degrau de Potencial

### Quaterniônico

No presente capítulo resolveremos *analiticamente* um simples sistema da mecânica quântica quaterniônica. Estudaremos as soluções estacionárias da equação de Schrödinger independente do tempo na presença do degrau de potencial quaterniônico. Começaremos discutindo a equação de continuidade na região livre e na região de potencial constante. A região onde o potencial é uma constante quaterniônica, não nula, será classificada por zonas de energia distinguindo-se entre reflexão parcial e reflexão total da partícula. Segundo esta classificação obteremos explicitamente as soluções das ondas planas e suas fases. Por fim, mostraremos como reobter o caso *limite complexo*.

Vamos considerar uma partícula de massa  $m$  e energia total  $E$  movendo-se, no sentido da esquerda para a direita, na direção do degrau de potencial quaterniônico determinado pela função

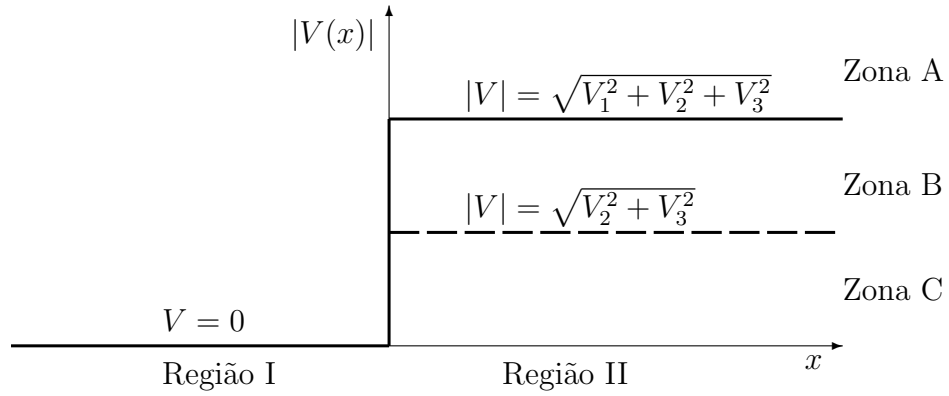
$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_1 + jV_3 - kV_2, & V_{1,2,3} \in \mathbb{R}, \quad x > 0. \end{cases}$$

O movimento da partícula após alcançar o ponto  $x = 0$  depende da relação entre a energia e o potencial. Considerando que o potencial possui uma parte complexa,  $V_1$ , e uma parte puramente quaterniônica,  $V_{2,3}$ , devemos distinguir três casos possíveis para a energia  $E$  da partícula. Estes casos serão classificados por *zonas de energia*, do seguinte modo:



$$\begin{aligned} \text{Zona A} & : E > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}, \\ \text{Zona B} & : \sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}, \\ \text{Zona C} & : E < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}. \end{aligned}$$

É importante observar que a zona C representa um novo caso a ser estudado, em comparação aos estudados na teoria quântica complexa. Na figura abaixo representamos os possíveis casos:



### 3.1 Equação de continuidade para o degrau de potencial

Nesta seção obteremos a função de onda estacionária  $\Phi(x)$  e a densidade de probabilidade de corrente nas regiões I e II do potencial quaterniônico. Primeiro discutiremos a equação de continuidade (2.20) para o degrau de potencial.

Partindo da equação unidimensional

$$\partial_t P(x, t) + \partial_x J(x, t) = 0$$

com  $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = |\Phi(x)|^2$ , temos que  $\partial_x J(x, t) = 0$ . Isto significa que a densidade de probabilidade de corrente para estados estacionários,

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2m} \{ [\partial_x \bar{\Psi}(x, t)] i \Psi(x, t) - \bar{\Psi}(x, t) i \partial_x \Psi(x, t) \},$$

é independente da variável real  $x$ . Vimos que a função de onda quaterniônica  $\Psi(x, t) = \Phi(x)\chi(t)$  tem como solução temporal a função  $\chi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ , logo

$$\begin{aligned} J(x, t) &= \frac{\hbar}{2m}\bar{\chi}(t) \left\{ \bar{\Phi}'(x)i\Phi(x) - \bar{\Phi}(x)i\Phi'(x) \right\} \chi(t) \\ &= -\frac{\hbar}{2m}e^{i\frac{E}{\hbar}t} \left\{ \bar{\Phi}(x)i\Phi'(x) - \bar{\Phi}'(x)i\Phi(x) \right\} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= -\frac{\hbar}{2m} \left\{ \bar{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. \right\} \in \mathbb{R}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde  $h.c.$  representa o *hermitiano conjugado*. Então a função  $J(x, t)$  assume o mesmo valor para quaisquer pontos  $x$ , seja na região I ou na região II.

### 3.1.1 Região I

Na região I, onde a partícula é livre,  $V_{1,2,3} = 0$ , a solução da equação de Schrödinger independente do tempo (2.38) reduz-se a

$$\Phi_I(x) = c_{1I}e^{i\varepsilon x} + c_{2I}e^{-i\varepsilon x} + j(c_{3I}e^{\varepsilon x} + c_{4I}e^{-\varepsilon x})$$

com

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \quad \text{e} \quad c_{1I}, c_{2I}, c_{3I}, c_{4I} \in \mathbb{C}.$$

As constantes complexas são determinadas de tal forma que as funções  $\Phi(x)$  e  $\Phi'(x)$  sejam finitas, unívocas e contínuas. Considerando o comportamento da função  $\Phi_I(x)$  quando  $x \rightarrow -\infty$ , devemos fazer

$$c_{4I} = 0$$

para que a função permaneça limitada. Deste modo, a função  $\Phi_I(x)$  é a superposição de três ondas. A primeira,  $e^{i\varepsilon x}$ , está associada a partícula movendo-se no sentido da esquerda para a direita. A segunda,  $e^{-i\varepsilon x}$ , está associada a partícula movendo-se no sentido da direita para esquerda. A função de componente  $j$  é uma exponencial real, e representa uma onda do tipo evanescente. Podemos normalizar a amplitude da onda que descreve a partícula incidente fazendo  $c_{1I} = 1$ . Então, representando os coeficientes de reflexão por  $c_{2I} = r$  e  $c_{3I} = \tilde{r}$ , a solução na região livre é

$$\Phi_I(x) = e^{i\varepsilon x} + re^{-i\varepsilon x} + j\tilde{r}e^{\varepsilon x}. \quad (3.2)$$

Vamos agora determinar a densidade de corrente nesta região. Temos que,

$$\begin{aligned}\overline{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. &= 2\text{Re} [(e^{-i\varepsilon x} + \bar{r}e^{i\varepsilon x} - \tilde{r}je^{\varepsilon x})i(i\varepsilon e^{i\varepsilon x} - i\varepsilon r e^{-i\varepsilon x} + j\varepsilon \tilde{r}e^{\varepsilon x})] \\ &= 2\text{Re} [-\varepsilon + \varepsilon|r|^2 + \varepsilon(re^{-2i\varepsilon x} - \bar{r}e^{2i\varepsilon x})] \\ &= 2\varepsilon(|r|^2 - 1).\end{aligned}$$

Portanto, a probabilidade de corrente (3.1) para a região livre é determinada por

$$J_{\text{I}}(x, t) = \frac{\hbar}{m}(1 - |r|^2)\varepsilon. \quad (3.3)$$

Na região II, a partícula move-se sob a ação de um potencial não nulo. Vimos no capítulo anterior que a solução da equação de Schrödinger independente do tempo na presença do potencial quaterniônico constante, é dada pela função

$$\Phi_{\text{II}}(x) = (1 + jw)(c_{1\text{II}}e^{\nu-x} + c_{2\text{II}}e^{-\nu-x}) + (z + j)(c_{3\text{II}}e^{\nu+x} + c_{4\text{II}}e^{-\nu+x}), \quad (3.4)$$

com

$$\begin{aligned}\nu_{\pm} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( V_1 \pm \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2} \right)}, \\ z &= i \frac{V_2 + iV_3}{E + \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2}}, \\ w &= -i \frac{V_2 - iV_3}{E + \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2}}.\end{aligned}$$

Utilizando esta equação estudaremos os três casos para energia total E da partícula na região II.

### 3.1.2 Região II - Zona A: Reflexão parcial

Neste caso, a constante  $\nu_-$  em (3.4) é substituída por  $i\rho_-$  onde

$$\rho_- = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2} - V_1 \right)} \in \mathbb{R}.$$

É imediato que  $e^{\nu+x} \rightarrow +\infty$  quando  $x \rightarrow +\infty$  e, conseqüentemente, para que a função  $\Phi_{\text{II}}$  permaneça limitada em (3.4), devemos fazer

$$c_{3\text{II}} = 0.$$

A solução  $e^{-i\rho-x}$  está associada a uma onda que se propaga no sentido de  $x$  decrescente na região II. Considerando que a partícula incide sobre o degrau no sentido da esquerda para a direita e não há nada que cause uma reflexão em algum ponto de coordenada  $x > 0$ , é necessário que

$$c_{2\text{II}} = 0.$$

Assim, a função de onda estacionária na zona A é descrita por

$$\Phi_{\text{II}}^{(A)}(x) = (1 + jw)te^{i\rho-x} + (z + j)\tilde{t}e^{-\nu+x}, \quad (3.5)$$

onde  $c_{1\text{II}} = t$  e  $c_{4\text{II}} = \tilde{t}$  representam os coeficientes de transmissão, que serão determinados pelas condições de contorno. Para a probabilidade de corrente temos,

$$\overline{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. = 2\text{Re} \left[ (\tilde{t}e^{-i\rho-x}\bar{q} + \tilde{\tilde{t}}e^{-\nu+x}\bar{p})(iqi\rho_-te^{i\rho-x} - ip\nu_+\tilde{t}e^{-\nu+x}) \right]$$

com

$$q = 1 + jw \quad \text{e} \quad p = z + j.$$

Antes de calcularmos o valor constante da densidade de corrente, observemos que para qualquer número complexo  $c \in \mathbb{C}$  e quatérnion  $\tilde{q} \in \mathbb{H}$ ,  $\tilde{\tilde{q}}iq$  é puramente imaginário e  $\tilde{q}c = \bar{c}\tilde{q}$ , se  $\tilde{q} \in \text{span}\{j, k\}$ . Além disso, para esta região (zona A) temos que  $\bar{z} = w$ . Logo,  $\bar{p}ip$  é puramente imaginário e são válidas as fórmulas

$$\begin{aligned} \bar{p}iq &= (w - j)i(1 + jw) = (w - j)(i + kw) = (1 + |w|^2)k, \\ \bar{q}iqi &= (1 - jw)i(i - kw) = (1 - jw)(-1 + jw) = -1 + |w|^2 + 2jw. \end{aligned}$$

Isto implica que

$$\begin{aligned} \overline{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. &= 2\text{Re}[\tilde{t}e^{-i\rho-x}\bar{q}iqi\rho_-te^{i\rho-x}] \\ &= 2(-1 + |w|^2)\rho_-|t|^2. \end{aligned}$$

Então, na zona A, a probabilidade de corrente é dada por

$$J_{\text{II}}^{(A)}(x, t) = \frac{\hbar}{m}(1 - |w|^2)\rho_-|t|^2. \quad (3.6)$$

Isto significa que a probabilidade da partícula ser transmitida para a região II é não nula e, conseqüentemente, na região I a reflexão é parcial.

### 3.1.3 Região II - Zona B: Reflexão total

Nesta região, as constantes  $\nu_{\pm}$  são reais. Podemos verificar que  $\Phi_{\text{II}}(x)$  cresce ilimitadamente quando  $x \rightarrow +\infty$  devido à presença das funções  $c_{2\text{II}}e^{\nu-x}$  e  $c_{4\text{II}}e^{\nu+x}$ . Então, é necessário que façamos

$$c_{2\text{II}} = c_{4\text{II}} = 0.$$

Nestas condições, a solução geral da equação quaterniônica na zona B do degrau de potencial é determinada por

$$\Phi_{\text{II}}^{(B)}(x) = (1 + jw)te^{-\nu-x} + (z + j)\tilde{t}e^{-\nu+x}. \quad (3.7)$$

Para a função  $J(x, t)$  correspondente a (3.7), segue do fato de  $\nu_{\pm} \in \mathbb{R}$  e das observações da subseção anterior, que a equação

$$\bar{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. = -2\text{Re} \left[ (\tilde{t}e^{-\nu-x}\bar{q} + \tilde{\bar{t}}e^{-\nu+x}\bar{p})(iq\nu_-te^{-\nu-x} + ip\nu_+\tilde{t}e^{-\nu+x}) \right]$$

deve ser igual a zero. Portanto, a densidade de corrente é nula

$$J_{\text{II}}^{(B)}(x, t) = 0, \quad (3.8)$$

o que caracteriza reflexão total na região I, isto é, a partícula é sempre refletida.

### 3.1.4 Região II - Zona C: Reflexão total

Observe que na zona C as constantes complexas  $\nu_{\pm}$  podem ser reescritas como  $\nu_- = \sigma_+ - i\sigma_-$  e  $\nu_+ = \sigma_+ + i\sigma_-$ , onde

$$\sigma_{\pm} = \sqrt{\frac{m}{\hbar^2} \left( \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2 - E^2} \pm V_1 \right)} \in \mathbb{R}.$$

Para que a equação (3.4) seja limitada, as constantes  $c_{1\text{II}}$  e  $c_{3\text{II}}$  devem ser nulas. Então a solução  $\Phi_{\text{II}}(x)$  nesta região é caracterizada por

$$\Phi_{\text{II}}^{(C)}(x) = [(1 + jw)te^{i\sigma-x} + (z + j)\tilde{t}e^{-i\sigma-x}] e^{-\sigma+x}. \quad (3.9)$$

A densidade de corrente correspondente a  $\Phi_{\text{II}}^{(C)}(x)$  é calculada em termos de

$$\bar{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. = 2\text{Re} \left[ (\tilde{t}e^{-i\sigma-x}\bar{q} + \tilde{\bar{t}}e^{i\sigma-x}\bar{p})(iq\sigma te^{i\sigma-x} + ip\bar{\sigma}\tilde{t}e^{-i\sigma-x})e^{-2\sigma+x} \right],$$

com  $\sigma = -\sigma_+ + i\sigma_-$ . Neste caso as constantes complexas  $w$  e  $z$  são expressas por

$$w = -i \frac{V_2 - iV_3}{E + i\sqrt{V_2^2 + V_3^2 - E^2}} \quad \text{e} \quad z = i \frac{V_2 + iV_3}{E + i\sqrt{V_2^2 + V_3^2 - E^2}},$$

ou ainda, reescrevendo o número complexo  $E + i\sqrt{V_2^2 + V_3^2 - E^2}$  na sua forma polar, obtemos

$$w = -i \frac{V_2 - iV_3}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} e^{-i\varphi}, \quad z = i \frac{V_2 + iV_3}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} e^{-i\varphi}; \quad \varphi = \arctan \left[ \frac{\sqrt{V_2^2 + V_3^2 - E^2}}{E} \right].$$

É imediato que  $|w|^2 = |z|^2 = 1$ . Por consequência

$$\begin{aligned} \bar{q}iq &= (1 - \bar{w}j)(i + kw) = 2kw, \\ \bar{p}ip &= (\bar{z} - j)(k + iz) = 2kz. \end{aligned}$$

Portanto, eliminando os termos em  $k$  encontramos

$$\bar{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. = 2\text{Re} \left[ (\bar{t}e^{-i\sigma-x} \bar{q}ip\bar{\sigma} \tilde{t}e^{-i\sigma-x} + \tilde{t}e^{i\sigma-x} \bar{p}iq\sigma te^{i\sigma-x}) e^{-2\sigma+x} \right].$$

Verifica-se facilmente que  $z - \bar{w} = -2iu \sin(\varphi)$ , com  $u = i \frac{V_2 + iV_3}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}}$ . Então, introduzindo

$$\begin{aligned} \bar{q}ip &= (1 - \bar{w}j)(iz + k) \\ &= i(z - \bar{w}) + k(1 + wz) \\ &= 2u \sin(\varphi) + k(1 + e^{-2i\varphi}) \end{aligned}$$

na equação acima, obtemos

$$\bar{\Phi}(x)i\Phi'(x) + h.c. = 2\text{Re}[(\bar{t}e^{-i\sigma-x} 2u \sin\varphi \bar{\sigma} \tilde{t}e^{-i\sigma-x} + \tilde{t}e^{i\sigma-x} 2\bar{u} \sin\varphi \sigma te^{i\sigma-x}) e^{-2\sigma+x}]$$

Observe que o conjugado do segundo termo à direita da igualdade, é igual ao oposto do primeiro termo. Sendo assim, a equação acima é nula e a densidade de corrente na zona C é

$$J_{\text{II}}^{(C)}(x, t) = 0. \quad (3.10)$$

Portanto na região I ocorre reflexão total.

### 3.1.5 Conclusões: Coeficientes de Reflexão e Transmissão

Vimos que a equação de densidade de probabilidade de corrente para estados estacionários assume os mesmos valores para qualquer ponto  $x$  nas regiões I e II, ou seja,  $J_I(x, t) = J_{II}(x, t)$ . Dos valores obtidos para a densidade de corrente na região I e em cada uma das zonas de energia da região II, encontramos:

$$\begin{aligned} |r|^2 + \frac{\rho_-}{\varepsilon}(1 - |w|^2)|t|^2 &= 1 && \text{para } E > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}, \\ |r|^2 &= 1 && \text{para } E < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}. \end{aligned}$$

A importante relação entre os coeficientes de reflexão e de transmissão

$$R + T = 1, \quad (3.11)$$

é obtida ao definirmos os coeficientes  $R$  e  $T$  por:

$$\begin{aligned} R &= |r|^2, & T &= \frac{\rho_-}{\varepsilon}(1 - |w|^2)|t|^2 && \text{para } E > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}, \\ R &= |r|^2 = 1, & T &= 0 && \text{para } E < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}. \end{aligned}$$

Estes coeficientes determinam a probabilidade da partícula, chegando de  $x < 0$ , ser refletida ou transmitida ao atingir o ponto  $x = 0$ . O ponto importante a ser observado aqui é que a relação (3.11) é obtida sem a necessidade de calcularmos explicitamente os coeficientes  $r$  e  $t$  da onda plana. Também é possível notar que os coeficientes  $\tilde{r}$  e  $\tilde{t}$  não desempenham papel importante no cálculo da densidade de probabilidade da partícula.

## 3.2 Caso: $E > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$

As soluções estacionárias da equação de Schrödinger independente do tempo na presença do degrau de potencial quaterniônico,

$$\left[ i \frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - iV_1 - jV_2 - kV_3 \right] \Phi(x) = -\Phi(x)iE,$$

são determinadas em termos dos coeficientes complexos de reflexão  $r, \tilde{r}$  e de transmissão  $t, \tilde{t}$ :

$$\begin{aligned} \Phi_I(x) &= e^{i\varepsilon x} + re^{-i\varepsilon x} + j\tilde{r}e^{\varepsilon x}, \\ \Phi_{II}(x) &= \begin{cases} (1 + jw)te^{i\rho-x} + (z + j)\tilde{t}e^{-\nu+x}, & \text{Zona A,} \\ (1 + jw)te^{-\nu-x} + (z + j)\tilde{t}e^{-\nu+x}, & \text{Zona B,} \\ [(1 + jw)te^{i\sigma-x} + (z + j)\tilde{t}e^{-i\sigma-x}] e^{-\sigma+x}, & \text{Zona C.} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.12)$$

As grandezas  $\varepsilon$ ,  $\rho_-$ ,  $\nu_{\pm}$ ,  $\sigma_{\pm}$  dependem somente das relações entre  $E$ ,  $V_1$ ,  $|jV_2 + kV_3|$ . Sendo assim, com o objetivo de simplificar futuras discussões e cálculos, vamos reescrevê-las em função de

$$\alpha = E/V_1 \quad \text{e} \quad \beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1.$$

Obtemos, então,

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} V_1 \alpha, & \rho_- &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} V_1 \left( \sqrt{\alpha^2 - \beta^2} \pm 1 \right), \\ \nu_{\pm} &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} V_1 \left( 1 \pm \sqrt{\alpha^2 - \beta^2} \right), & \sigma_{\pm} &= \sqrt{\frac{m}{\hbar^2}} V_1 \left( \sqrt{1 + \beta^2 - \alpha^2} \pm 1 \right). \end{aligned}$$

O produto das constantes complexas  $z$  e  $w$  são determinados como a seguir:

$$\begin{aligned} zw &= \beta^2 / \left( \alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta^2} \right)^2, & \text{para } E > \sqrt{V_2^2 + V_3^2}, \\ zw &= e^{-2i\varphi}; \quad \varphi = \arctan \left[ \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2}}{\alpha} \right], & \text{para } E < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}. \end{aligned}$$

Determinaremos aqui as soluções das ondas planas  $\Phi(x)$ , as fases das ondas refletida e transmitida e obteremos o caso limite complexo.

### 3.2.1 Ondas planas

Para determinarmos os estados estacionários no degrau de potencial quaterniônico procederemos como na teoria usual, ou seja, aplicaremos as condições de continuidade da função  $\Phi(x)$  e de sua derivada  $\Phi'(x)$  no ponto de descontinuidade do potencial. Então, em  $x = 0$  temos

$$\Phi_{\text{I}}(0) = \Phi_{\text{II}}(0),$$

$$\Phi'_{\text{I}}(0) = \Phi'_{\text{II}}(0).$$

Isto implica em

$$1 + r + j\tilde{r} = (1 + jw)t + (z + j)\tilde{t},$$

$$i\varepsilon(1 - r) + j\varepsilon\tilde{r} = (1 + jw)i\rho_-t - (z + j)\nu_+\tilde{t}.$$

Separando a parte complexa da parte puramente quaterniônica, encontramos

$$\begin{cases} 1 + r = t + z\tilde{t}, \\ \tilde{r} = wt + \tilde{t}, \\ 1 - r = \frac{\rho_-}{\varepsilon}t + i\frac{\nu_+}{\varepsilon}z\tilde{t}, \\ \tilde{r} = i\frac{\rho_-}{\varepsilon}wt - \frac{\nu_+}{\varepsilon}\tilde{t}. \end{cases}$$



Deste sistema de equações obtemos os seguintes coeficientes complexos:

$$\begin{aligned} t &= \frac{2\varepsilon}{\varepsilon + \rho_-} \left[ 1 - zw \frac{\varepsilon + i\nu_+}{\varepsilon + \nu_+} \frac{\varepsilon - i\rho_-}{\varepsilon + \rho_-} \right]^{-1}, \\ r &= \frac{\varepsilon - \rho_-}{2\varepsilon} \left[ 1 - zw \frac{\varepsilon - i\nu_+}{\varepsilon + \nu_+} \frac{\varepsilon - i\rho_-}{\varepsilon - \rho_-} \right] t, \\ \tilde{t} &= -\frac{\varepsilon - i\rho_-}{\varepsilon + \nu_+} wt, \\ \tilde{r} &= \frac{\nu_+ + i\rho_-}{\varepsilon + \nu_+} wt. \end{aligned} \tag{3.13}$$

A figura A.1 exibe os gráficos da parte real da função de onda estacionária quaterniônica  $\Phi(x)$  contra a variável espacial “adimensional”  $\sqrt{2mV_1} x/\hbar$  para diversos valores da razão entre a perturbação quaterniônica e o potencial real da mecânica quântica complexa  $(\sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1)$ . Em todos os casos estamos considerando a energia total da partícula duas vezes maior que o potencial “complexo” ( $E = 2V_1$ ). Podemos ver que a onda apresenta comportamento oscilatório em ambas as regiões que dividem o espaço, e que ocorre uma mudança na fase da onda na região II devido à parte complexa do potencial.

### 3.2.2 Fase: onda refletida e onda transmitida

No próximo capítulo investigaremos os tempos de reflexão e de transmissão da onda no degrau de potencial. Para isto, é preciso determinarmos as fases das ondas refletida e transmitida no degrau de potencial quaterniônico. Da função de onda quaterniônica  $\Psi(x, t) = \Phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$  na região I, temos que a onda plana refletida é descrita por

$$re^{-i(\varepsilon x - \frac{E}{\hbar}t)},$$

e na região II (zona A) a onda plana transmitida é obtida por

$$(1 + jw)te^{i\rho_-x}.$$

Esta última é composta por uma onda complexa e uma onda puramente quaterniônica. Notemos que os coeficientes de reflexão  $r$  e de transmissão  $t$  são constantes complexas e portanto contribuem, respectivamente, nas fases das ondas refletida e transmitida. Da equação (3.13) encontramos

$$r = \frac{(\varepsilon - \rho_-)(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon^2 - \rho_- \nu_+) + izw\varepsilon(\rho_- + \nu_+)}{(\varepsilon + \rho_-)(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon^2 + \rho_- \nu_+) + izw\varepsilon(\rho_- - \nu_+)},$$

que escrito na forma polar torna-se

$$r = \sqrt{\frac{[(\varepsilon - \rho_-)(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon^2 - \rho_- \nu_+)]^2 + z^2 w^2 \varepsilon^2 (\rho_- + \nu_+)^2}{[(\varepsilon + \rho_-)(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon^2 + \rho_- \nu_+)]^2 + z^2 w^2 \varepsilon^2 (\rho_- - \nu_+)^2}} e^{i(\theta_n - \theta_d)},$$

onde

$$\theta_n = \arctan \left[ \frac{zw\varepsilon(\rho_- + \nu_+)}{(\varepsilon - \rho_-)(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon^2 - \rho_- \nu_+)} \right] \quad (3.14)$$

e

$$\theta_d = \arctan \left[ \frac{zw\varepsilon(\rho_- - \nu_+)}{(\varepsilon + \rho_-)(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon^2 + \rho_- \nu_+)} \right]. \quad (3.15)$$

O coeficiente  $t$  também pode ser obtido em termos de seu módulo e fase pela equação (3.13). Explicitamente,

$$\begin{aligned} t &= \frac{2\varepsilon(\varepsilon + \nu_+)}{[(\varepsilon + \nu_+)(\varepsilon + \rho_-) - zw(\varepsilon^2 + \nu_+ \rho_-)] - izw\varepsilon(\nu_+ - \rho_-)} \\ &= \frac{2\varepsilon(\varepsilon + \nu_+)}{\sqrt{[(\varepsilon + \nu_+)(\varepsilon + \rho_-) - zw(\varepsilon^2 + \nu_+ \rho_-)]^2 + z^2 w^2 \varepsilon^2 (\nu_+ - \rho_-)^2}} e^{-i\theta_d}. \end{aligned}$$

Assim, as fases das ondas refletida e transmitida são determinada pelas expressões

$$\begin{aligned} \theta_{ref}(\varepsilon; x, t) &= -\varepsilon x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} t + \theta^{(r)}, \\ \theta_{tra}^{(1,i)}(\varepsilon; x, t) &= \rho_- x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} t + \theta^{(t)}, \\ \theta_{tra}^{(j,k)}(\varepsilon; x, t) &= \rho_- x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} t + \theta^{(t)} + \arctan[V_2/V_3], \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde

$$\theta^{(r)} = (\theta_n - \theta_d), \quad \theta^{(t)} = -\theta_d, \quad \text{e } \arctan[V_2/V_3] \text{ é a fase de } w.$$

### 3.2.3 Limite complexo

O limite complexo é obtido quando fazemos a parte puramente quaterniônica do potencial tender a zero, isto é,  $V_{2,3} \rightarrow 0$ . Neste caso,

$$\begin{aligned} z, w &\rightarrow 0, \\ \tilde{r}, \tilde{t} &\rightarrow 0, \\ \varepsilon &\rightarrow \varepsilon_c = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \\ \rho_- &\rightarrow \rho_c = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1)}, \end{aligned}$$

e as funções  $\Phi_I(x)$  e  $\Phi_{II}^{(A)}(x)$  tornam-se

$$\begin{aligned}\varphi_I(x) &= e^{i\varepsilon_c x} + r_c e^{-i\varepsilon_c x}, \\ \varphi_{II}(x) &= t_c e^{i\rho_c x}.\end{aligned}$$

Os coeficientes  $r$  e  $t$  no caso limite complexo são determinados por

$$\begin{aligned}t \rightarrow t_c &= \frac{2\varepsilon_c}{\varepsilon_c + \rho_c} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_1}}, \\ r \rightarrow r_c &= \frac{\varepsilon_c - \rho_c}{\varepsilon_c + \rho_c} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_1}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_1}}.\end{aligned}$$

A partir destes coeficientes obtemos a probabilidade de que a partícula chegando da região I seja refletida pelo degrau de potencial, definida pelo coeficiente

$$R = |r|^2 = \left( \frac{\varepsilon_c - \rho_c}{\varepsilon_c + \rho_c} \right)^2,$$

e a probabilidade da partícula ser transmitida, que é expressa pelo coeficiente

$$T = \frac{\rho_c}{\varepsilon_c} |t|^2 = \frac{\rho_c}{\varepsilon_c} \left( \frac{2\varepsilon_c}{\varepsilon_c + \rho_c} \right)^2.$$

Observe que os resultados obtidos para a função de onda estacionária e para os coeficientes de reflexão e transmissão são predições da teoria quântica complexa.

### 3.3 Caso: $\sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$

Nesta seção determinaremos explicitamente as soluções das ondas planas e a fase da onda refletida. Discutiremos graficamente a função  $\Phi(x)$  e reobteremos o limite complexo.

#### 3.3.1 Ondas planas

Podemos determinar os coeficientes complexos das funções  $\Phi_I(x)$  e  $\Phi_{II}^{(B)}(x)$  através da substituição  $\rho_- = i\nu_-$  em (3.13), de modo que obtemos:

$$\begin{aligned}
 t &= \frac{2\varepsilon}{\varepsilon + i\nu_-} \left[ 1 - zw \frac{\varepsilon + i\nu_+}{\varepsilon + \nu_+} \frac{\varepsilon + \nu_-}{\varepsilon + i\nu_-} \right]^{-1}, \\
 r &= \frac{\varepsilon - i\nu_-}{2\varepsilon} \left[ 1 - zw \frac{\varepsilon - i\nu_+}{\varepsilon + \nu_+} \frac{\varepsilon + \nu_-}{\varepsilon - i\nu_-} \right] t, \\
 \tilde{t} &= -\frac{\varepsilon + \nu_-}{\varepsilon + \nu_+} wt, \\
 \tilde{r} &= \frac{\nu_+ - \nu_-}{\varepsilon + \nu_+} wt.
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

Na figura A.2 são apresentados os gráficos da parte real da função de onda  $\Phi(x)$  contra a variável espacial “adimensional”  $\sqrt{2mV_1} x/\hbar$  para o caso no qual a energia da partícula é duas vezes menor que o potencial “complexo” ( $E = V_1/2$ ). Nesta região (zona B) percebemos que existe uma probabilidade não nula de encontrar a partícula na região onde  $x$  é positivo. Porém, esta probabilidade somente é apreciável para um curto intervalo de tempo devido à presença da onda evanescente  $e^{-\nu_-x}$  na onda transmitida. A exponencial cai rapidamente a zero quando  $x$  é muito maior do que  $1/\nu_-$ .

### 3.3.2 Fase da onda refletida

Escrevendo  $r$  explicitamente

$$r = \frac{\varepsilon[(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon + \nu_-)] + i[zw\nu_+(\varepsilon + \nu_-) - \nu_-(\varepsilon + \nu_+)]}{\varepsilon[(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon + \nu_-)] - i[zw\nu_+(\varepsilon + \nu_-) - \nu_-(\varepsilon + \nu_+)]}$$

imediatamente encontramos  $r = e^{2i\theta^{(r)}}$ , onde

$$\theta^{(r)} = \arctan \left[ \frac{zw\nu_+(\varepsilon + \nu_-) - \nu_-(\varepsilon + \nu_+)}{\varepsilon(\varepsilon + \nu_+) - zw\varepsilon(\varepsilon + \nu_-)} \right]. \tag{3.18}$$

Aqui temos um importante resultado a ser observado, que é a probabilidade de reflexão da partícula

$$R = |r|^2 = 1. \tag{3.19}$$

Da equação (3.18) obtemos a fase da onda refletida,

$$\theta_{ref}(\varepsilon; x, t) = -\varepsilon x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} + 2\theta^{(r)}. \tag{3.20}$$

### 3.3.3 Limite complexo

No limite complexo, quando  $V_{2,3} \rightarrow 0$ , obtemos

$$\begin{aligned} z, w &\rightarrow 0, \\ \tilde{r}, \tilde{t} &\rightarrow 0, \\ \nu_- &\rightarrow \nu_c = \sqrt{\frac{2m}{\hbar} (V_1 - E)}. \end{aligned}$$

A função  $\Phi(x)$  torna-se a solução da equação de Schrödinger independente do tempo no degrau de potencial complexo para o caso  $E < V_1$  :

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{I}}(x) &\rightarrow \varphi_{\text{I}}(x) = e^{i\varepsilon_c x} + r_c e^{-i\varepsilon_c x}, \\ \Phi_{\text{II}}(x) &\rightarrow \varphi_{\text{II}}(x) = t_c e^{-\nu_c x}, \end{aligned}$$

com os coeficientes

$$\begin{aligned} t \rightarrow t_c &= \frac{2\varepsilon_c}{\varepsilon_c + i\nu_c} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + i\sqrt{V_1 - E}}, \\ r \rightarrow r_c &= \frac{\varepsilon_c - i\nu_c}{\varepsilon_c + i\nu_c} = \frac{\sqrt{E} - i\sqrt{V_1 - E}}{\sqrt{E} + i\sqrt{V_1 - E}}. \end{aligned}$$

Aqui reobtemos o coeficiente de probabilidade de reflexão previsto na teoria quântica complexa,

$$R = |r|^2 = 1.$$

## 3.4 Caso: $E < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$

Nesta seção calcularemos os estados estacionários da partícula para o degrau de potencial quaterniônico e a fase da onda estacionária refletida. Lembramos que para este caso não existe limite complexo.

### 3.4.1 Onda plana

Fazendo as substituições  $\nu_+ = \sigma_+ + i\sigma_-$  e  $\rho_- = \sigma_- + i\sigma_+$  em (3.13), obtemos:

$$\begin{aligned}
 t &= \frac{2\varepsilon}{\varepsilon + \sigma_- + i\sigma_+} \left[ 1 - zw \frac{\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-}{\varepsilon + \sigma_- + i\sigma_+} \frac{\varepsilon - \sigma_- + i\sigma_+}{\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-} \right]^{-1}, \\
 r &= \frac{\varepsilon - \sigma_- - i\sigma_+}{2\varepsilon} \left[ 1 - zw \frac{\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-}{\varepsilon - \sigma_- - i\sigma_+} \frac{\varepsilon + \sigma_- - i\sigma_+}{\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-} \right] t, \\
 \tilde{t} &= -\frac{\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-}{\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-} wt, \\
 \tilde{r} &= \frac{2i\sigma_-}{\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-} wt.
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Os gráficos, para diferentes valores de  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ , da parte real da função de onda estacionária  $\Phi(x)$  são exibidos na figura A.3 para o caso  $E = V_1/2$ . Na região de potencial constante  $jV_3 - kV_2$  as ondas apresentam oscilações apenas numa região de penetração com extensão espacial muito pequena. Devido à presença da onda evanescente  $e^{-\sigma_+x}$  a probabilidade não nula de encontrar a partícula na região onde  $x$  é positivo existe somente para curtos intervalos de tempo.

### 3.4.2 Fase da onda refletida

Lembramos que neste caso,  $E < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ , a forma polar da constante  $zw$  é determinada por

$$zw = \frac{V_2^2 + V_3^2}{(E + i\sqrt{V_2^2 + V_3^2 - E^2})^2} = e^{-2i\varphi}.$$

Então, dos coeficientes  $t$  e  $r$  da equação (3.21) obtemos:

$$\begin{aligned}
 r &= \frac{(\varepsilon - \sigma_- - i\sigma_+)(\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-) - e^{-2i\varphi}(\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-)(\varepsilon + \sigma_- - i\sigma_+)}{(\varepsilon + \sigma_- + i\sigma_+)(\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-) - e^{-2i\varphi}(\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-)(\varepsilon - \sigma_- + \sigma_+)} \\
 &= -\frac{e^{-i\varphi}(\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-)(\varepsilon + \sigma_- - i\sigma_+) - e^{i\varphi}(\varepsilon - \sigma_- - i\sigma_+)(\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-)}{e^{i\varphi}(\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-)(\varepsilon + \sigma_- + i\sigma_+) - e^{-i\varphi}(\varepsilon - \sigma_- + i\sigma_+)(\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-)} \\
 &= -\frac{w_1 - w_2}{w_1 - w_2},
 \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
 w_1 &= e^{-i\varphi}(\varepsilon + \sigma_+ - i\sigma_-)(\varepsilon + \sigma_- - i\sigma_+), \\
 w_2 &= e^{i\varphi}(\varepsilon - \sigma_- - i\sigma_+)(\varepsilon + \sigma_+ + i\sigma_-).
 \end{aligned}$$

Daí, encontramos

$$\begin{aligned}
 w_2 - w_1 &= (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})[\varepsilon(\varepsilon + \sigma_+) - i(\varepsilon\sigma_+ + \sigma_+^2 + \sigma_-^2)] - (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})(\varepsilon\sigma_- - i\varepsilon\sigma_-) \\
 &= 2i\sin\varphi[\varepsilon(\varepsilon + \sigma_+) - i(\varepsilon\sigma_+ + \sigma_+^2 + \sigma_-^2)] - 2\cos\varphi(\varepsilon\sigma_- - i\varepsilon\sigma_-) \\
 &= 2\cos\varphi[(\varepsilon\sigma_+ + \sigma_+^2 + \sigma_-^2)\tan\varphi + i\varepsilon(\varepsilon + \sigma_+)\tan\varphi - \varepsilon\sigma_- + i\varepsilon\sigma_-].
 \end{aligned}$$

Imediatamente temos  $r = e^{2i\theta^{(r)}}$ , onde

$$\theta^{(r)} = \arctan \left[ \frac{\varepsilon(\varepsilon + \sigma_+)\tan\varphi + \varepsilon\sigma_-}{(\varepsilon\sigma_+ + \sigma_+^2 + \sigma_-^2)\tan\varphi - \varepsilon\sigma_-} \right]. \quad (3.22)$$

E, finalmente, a fase da onda refletida é calculada pela expressão

$$\theta_{ref}(\varepsilon; x, t) = -\varepsilon x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} t + \theta^{(r)}. \quad (3.23)$$

# Capítulo 4

## Tempos de Reflexão e Transmissão

Neste capítulo estudaremos os tempos das ondas refletida e transmitida no degrau de potencial quaterniônico. Assim como na teoria complexa, a análise das condições de fase estacionária determinam se a reflexão e a transmissão são instantâneas ou se há um tempo de atraso. Para potenciais de perturbação quaterniônica um *novo* fenômeno no tempo de reflexão e de transmissão aparece. Procuramos confrontar os resultados obtidos neste capítulo com os resultados apresentados na teoria quântica usual estudando os limites complexo e quaterniônico.

### 4.1 Caso geral

Antes de iniciarmos as investigações sobre o tempo de reflexão e o tempo de transmissão para o degrau de potencial, apresentaremos o *método de fase estacionária* (da teoria usual). Não é propósito deste trabalho apresentar uma discussão sobre pacotes de onda dentro do formalismo matemático nem sua interpretação física. Recomendamos ao leitor que deseja um estudo mais detalhado sobre pacotes de onda os livros citados nas referências [4, 26]. O tratamento deste tópico para funções de onda quaterniônicas merece uma análise aprofundada e deve ser estudo de futuros trabalhos. Com respeito a este assunto, nos limitaremos apenas em utilizar o mesmo procedimento da teoria usual para determinarmos os máximos das ondas incidente, refletida e transmitida.

Consideremos o caso unidimensional de uma partícula cuja energia potencial  $V(x)$  é nula, isto é, a partícula é livre. Na teoria quântica usual a equação de



Schrödinger para  $V(x)=0$ , dada por

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx}\psi(x,t), \quad (4.1)$$

é satisfeita por funções de onda da forma

$$\psi(x,t) = Ae^{i(\varepsilon x - Et/\hbar)}, \quad (4.2)$$

onde  $A$  é uma constante complexa e  $\varepsilon = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Ondas planas que assumem esta forma, cujo módulo é constante em todo o espaço, não representam um estado físico da partícula. No entanto, pelo princípio da superposição, a combinação linear destas ondas planas também é solução da equação (4.1) e pode ser escrita como uma função quadrado integrável na forma do pacote de onda

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) e^{i(\varepsilon x - Et/\hbar)}, \quad (4.3)$$

onde  $g(\varepsilon)$  é a função “moduladora”, que descreve a distribuição das amplitudes das ondas. Em particular, no instante  $t = 0$

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) e^{i\varepsilon x}. \quad (4.4)$$

Vamos assumir que  $g(\varepsilon)$  é uma função real com extensão  $\Delta\varepsilon$  e centrada no ponto  $\varepsilon = \varepsilon_0$ , no qual a função atinge seu valor máximo. A integral (4.4) atinge seu máximo,  $|\psi(x,0)|$ , quando as ondas que possuem as maiores amplitudes interferem construtivamente. Isto ocorre quando as fases, dependentes de  $\varepsilon$ , dessas ondas planas variam o “mínimo” possível em torno de  $\varepsilon = \varepsilon_0$ . Então, para obtermos o centro do pacote de ondas aplicamos o *método de fase estacionária* que consiste em impor que a derivada da fase com respeito a  $\varepsilon$  seja nula no ponto  $\varepsilon = \varepsilon_0$ .

Utilizaremos este método para determinarmos os máximos das ondas incidente, refletida e, quando for o caso, da onda transmitida. Antes, com o objetivo de simplificar e facilitar a interpretação gráfica dos resultados aqui apresentados, vamos reescrever as fases das ondas obtidas no capítulo anterior. Introduziremos as variáveis adimensionais  $\chi$  e  $\tau$ , definidas por

$$\chi = \sqrt{\frac{2mV_1}{\hbar^2}} x \quad \text{e} \quad \tau = \frac{V_1}{\hbar} t, \quad (4.5)$$

e os parâmetros que determinam a relação entre  $E, V_1$  e  $|jV_2 + kV_3|$ , obtidos por

$$\alpha = E/V_1 \quad \text{e} \quad \beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1. \quad (4.6)$$

Assim, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} &= \alpha t, & \varepsilon x &= \sqrt{\alpha} \chi, \\ \rho_- x &= \rho \chi & \text{com } \rho &= \sqrt{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} - 1}, \\ \nu_+ x &= \nu \chi & \text{com } \nu &= \sqrt{1 + \sqrt{\alpha^2 - \beta^2}}. \end{aligned}$$

#### 4.1.1 $\mathbf{E} > \sqrt{\mathbf{V}_1^2 + \mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2}$

Consideremos a função moduladora  $g(\alpha)$  real, com máximo em  $\alpha = \alpha_0$  e nula para  $\alpha < \sqrt{1 + \beta^2}$ , de modo que na região I do degrau de potencial quaterniônico a superposição das funções de ondas estacionárias quaterniônicas  $\Phi_1(x)e^{-iEt/\hbar}$  seja escrita como

$$\Psi(x, t) = \int_{\sqrt{1+\beta^2}}^{+\infty} d\alpha g(\alpha) \{e^{i\sqrt{\alpha}x} + re^{-i\sqrt{\alpha}x} + j\tilde{r}e^{\sqrt{\alpha}x}\} e^{-i\alpha\tau}. \quad (4.7)$$

As fases das ondas incidente e refletida são, respectivamente,

$$\begin{aligned} \theta_{inc}(\alpha; \chi, \tau) &= \sqrt{\alpha}\chi - \alpha\tau, \\ \theta_{ref}(\alpha; \chi, \tau) &= -\sqrt{\alpha}\chi - \alpha\tau + \theta^{(r)}(\alpha, \beta), \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde  $\theta^{(r)} = \theta_n - \theta_d$  é obtido das equações (3.14) e (3.15). Explicitamente, em função de  $\alpha$  e  $\beta$ , encontramos

$$\tan \theta_n(\alpha, \beta) = \frac{\beta^2 \sqrt{\alpha} \left( \sqrt{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} - 1} + \sqrt{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} + 1} \right)}{(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta^2})^2 \left( \sqrt{\alpha} - \sqrt{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} - 1} \right) \left( \sqrt{\alpha} + \sqrt{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + 1} \right) - \beta^2 (\alpha - \sqrt{\alpha^2 - \beta^2} - 1)} \quad (4.9)$$

e

$$\tan \theta_d(\alpha, \beta) = \frac{\beta^2 \sqrt{\alpha} \left( \sqrt{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} - 1} - \sqrt{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} + 1} \right)}{(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta^2})^2 \left( \sqrt{\alpha} + \sqrt{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} - 1} \right) \left( \sqrt{\alpha} + \sqrt{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + 1} \right) - \beta^2 (\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta^2} - 1)}. \quad (4.10)$$

A função  $e^{\sqrt{\alpha}x}$  é uma exponencial real, o que significa que a componente  $j$  da integral é uma onda do tipo evanescente, e portanto, não contribui “significativamente” para a fase da onda refletida.

Na região II do degrau de potencial, sob as mesmas considerações para a função  $g(\alpha)$ , temos

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int_{\sqrt{1+\beta^2}}^{+\infty} d\alpha g(\alpha) \{te^{i\rho x} + z\tilde{t}e^{-\nu x}\} e^{-i\alpha\tau} \\ &+ j \int_{\sqrt{1+\beta^2}}^{+\infty} d\alpha g(\alpha) \{wte^{i\rho x} + z\tilde{t}e^{-\nu x}\} e^{-i\alpha\tau}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

As funções com coeficiente  $\tilde{t}$  são ondas do tipo evanescente e não serão relevantes no cálculo da fase da onda transmitida. Entretanto, temos uma onda transmitida puramente quaterniônica,  $jwte^{i\rho\chi}$ . Sendo assim, as fases das ondas transmitidas complexa e puramente quaterniônica são, respectivamente,

$$\begin{aligned}\theta_{tra}^{(1,i)}(\alpha; \chi, \tau) &= \rho\chi - \alpha\tau + \theta^{(t)}(\alpha, \beta), \\ \theta_{tra}^{(j,k)}(\alpha; \chi, \tau) &= \rho\chi - \alpha\tau + \theta^{(t)}(\alpha, \beta) + \arctan\left[\frac{V_2}{V_3}\right],\end{aligned}\quad (4.12)$$

onde  $\theta^{(t)}(\alpha, \beta) = -\theta_d(\alpha, \beta)$  e  $\arctan[V_2/V_3]$  é a fase de  $w$ .

O método de fase estacionária mostra como obtemos o pico da onda e sua evolução no tempo. As derivadas das fases com respeito a  $\alpha$ , calculadas no ponto  $\alpha = \alpha_0$ , determinam que

$$\begin{aligned}\chi_{inc}^{max} &= 2\sqrt{\alpha_0}\tau, \\ \chi_{ref}^{max} &= 2\sqrt{\alpha_0}[-\tau + \theta_\alpha^{(r)}(\alpha_0, \beta)], \\ \chi_{tra}^{max} &= \rho_\alpha(\alpha_0, \beta)^{-1}[\tau - \theta_\alpha^{(t)}(\alpha_0, \beta)].\end{aligned}\quad (4.13)$$

Imediatamente vemos que o máximo da onda incidente atinge o ponto  $\chi = 0$  em  $\tau = 0$ . Porém, a onda refletida e a onda transmitida atingem o degrau ( $x = 0$ ), respectivamente, em

$$\tau_{ref} = \theta_\alpha^{(r)}(\alpha_0, \beta), \quad (4.14)$$

$$\tau_{tra} = \theta_\alpha^{(t)}(\alpha_0, \beta). \quad (4.15)$$

Aqui encontramos uma *diferença qualitativa* entre mecânica quântica complexa e quaterniônica. Na teoria quântica complexa, se uma partícula tem energia maior que a altura do potencial não haverá tempo de atraso, nem para a reflexão nem para a transmissão [4]. Para o potencial quaterniônico, no caso  $E > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$ , a reflexão e transmissão *não* são instantâneas.

A figura A.4 mostra o instante  $\tau_{ref}$  em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$  para diferentes valores de  $\alpha_0 = E_0/V_1$ . Neste caso, a variável  $\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$  está limitada no intervalo  $0 \leq \beta < \sqrt{\alpha_0^2 - 1}$ . Para  $\beta = 0$ , isto é, quando a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  é nula, temos que a reflexão é instantânea. No entanto, a medida que a perturbação quaterniônica aumenta

a curva decresce indicando que o tempo de reflexão é *negativo*. Para valores de  $\beta$  muito próximos de  $E_0$  a curva decresce rapidamente. Para valores de energia  $E_0$  “suficientemente” maiores que  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ , os gráficos sugerem que o tempo de reflexão  $\tau_{ref}$  tende a zero (quase instantânea). Podemos concluir que a presença do potencial quaterniônico puro provoca um tempo de “adiantamento” na reflexão, isto é, a reflexão ocorre num tempo negativo. Observe que este tempo de adiantamento é relativo à mudança de fase  $\theta^{(r)}$  entre a onda incidente e a onda refletida para um dado valor de  $\alpha$ .

Na figura A.5 exibimos os gráficos para o tempo de transmissão com os mesmos valores de  $\alpha_0$  da figura A.4. O tempo de adiantamento ocorre somente para valores de  $\beta$  muito próximos de  $\sqrt{\alpha_0^2 - 1}$ , caso contrário a transmissão é *instantânea*. Um ponto importante a ser destacado aqui é que este *novo* fenômeno é uma evidente diferença *qualitativa* entre mecânica quântica quaterniônica e mecânica quântica complexa.

Para facilitar a discussão dos casos *complexo* e *puramente quaterniônico* apresentados nas próximas seções, vamos introduzir uma notação mais conveniente para as equações em (4.13). Primeiramente obteremos as derivadas de  $\theta^{(r)}$  e de  $\theta^{(t)}$  com respeito a  $E/V_0$ , onde

$$V_0 = \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}. \quad (4.16)$$

Aplicando a regra da cadeia para derivada de funções compostas, encontramos

$$\begin{aligned} \theta_\alpha^{(r)}(\alpha, \beta) &= \frac{V_1}{V_0} \left[ \frac{d\theta^{(r)}}{d\frac{E}{V_0}} \right], \\ \theta_\alpha^{(t)}(\alpha, \beta) &= \frac{V_1}{V_0} \left[ \frac{d\theta^{(t)}}{d\frac{E}{V_0}} \right]. \end{aligned}$$

Da derivada de  $\rho(\alpha, \beta)$  obtemos

$$\rho_\alpha(\alpha, \beta) = \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_1}} \left[ \frac{mV_1}{\hbar^2 \varepsilon} \frac{d\rho_-}{d\varepsilon} \right].$$

Uma simples manipulação algébrica envolvendo as derivadas acima e a equação (4.13) resulta em,

$$\begin{aligned}
x_{inc}^{max} &= \sqrt{\frac{2E_0}{m}} t, \\
x_{ref}^{max} &= -\sqrt{\frac{2E_0}{m}} t + \frac{\hbar}{V_0} \sqrt{\frac{2E_0}{m}} \Delta_{V_1/V_0}^{ref}, \\
x_{tra}^{max} &= \sqrt{\frac{2E_0}{m}} \Gamma_{V_1/V_0}^{tra} t + \frac{\hbar}{V_0} \sqrt{\frac{2E_0}{m}} \Delta_{V_1/V_0}^{tra},
\end{aligned} \tag{4.17}$$

onde

$$\begin{aligned}
\Delta_{V_1/V_0}^{ref} &= \left[ \frac{d\theta^{(r)}}{d\frac{E}{V_0}} \right]_0, \\
\Gamma_{V_1/V_0}^{tra} &= \left\{ \left[ \frac{d\rho_-}{d\varepsilon} \right]_0 \right\}^{-1}, \\
\Delta_{V_1/V_0}^{tra} &= -\Gamma_{V_1/V_0}^{tra} \left[ \frac{d\theta^{(t)}}{d\frac{E}{V_0}} \right]_0.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

As equações em (4.17) representam, respectivamente, os máximos das ondas incidente, refletida e transmitida. O termo  $\Delta_{V_1/V_0}^{ref}$  introduz o tempo de adiantamento na reflexão, e  $\Delta_{V_1/V_0}^{tra}$  é relativo ao tempo de transmissão. O fator  $\Gamma_{V_1/V_0}^{tra}$  determina a velocidade da onda transmitida.

#### 4.1.2 $\sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$

Para analisarmos esta zona de energia, vamos considerar uma função real  $g(\alpha)$  com máximo em  $\alpha_0$  e nula para valores de  $\alpha$  tais que  $\beta > \alpha$  ou  $\alpha > \sqrt{1 + \beta^2}$ . A superposição das funções de ondas estacionárias na região I com coeficientes  $g(\alpha)$  formam

$$\Psi(x, t) = \int_{\beta}^{\sqrt{1+\beta^2}} d\alpha g(\alpha) \{ e^{i\sqrt{\alpha}x} + r e^{-i\sqrt{\alpha}x} + j\tilde{r} e^{\sqrt{\alpha}x} \} e^{-i\alpha\tau}. \tag{4.19}$$

A fase da onda refletida é determinada por

$$\theta_{ref}(\alpha; \chi, \tau) = -\sqrt{\alpha}\chi - \alpha\tau + 2\theta^{(r)}(\alpha, \beta), \tag{4.20}$$

onde  $2\theta^{(r)}(\alpha, \beta)$  é o argumento do coeficiente  $r$  obtido pela equação (3.18), reescrito em função de  $\alpha$  e  $\beta$  como apresentado na seguinte expressão:

$$\tan \theta(\alpha, \beta) = \frac{\beta^2 \left( \sqrt{\alpha(\sqrt{\alpha^2 - \beta^2 + 1}) + \sqrt{1 - \alpha^2 + \beta^2}} - (\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta^2}) \right)^2 \left( \sqrt{\alpha(1 - \sqrt{\alpha^2 - \beta^2}) + \sqrt{1 - \alpha^2 + \beta^2}} \right)}{(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - \beta^2})^2 \left( \alpha + \sqrt{\alpha(\sqrt{\alpha^2 - \beta^2 + 1})} \right) - \beta^2 \left( \alpha + \sqrt{\alpha(1 - \sqrt{\alpha^2 - \beta^2})} \right)}. \tag{4.21}$$

Aplicando o método de fase estacionária para a onda refletida, encontramos o máximo desta em

$$\chi_{ref}^{max} = 2\sqrt{\alpha_0} [2\theta^{(r)}(\alpha, \beta) - \tau]. \quad (4.22)$$

Isto significa que, na zona B do degrau de potencial quaterniônico, a reflexão não é instantânea. O máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$  no instante

$$\tau_{ref} = 2\theta_{\alpha}^{(r)}(\alpha_0, \beta). \quad (4.23)$$

É interessante observar que nesta região do degrau de potencial podemos ter os casos de energia  $E_0$  maior e de  $E_0$  menor que a altura do potencial complexo, isto é, os casos onde

$$\begin{aligned} \alpha_0 = E_0/V_1 \geq 1 & \quad \text{para} \quad \sqrt{\alpha_0 - 1} < \beta < \alpha_0, \\ \alpha_0 = E_0/V_1 < 1 & \quad \text{para} \quad 0 \leq \beta < \alpha_0. \end{aligned}$$

A figura A.6 corresponde ao caso no qual a energia da partícula é menor que o potencial “complexo”  $V_1$ . Os gráficos mostram o tempo em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$  para diferentes valores de  $\alpha_0$ . Observamos que, assim como na teoria usual, a presença do potencial não nulo provoca um tempo de atraso na reflexão. Notamos que o tempo de atraso decresce rapidamente a medida que  $\beta$  aumenta. Na ausência da perturbação quaterniônica no potencial ( $\beta = 0$ ) reobtemos o caso limite. Segundo a teoria quântica complexa [4], o tempo de atraso é devido à probabilidade da presença não nula da partícula na região onde  $x > 0$ , para o tempo  $t$  muito próximo de 0. O caso de energia maior do que o potencial complexo é apresentado na figura A.7. É importante observar que nesta região do potencial, zona B, a formulação quaterniônica e sua contrapartida complexa apresentam diferenças *quantitativas*.

A equação (4.22) pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} x_{ref}^{max} &= -\sqrt{\frac{2E_0}{m}}t + \frac{2\hbar}{V_0}\sqrt{\frac{2E_0}{m}}\Delta_{V_1/V_0}^{ref}, \\ \Delta_{V_1/V_0}^{ref} &= \left[ \frac{d\theta^{(r)}}{d\frac{E}{V_0}} \right]_0. \end{aligned} \quad (4.24)$$

### 4.1.3 $E < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$

Para este caso vamos escolher uma função real  $g(\alpha)$  que seja nula para  $\alpha > \beta$ , e com máximo em  $\alpha_0$ . Da superposição linear de funções de onda estacionárias,

$$\Psi(x, t) = \int_0^\beta d\alpha g(\alpha) \{e^{i\sqrt{\alpha}x} + r e^{-i\sqrt{\alpha}x} + j\tilde{r} e^{\sqrt{\alpha}x}\} e^{-i\alpha\tau}, \quad (4.25)$$

a fase da onda refletida é obtida pela equação

$$\theta_{ref}(\alpha; \chi, \tau) = -\sqrt{\alpha} \chi - \alpha \tau + 2\theta^{(r)}(\alpha, \beta).$$

Analogamente ao caso anterior, o argumento de  $r$  definido em (3.22) esta escrito em termos de  $\alpha$  e  $\beta$ , explicitamente

$$\tan \theta(\alpha, \beta) = \frac{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2} \left( 2\alpha + \sqrt{2\alpha(\sqrt{1 + \beta^2 - \alpha^2} + 1)} \right) + \alpha \sqrt{2\alpha(\sqrt{1 + \beta^2 - \alpha^2} - 1)}}{\sqrt{\beta^2 - \alpha^2} \left( \sqrt{2\alpha(\sqrt{1 + \beta^2 - \alpha^2} + 1)} + 2\sqrt{1 + \beta^2 - \alpha^2} \right) - \alpha \sqrt{2\alpha(\sqrt{1 + \beta^2 - \alpha^2} - 1)}}. \quad (4.26)$$

O método de fase estacionária determina que a derivada de  $\theta_{ref}(\alpha; \chi, \tau)$  calculada em  $\alpha = \alpha_0$  é zero. A equação da fase da onda mostra que a partícula *não* é refletida instantaneamente caso sua energia  $E_0$  seja menor do que  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ . De fato, o máximo da onda refletida

$$\chi_{ref}^{max} = 2\sqrt{\alpha_0} [-\tau + 2\theta^{(r)}(\alpha_0, \beta)] \quad (4.27)$$

atinge a declividade do potencial ( $x = 0$ ) somente em

$$\tau_{ref} = 2\theta_\alpha^{(r)}(\alpha_0, \beta). \quad (4.28)$$

Na figura A.8 exibimos a gráfico desta função para diferentes valores de  $\alpha_0$ . Podemos perceber que a presença do potencial puramente quaterniônico provoca o tempo de atraso na reflexão da partícula.

O máximo da onda é obtido pela seguinte equação equivalente a (4.27):

$$\begin{aligned} x_{ref}^{max} &= -\sqrt{\frac{2E_0}{m}} t + \frac{2\hbar}{V_0} \sqrt{\frac{2E_0}{m}} \Delta_{V_1/V_0}^{ref}, \\ \Delta_{V_1/V_0}^{ref} &= \left[ \frac{d\theta^{(r)}}{d\frac{E}{V_0}} \right]_0. \end{aligned} \quad (4.29)$$

## 4.2 Limite complexo

Nesta seção reobteremos os resultados obtidos pela formulação complexa da mecânica quântica. Dividimos a seção em dois casos. No primeiro estudaremos o limite complexo das fases  $\theta^{(r)}(\alpha, \beta)$  e  $\theta^{(t)}(\alpha, \beta)$  na zona A do degrau, e mostraremos que a reflexão e transmissão são instantâneas. No segundo caso a mesma análise será feita para a fase da onda refletida na zona B.

### 4.2.1 $E > V_1$

No limite complexo,  $V_{2,3} \rightarrow 0$ , temos

$$\begin{aligned} V_0 &\rightarrow V_1, \\ \rho_- &\rightarrow \rho_c = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1)}. \end{aligned}$$

Das equações (4.9) e (4.10) encontramos

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \theta_n(\alpha, \beta) = \lim_{\beta \rightarrow 0} \theta_a(\alpha, \beta) = 2n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Logo,

$$\theta_\alpha^{(r)}(\alpha, \beta), \theta_\alpha^{(t)}(\alpha, \beta) \rightarrow 0.$$

Os tempos de reflexão e transmissão da partícula, que são determinados pela fórmula (4.18), no caso limite são dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \Delta_1^{ref} &= 0, \\ \Delta_1^{tra} &= 0. \end{aligned} \tag{4.30}$$

Portanto, a reflexão e a transmissão são instantâneas. Os máximos da onda incidente e da onda refletida são obtidos facilmente de (4.17). Temos que

$$\begin{aligned} x_{inc,c}^{max} &= \sqrt{\frac{2E_0}{m}} t = \frac{\hbar\varepsilon_0}{m} t, \\ x_{ref,c}^{max} &= -\sqrt{\frac{2E_0}{m}} t = -\frac{\hbar\varepsilon_0}{m} t. \end{aligned} \tag{4.31}$$

Para a onda transmitida encontramos o máximo em

$$x_{tra,c}^{max} = \frac{\hbar\varepsilon_0}{m} \Gamma_1^{tra} t. \tag{4.32}$$



A fator  $\Gamma_1^{tra}$  determina a velocidade de propagação da onda na região II. Explicitamente, este fator é calculado por

$$\Gamma_1^{tra} = \left\{ \left[ \frac{d\rho_c}{d\varepsilon} \right]_0 \right\}^{-1} = \sqrt{1 - \frac{V_1}{E_0}}. \quad (4.33)$$

A onda transmitida se propaga com velocidade de  $\sqrt{\frac{2}{m}(E_0 - V_1)}$ .

### 4.2.2 $E < V_1$

No limite  $\beta \rightarrow 0$ , a fase  $\theta^{(r)}(\alpha, \beta)$  em (4.38) é obtida como a seguir:

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow 0} \theta^{(r)}(\alpha, \beta) &= \arctan \left[ -\frac{\sqrt{\alpha(1-\alpha)} + \sqrt{1-\alpha^2}}{\alpha + \sqrt{\alpha(\alpha+1)}} \right] \\ &= \arctan \left[ -\frac{\sqrt{1-\alpha}(\sqrt{\alpha} + \sqrt{1+\alpha})}{\sqrt{\alpha}(\sqrt{\alpha} + \sqrt{\alpha+1})} \right] \\ &= \arctan \left[ -\sqrt{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \right]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Vamos denotar por  $\theta(\alpha)$  o limite de  $\theta^{(r)}(\alpha, \beta)$  calculado acima. A derivada de  $\theta(\alpha)$  é facilmente calculada, e resulta na equação

$$\theta'(\alpha) = \frac{1}{2\sqrt{\alpha(1-\alpha)}} = \frac{V_1}{2\sqrt{E(V_1 - E)}}.$$

A velocidade com que a onda refletida se propaga e seu instante de reflexão para a teoria usual, são reobtidos de (4.24):

$$x_{ref,c}^{max} = -\frac{\hbar\varepsilon_0}{m}t + \frac{2\hbar}{V_1} \frac{\hbar\varepsilon_0}{m} \Delta_1^{ref}, \quad (4.35)$$

com

$$\Delta_1^{ref} = \theta'(\alpha_0) = \frac{V_1}{2\sqrt{E_0(V_1 - E_0)}}. \quad (4.36)$$

Portanto a reflexão não é instantânea. Existe um tempo de atraso introduzido por  $\Delta_1^{ref}$ , e o máximo da onda chega ao degrau em  $x = 0$  no tempo

$$t_{ref} = \frac{\hbar}{\sqrt{E_0(V_1 - E_0)}}. \quad (4.37)$$

### 4.3 Limite puramente quaterniônico

Através da análise do limite quaterniônico temos a possibilidade de entender os efeitos que a perturbação quaterniônica representa nos tempos das ondas refletida e transmitida. Além disso, podemos confrontar os “novos” resultados com os apresentados na mecânica quântica complexa. Neste sentido estudaremos o limite  $V_1 \rightarrow 0$  das fases das ondas para a zona A e para a zona C.

#### 4.3.1 $E > \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$

No limite quaterniônico,  $V_1 \rightarrow 0$ , obtemos

$$\begin{aligned} V_0 &\rightarrow \sqrt{V_2^2 + V_3^2}, \\ zw &= \frac{\varepsilon^2 - \rho_c^2}{\varepsilon^2 + \rho_c^2}, \\ \nu_+, \rho_- &\rightarrow \rho_q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{E^2 - V_2^2 - V_3^2}}, \\ t &\rightarrow t_q = \frac{\varepsilon}{\rho_q}, \\ \theta^{(t)} &\rightarrow 0. \end{aligned}$$

A fase do coeficiente  $r$  da onda refletida pode ser calculada diretamente da equação (3.14) como a seguir:

$$\begin{aligned} \lim_{V_1 \rightarrow 0} \theta^{(r)} &= \lim_{V_1 \rightarrow 0} \arctan \left[ \frac{zw\varepsilon(\rho_- + \nu_+)}{(\varepsilon - \rho_-)(\varepsilon + \nu_+) - zw(\varepsilon^2 - \rho_- \nu_+)} \right] \\ &= \arctan [\varepsilon/\rho_q] \\ &= \arctan \left[ \frac{\sqrt{E}}{\sqrt[4]{E^2 - V_2^2 - V_3^2}} \right]. \end{aligned}$$

A expressão acima depende somente da razão  $\gamma = E/\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ . Então podemos escrever

$$\theta(\gamma) = \arctan \left[ \sqrt[4]{\frac{\gamma^2}{\gamma^2 - 1}} \right].$$

Aqui  $\theta(\gamma)$  denota a fase  $\theta^{(r)}$  no limite quaterniônico. A derivada desta função é determinada por

$$\begin{aligned} \theta'(\gamma) &= \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 - 1} + \gamma} \left[ \frac{\gamma^4 \sqrt{\gamma^2 - 1}}{2\sqrt{\gamma^3}} - \frac{\gamma\sqrt{\gamma}}{2\sqrt[4]{(\gamma^2 - 1)^3}} \right] \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{\gamma}(\sqrt{\gamma^2 - 1} + \gamma)\sqrt[4]{(\gamma^2 - 1)^3}}. \end{aligned} \tag{4.38}$$

Das equações em (4.17) temos que

$$\begin{aligned}\Delta_0^{ref} &= \theta'(\gamma_0) \\ \Gamma_0^{tra} &= \left[ \frac{d\rho_q}{d\varepsilon} \right]_0^{-1} = \sqrt[4]{(1 - \gamma_0^{-2})^3}, \\ \Delta_0^{tra} &= 0.\end{aligned}\tag{4.39}$$

Portanto, os máximos das ondas incidente, refletida e transmitida no caso puramente quaterniônico são obtidos por

$$\begin{aligned}x_{inc,q}^{max} &= \frac{\hbar\varepsilon_0}{m}t, \\ x_{ref,q}^{max} &= -\frac{\hbar\varepsilon_0}{m}t + \frac{\hbar}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \frac{\hbar\varepsilon_0}{m} \theta'(\gamma_0), \\ x_{tra,q}^{max} &= \frac{\hbar\varepsilon_0}{m} \sqrt[4]{(1 - \gamma_0^{-2})^3} t.\end{aligned}\tag{4.40}$$

A transmissão é instantânea, enquanto que o tempo de reflexão é obtido pela derivada da fase  $\theta(\gamma)$ . A figura A.9 exhibe o gráfico de  $\theta'(\gamma_0)$  em função de  $\gamma_0 = E_0/\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ . Neste gráfico podemos ver que o crescimento do módulo do potencial aumenta o tempo de adiantamento. O tempo da onda refletida é instantâneo se a perturbação quaterniônica no potencial não for suficientemente próximo do valor da energia da partícula.

### 4.3.2 $E < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$

Da equação (3.22) segue que

$$\lim_{V_1 \rightarrow 0} \theta^{(r)} = \arctan \left[ \frac{(1 + \varepsilon/\sigma) \tan \varphi + 1}{(1 + 2\sigma/\varepsilon) \tan \varphi - 1} \right],$$

onde

$$\begin{aligned}\sigma &= \lim_{V_1 \rightarrow 0} \sigma_{\pm} = \sqrt{\frac{m}{\hbar^2} \sqrt{V_2^2 + V_3^2} - E^2}, \\ \varepsilon/\sigma &= \sqrt{\frac{2E}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2} - E^2}} = \sqrt{2/\tan \varphi}.\end{aligned}$$

Observe que  $2\sigma/\varepsilon = (\tan \varphi)\varepsilon/\sigma$ . O limite acima é reescrito como

$$\begin{aligned}\lim_{V_1 \rightarrow 0} \theta^{(r)} &= \arctan \left[ \frac{(1 + \varepsilon/\sigma) \tan \varphi + 1}{(2\sigma/\varepsilon - 1)[(1 + \varepsilon/\sigma) \tan \varphi + 1]} \right] \\ &= \arctan \left[ \frac{1}{2\sigma/\varepsilon - 1} \right]\end{aligned}$$

Finalmente, introduzindo  $\gamma = E/\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ , obtemos a fase

$$\theta(\gamma) = \arctan \left[ \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt[4]{\gamma^{-2} - 1} - 1} \right].$$

A derivada desta expressão, assim como no caso anterior, introduz uma mudança no tempo de reflexão. Explicitamente,

$$\begin{aligned} \theta'(\gamma) &= \frac{\sqrt{2}}{2\gamma^3 \sqrt[4]{(\gamma^{-2} - 1)^3}} \frac{1}{(\sqrt{2} \sqrt[4]{\gamma^{-2} - 1} - 1)^2 + 1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2} \gamma^3 \sqrt[4]{(\gamma^{-2} - 1)^3} (2\sqrt{\gamma^{-2} - 1} - 2\sqrt{2} \sqrt[4]{\gamma^{-2} - 1} + 2)}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

No limite,  $V_1 \rightarrow 0$ , encontramos o máximo da onda refletida em

$$x_{ref,q}^{max} = -\frac{\hbar\varepsilon_0}{m}t + \frac{\hbar}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \frac{2\hbar\varepsilon_0}{m} \Delta_0^{ref}, \quad (4.42)$$

com

$$\Delta_0^{ref} = \theta'(\gamma_0).$$

Terminamos esta seção discutindo o gráfico da função  $\theta'(\gamma_0)$  apresentado na figura A.10. O tempo de reflexão mostrado no gráfico tem um comportamento interessante. Para valores da perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  muito próximos ou muito acima da energia da partícula, o tempo de atraso cresce rapidamente assumindo valores significativos. Para os demais valores de  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  a função assume baixos valores, mantendo-se próxima de uma constante.

# Capítulo 5

## Conclusão

Em continuidade aos trabalhos desenvolvidos recentemente sobre a barreira [13] e o poço de potencial quaterniônicos [11], estudamos no presente trabalho o degrau de potencial quaterniônico. Quando iniciamos o estudo do degrau de potencial quaterniônico nossos objetivos estavam concentrados em:

- Apresentar as soluções analíticas das ondas planas,
- Desenvolver o formalismo com pacotes de onda,
- Analisar os tempos de “atraso” das ondas aplicando o método de fase estacionária.

A análise das soluções analíticas das ondas planas e dos tempos de reflexão e transmissão deveriam revelar, caso existam, diferenças entre mecânica quântica complexa e quaterniônica. Neste sentido nosso estudo pode ser visto como uma tentativa de se entender onde e se diferenças entre a mecânica quântica complexa e as soluções teóricas obtidas na resolução da equação de Schrödinger na presença do degrau de potencial quaterniônico podem ser vistas. Uma das dificuldades em resolvermos um sistema físico quaterniônico é devido ao fato dos métodos de matemática (da teoria usual), em geral, serem insuficientes para obtermos as soluções do problema. Nos primeiros artigos sobre mecânica quântica quaterniônica que apresentam a equação de Schrödinger na presença de potenciais quaterniônicos [5, 6], a equação diferencial é traduzida a um sistema de equações complexas acopladas e resolvido numericamente. A tradução simplética não apresenta informações sobre as generalizações quaterniônicas de teoremas e técnicas de resolução. No entanto, os recentes resulta-

dos apresentados na teoria diferencial quaterniônica [12, 15] e álgebra linear [9, 10] têm permitido o uso de *novas* técnicas matemáticas que possibilitam o estudo da equação de Schrödinger em  $\mathbb{H}$ . Conhecida a solução da equação de Schrödinger na presença de um potencial quaterniônico constante independente do tempo, linear à direita sobre  $\mathbb{C}$  [12], apresentamos as soluções analíticas das ondas planas para o degrau de potencial quaterniônico.

Tratamos a parte  $j, k$  do potencial quaterniônico  $V_1 + jV_3 - kV_2$  como uma perturbação no potencial complexo, isto é, uma perturbação no potencial da mecânica quântica complexa. Encontramos então, uma nova zona de energia na região do degrau onde o potencial é uma constante não nula e que depende somente da perturbação quaterniônica. Nesta zona de energia a reflexão é total, ou seja, a partícula é sempre refletida ao "chegar" no degrau de potencial. Além disso, a onda plana apresenta um comportamento oscilatório, para um curto intervalo de tempo, na região  $x > 0$  do degrau. No caso de energia total menor do que a energia potencial, a presença da perturbação quaterniônica provoca uma mudança na fase das ondas refletida e transmitida (complexa e puramente quaterniônica),

$$\begin{aligned}\theta_{ref}(\varepsilon; x, t) &= -\varepsilon x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} t + \theta^{(r)}, \\ \theta_{tra}^{(1,i)}(\varepsilon; x, t) &= \rho_- x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} t + \theta^{(t)}, \\ \theta_{tra}^{(j,k)}(\varepsilon; x, t) &= \rho_- x - \frac{\varepsilon^2 \hbar}{2m} t + \theta^{(t)} + \arctan[V_2/V_3],\end{aligned}$$

Isto significa que os tempos de reflexão e transmissão para o potencial quaterniônico não são instantâneos. A análise do método de fase estacionária mostra que esta mudança na fase dos coeficientes de reflexão e transmissão, respectivamente,  $\theta^{(r)}$  e  $\theta^{(t)}$ , provoca o tempo de "adiantamento", ou seja, os máximos das ondas refletida e transmitida atingem o degrau de potencial num instante negativo:

$$\begin{aligned}t_{ref} &= \frac{\hbar}{V_1} \theta_{\alpha}^{(r)}(\alpha_0, \beta), \\ t_{tra} &= \frac{\hbar}{V_1} \theta_{\alpha}^{(t)}(\alpha_0, \beta),\end{aligned}$$

onde  $\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  é a perturbação quaterniônica e  $\alpha_0 = E_0/V_1$  é o centro do pacote de onda. A não instantaneidade da reflexão e transmissão é, conseqüentemente, um puro efeito quaterniônico.

Mostramos que no limite puramente quaterniônico a transmissão, assim como na sua contrapartida complexa  $E > V_1$ , é instantânea. No entanto, a fase do coeficiente de reflexão introduz um tempo de adiantamento. Este fenômeno é evidente diferença *qualitativa* entre mecânica quântica complexa e quaterniônica. Para os demais casos de energia aqui estudados, as diferenças entre as teorias quânticas complexa e quaterniônica são *quantitativas*.

A discussão teórica do formalismo de pacotes de onda é um assunto que merece ser estudado a parte. Uma vez desenvolvido o formalismo de pacotes de onda a aplicação do método de fase estacionária se torna natural e imediato. Listamos algumas das futuras investigações baseadas no estudo deste simples sistema quântico quaterniônico:

- O formalismo de pacotes de onda quaterniônicos, o qual certamente será importante no entendimento do papel que potenciais quaterniônicos desempenham na propagação de ondas e permitirá confirmar e explicar os tempos de reflexão e transmissão obtidos pelo método de fase estacionária.

- A análise das ondas planas para a barreira de potencial quaterniônico, que agora pode ser desenvolvida pela abordagem analítica de dois degraus de potencial.

- O estudo da barreira quaterniônica que deve revelar diferenças qualitativas entre o sistema quântico complexo e quaterniônico.

- Para a difusão acima da barreira, os pacotes de ondas quaterniônicos serão caracterizados por diferentes tempos de reflexão e transmissão com respeito ao caso complexo [2, 3].

- Na zona de tunelamento, o efeito *Hartman* quaterniônico está sendo investigado e confrontado com o standard o qual prediz (para uma longa barreira) transmissão instantânea [21, 27].

- O sistema de K-mesons parece ser o candidato natural para uma proposta experimental quaterniônica.

Esperamos que este trabalho e seus resultados de alguma maneira possam contribuir fisicamente, na procura de uma evidência experimental do potencial quaterniônico, e matematicamente, na aplicação de quatérnions em áreas da matemática.

# Apêndice A

## Figuras



$$\text{Re}[\Phi(x)] \quad \text{vs.} \quad \frac{\sqrt{2mV_1}}{\hbar} x$$

$$E > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha = E/V_1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

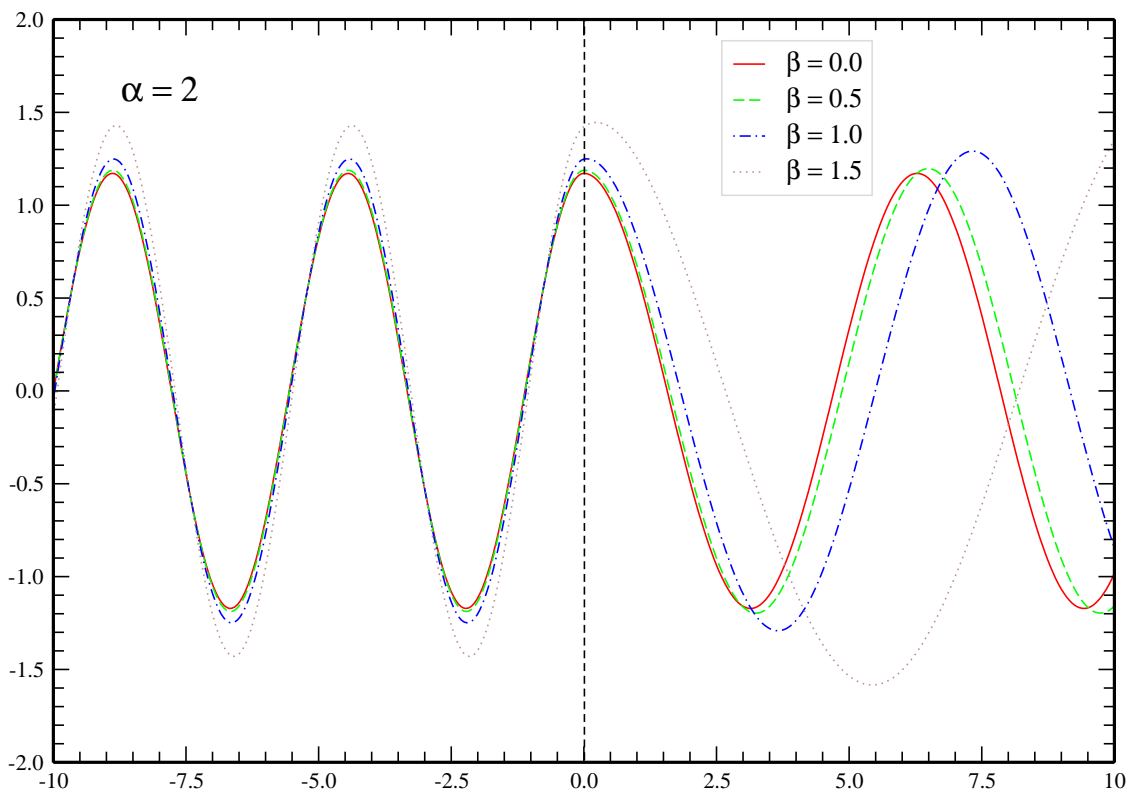


Figura A.1: Gráficos da parte real da função de onda estacionária quaterniônica contra a variável espacial adimensional  $\sqrt{2mV_1} x/\hbar$ . O espaço está dividido pela região I ( $x < 0$ ), onde não existe potencial, e região II ( $x > 0$ ), cujo potencial é constante ( $V_1 + jV_3 - kV_2$ ). A constante  $\alpha$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. A constante  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial  $V_1$ .

$$\text{Re}[\Phi(x)] \quad \text{vs.} \quad \frac{\sqrt{2mV_1}}{\hbar} x$$

$$\sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha = E/V_1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

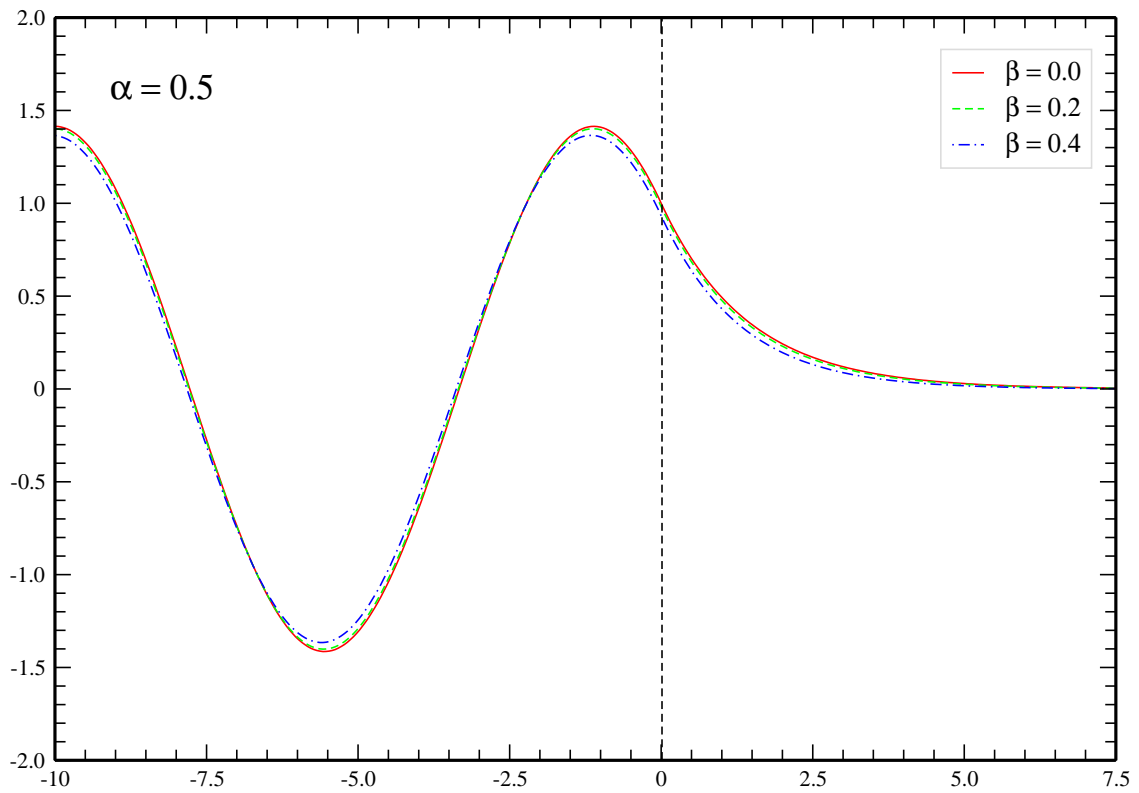


Figura A.2: Gráficos da parte real da função de onda estacionária quaterniônica contra a variável espacial adimensional  $\sqrt{2mV_1}x/\hbar$ . O espaço está dividido pela região I ( $x < 0$ ), onde não existe potencial, e região II ( $x > 0$ ), cujo potencial é constante ( $V_1 + jV_3 - kV_2$ ). A constante  $\alpha$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. A constante  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial  $V_1$ .

$$\text{Re}[\Phi(x)] \quad \text{vs.} \quad \frac{\sqrt{2mV_1}}{\hbar} x$$

$$E < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha = E/V_1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

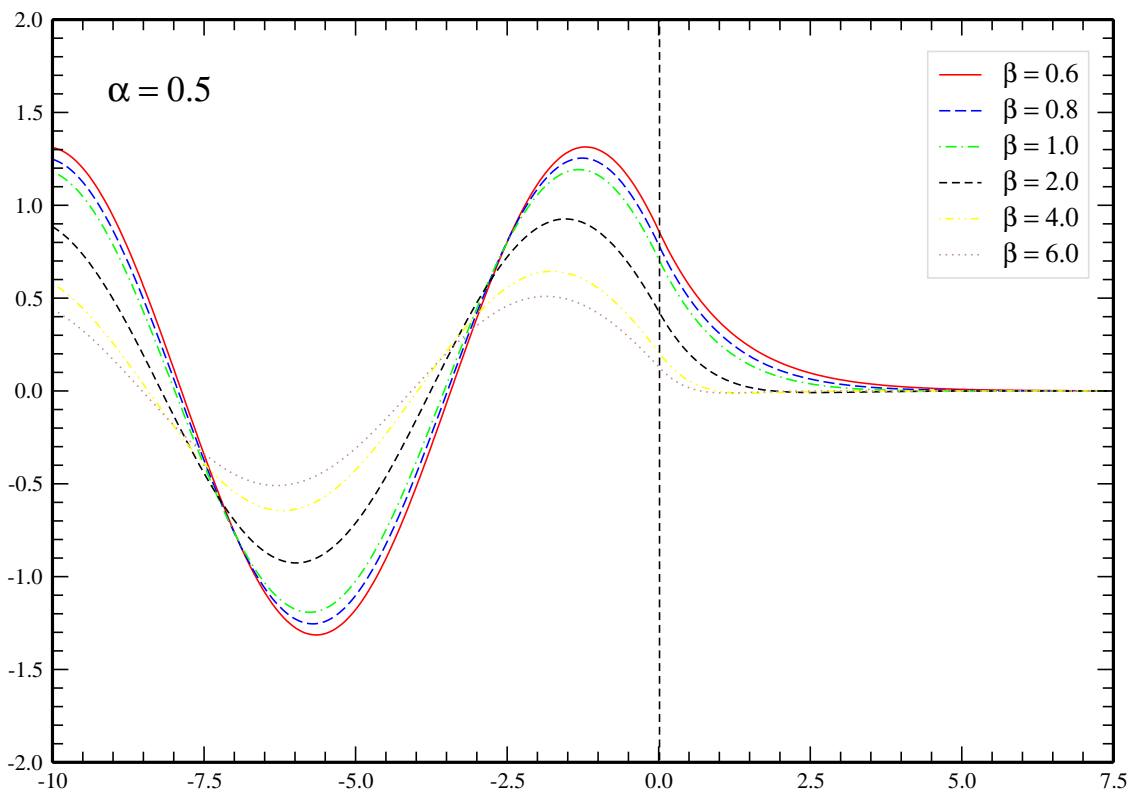


Figura A.3: Gráficos da parte real da função de onda estacionária quaterniônica contra a variável espacial adimensional  $\sqrt{2mV_1} x/\hbar$ . O espaço está dividido pela região I ( $x < 0$ ), onde não existe potencial, e região II ( $x > 0$ ), cujo potencial é constante ( $V_1 + jV_3 - kV_2$ ). A constante  $\alpha$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. A constante  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial  $V_1$ .

### Onda Refletida

$$\theta_\alpha(\alpha_0, \beta) \text{ vs. } \beta$$

$$E_0 > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha_0 = E_0/V_1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

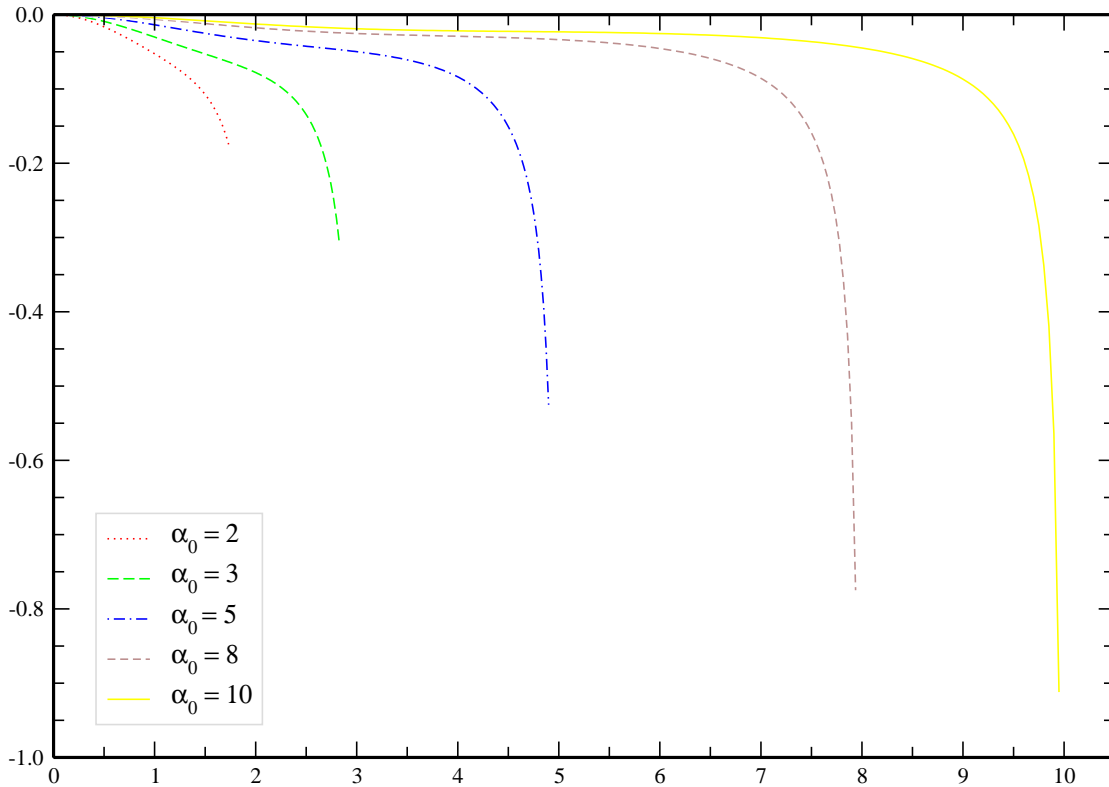


Figura A.4: Gráficos do tempo de reflexão contra a variável  $\beta$ . Os gráficos mostram o instante,  $t = \hbar\theta_\alpha(\alpha_0, \beta)/V_1$ , em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$ . A constante  $\alpha_0$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$ , calculada em  $E_0$  (centro do pacote de onda). A variável  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. Observamos que  $E_0 > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$  implica  $0 \leq \beta < \sqrt{\alpha_0^2 - 1}$ .

### Onda Transmitida

$$\theta_\alpha(\alpha_0, \beta) \text{ vs. } \beta$$

$$E_0 > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha_0 = E_0/V_1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

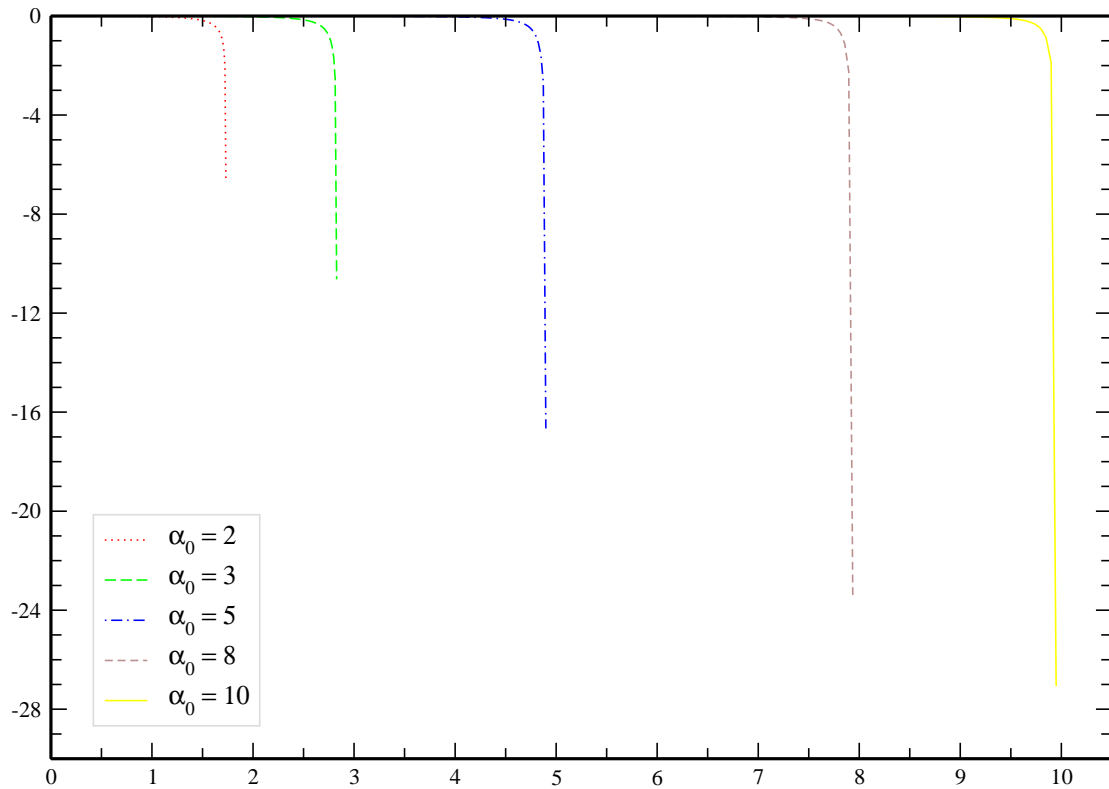


Figura A.5: Gráficos do tempo de transmissão contra a variável  $\beta$ . Os gráficos mostram o instante,  $t = \hbar\theta_\alpha(\alpha_0, \beta)/V_1$ , em que o máximo da onda transmitida atinge o ponto  $x = 0$ . A constante  $\alpha_0$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$ , calculada em  $E_0$  (centro do pacote de onda). A variável  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. Observamos que  $E_0 > \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$  implica  $0 \leq \beta < \sqrt{\alpha_0^2 - 1}$ .

### Onda Refletida

$$\theta_\alpha(\alpha_0, \beta) \text{ vs. } \beta$$

$$\sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E_0 < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha_0 = E_0/V_1 < 1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

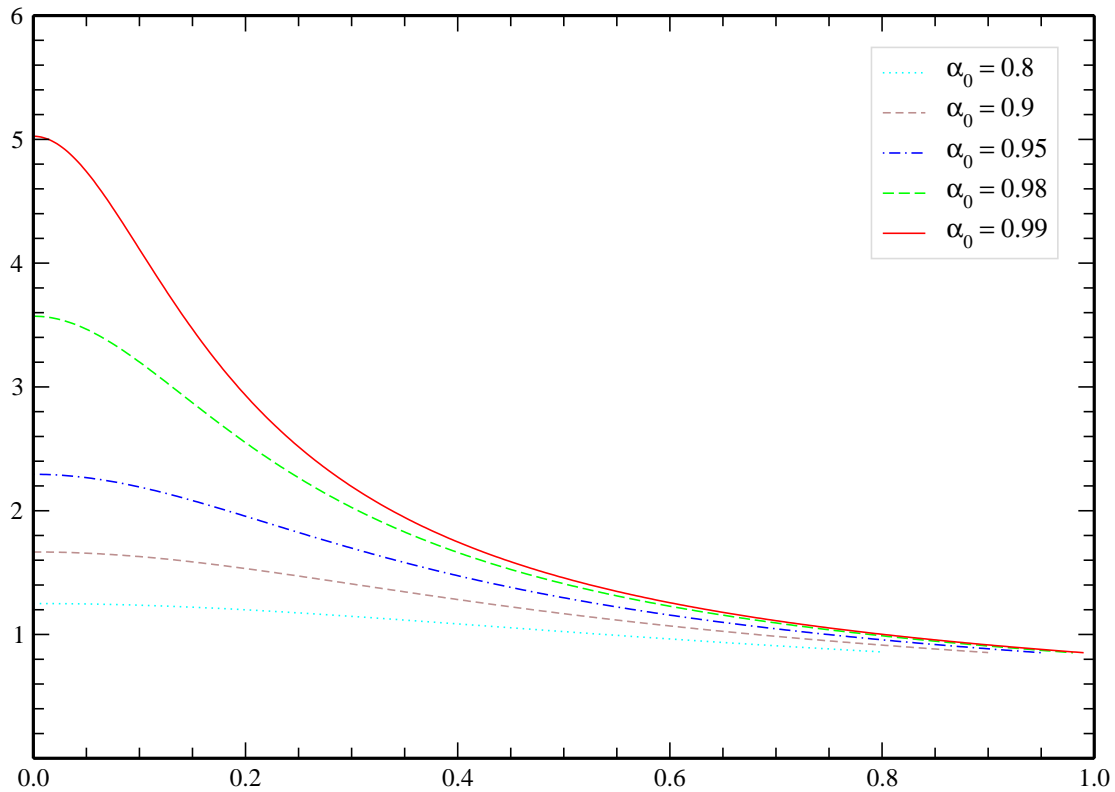


Figura A.6: Gráficos do tempo de reflexão contra a variável  $\beta$ . Os gráficos mostram o instante,  $t = \hbar\theta_\alpha(\alpha_0, \beta)/V_1$ , em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$ . A constante  $\alpha_0$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$ , calculada em  $E_0$  (centro do pacote de onda). A variável  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. Observamos que  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E_0 < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$  implica  $0 \leq \beta < \alpha_0$ .

### Onda Refletida

$$\theta_\alpha(\alpha_0, \beta) \text{ vs. } \beta$$

$$\sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E_0 < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha_0 = E_0/V_1 > 1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

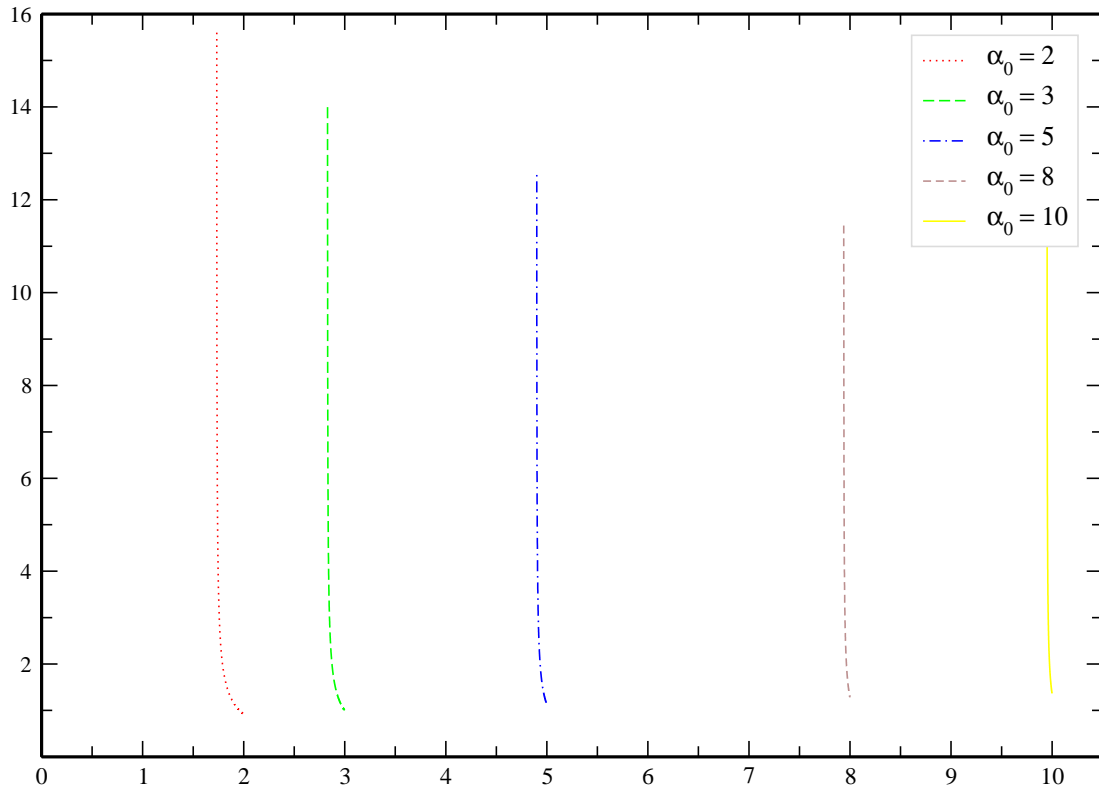


Figura A.7: Gráficos do tempo de reflexão contra a variável  $\beta$ . Os gráficos mostram o instante,  $t = \hbar\theta_\alpha(\alpha_0, \beta)/V_1$ , em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$ . A constante  $\alpha_0$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$ , calculada em  $E_0$  (centro do pacote de onda). A variável  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. Observamos que  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2} < E_0 < \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$  implica  $\sqrt{\alpha_0^2 - 1} < \beta < \alpha_0$ .

### Onda Refletida

$\theta_\alpha(\alpha_0, \beta)$  vs.  $\beta$

$$E_0 < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$$

$$\alpha_0 = E_0/V_1$$

$$\beta = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_1$$

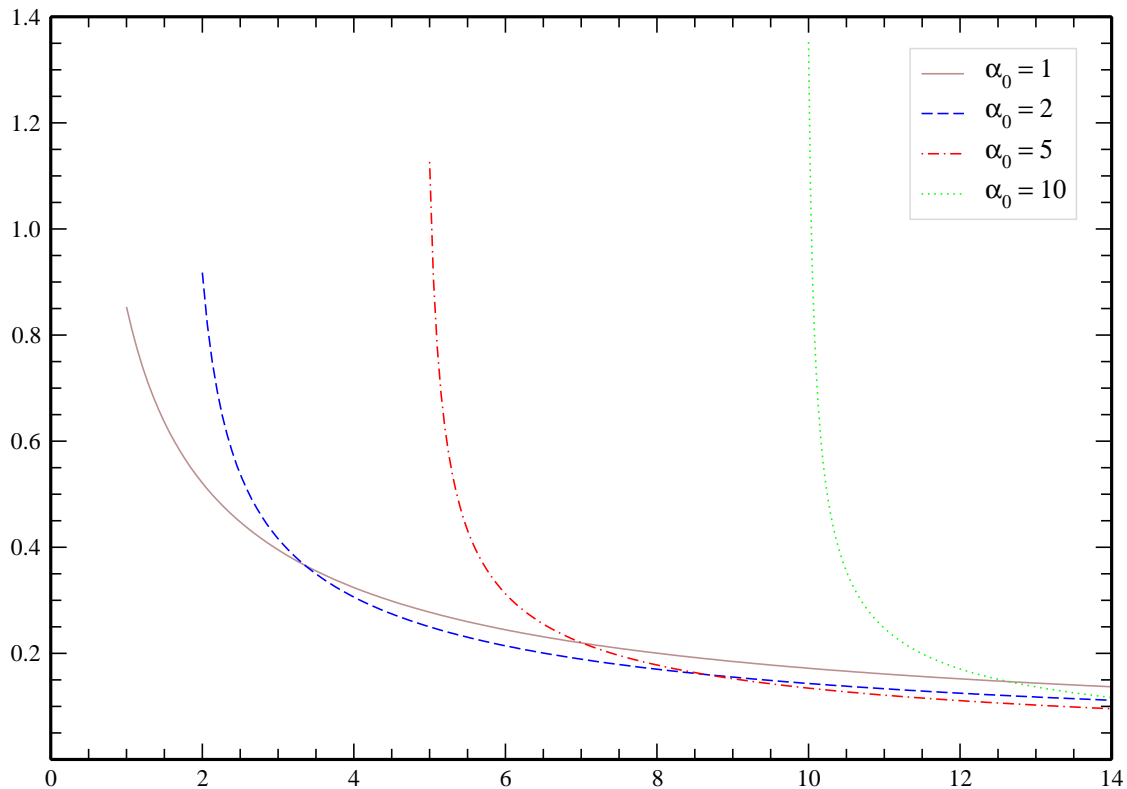


Figura A.8: Gráficos do tempo de reflexão contra a variável  $\beta$ . Os gráficos mostram o instante,  $t = \hbar\theta_\alpha(\alpha_0, \beta)/V_1$ , em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$ . A constante  $\alpha_0$  é a razão entre a energia da partícula e o potencial real  $V_1$ , calculada em  $E_0$  (centro do pacote de onda). A variável  $\beta$  representa a razão entre a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  e o potencial real  $V_1$  da mecânica quântica complexa. Observamos que  $E_0 < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  implica  $\beta > \alpha_0$ .



### Onda Refletida

$$\theta'(\gamma_0) \text{ vs. } \gamma_0$$

$$E_0 > \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$$

$$\gamma_0 = E_0 / \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$$

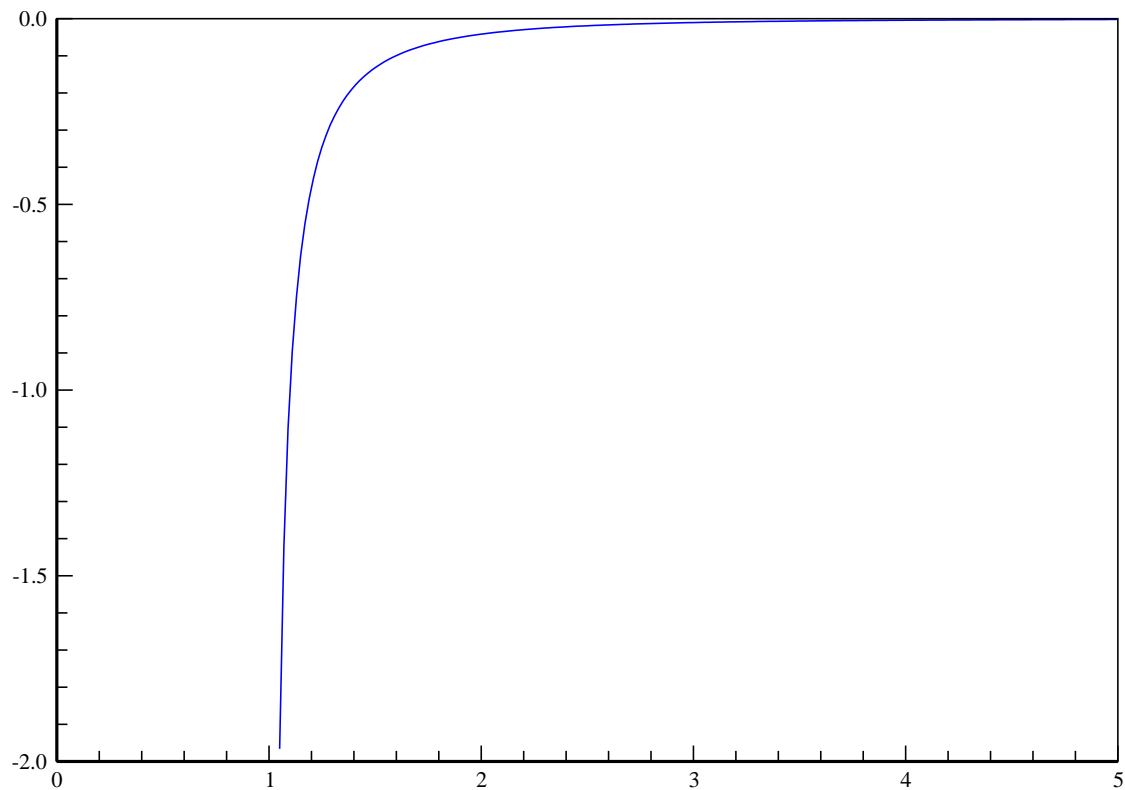


Figura A.9: Gráfico do tempo de reflexão contra a variável  $\gamma_0$  para um degrau de potencial puramente quaterniônico  $[V(x) = jV_3(x) - kV_2(x)]$ . O gráfico mostra o instante  $t = 2\hbar\theta'(\gamma_0)/\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$ . A variável  $\gamma_0$  representa a razão entre a energia  $E$  da partícula e a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ , calculada em  $E_0$ . Observamos que  $\gamma_0 > 1$ . É interessante notar que na mecânica quântica complexa, para o degrau de potencial, o tempo de reflexão é nulo no caso  $E_0 > V_1$  ( $V_1$  é um potencial real).

### Onda Refletida

$$\theta'(\gamma_0) \text{ vs. } \gamma_0$$

$$E_0 < \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$$

$$\gamma_0 = E_0 / \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$$

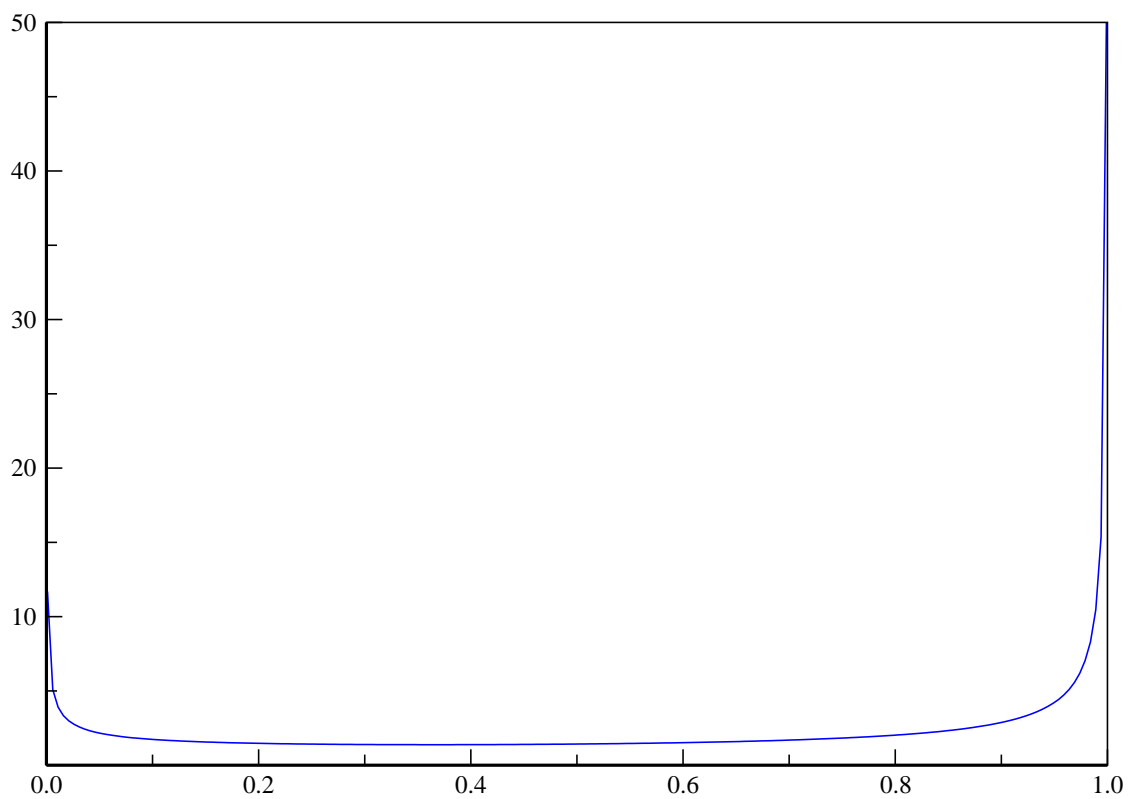


Figura A.10: Gráfico do tempo de reflexão contra a variável  $\gamma_0$  para um degrau de potencial puramente quaterniônico [ $V(x) = jV_3(x) - kV_2(x)$ ]. O gráfico mostra o instante  $t = 2\hbar\theta'(\gamma_0)/\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$  em que o máximo da onda refletida atinge o ponto  $x = 0$ . A variável  $\gamma_0$  representa a razão entre a energia  $E$  da partícula e a perturbação quaterniônica  $\sqrt{V_2^2 + V_3^2}$ , calculada em  $E_0$ . Observamos que  $\gamma_0 < 1$ .

# Referências Bibliográficas

- [1] Adler S. L., *Quaternionic Quantum Mechanics and Quantum Fields*, Oxford University Press, New York, (1995).
- [2] Anderson A., Multiple scattering approach to one-dimensional potential problem, *Am. J. Phys.* **57**, 230-235 (1989).
- [3] Bernardini A., De Leo S. and Rotelli P., Above barrier potential diffusion, *Mod. Phys. Lett. A* **19**, 2717-2725 (2004).
- [4] Cohen-Tannoudji C., Diu B. and Lalöe F., *Quantum Mechanics*, John Wiley and Sons, New York (1977).
- [5] Davies A. J. and McKellar B. H., Non-relativistic quaternionic quantum mechanics, *Phys. Rev. A* **40**, 4209-4214 (1989).
- [6] Davies A. J. and McKellar B. H., Observability of quaternionic quantum mechanics, *Phys. Rev. A* **46**, 3671-3675 (1992).
- [7] De Leo S., Ducati C. G. and Madureira M. T., Analytic plane wave solutions for the quaternionic potential step, *submetido à publicação ao Journal of Physics A*.
- [8] De Leo S., Ducati C. G. and Madureira M. T., Quaternionic potential step diffusion, *em preparação*.
- [9] De Leo S. and Sclarici G., Right eigenvalue equation in quaternionic quantum mechanics, *J. Phys. A* **33**, 2971-2995 (2000).
- [10] De Leo S., Sclarici G. and Solombrino L., Quaternionic eigenvalue problem, *J. Math. Phys.* **43**, 5815-5829 (2002).

- 
- [11] Ducati C. G. and De Leo S., Quaternionic bound states, *J. Phys. A* **38**, 3443-3454 (2005).
- [12] Ducati C. G. and De Leo S., Quaternionic differential operators, *J. Math. Phys.* **42**, 2236-2265 (2001).
- [13] Ducati C. G., De Leo S. and Nishi C., Quaternionic potentials in non relativistic quantum mechanics, *J. Phys. A* **35**, 5411-5426 (2002).
- [14] Ducati C. G. and De Leo S., Real linear quaternionic differential operators, *Comp. Math. Appl.* **48**, 1893-1903 (2004).
- [15] Ducati C. G. and De Leo S., Solving simple quaternionic differential equations, *J. Math. Phys.* **44**, 2224-2233 (2003).
- [16] Eisberg R. and Resnick R., *Quantum Physics*, John Wiley and Sons, New York (1974).
- [17] Gasiorowicz S., *Quantum Physics*, John Wiley and Sons, New York (1974).
- [18] Hamilton W. R., *Elements of Quaternions*, Chelsea Publishing Co., New York (1969).
- [19] Hamilton W. R., *Lectures on Quaternions*, Dublin (1853).
- [20] Hamilton W. R., *The Mathematical Papers of Sir William Rowan Hamilton*, Cambridge UP, Cambridge (1967).
- [21] Hartman T. E., Tunnelling of a wave packet, *J. Appl. Phys.* **33**, 3427-3432 (1962).
- [22] Heaviside O., *Electromagnetic Theory*, American Mathematical Society, 1970.
- [23] Kaiser H., George E. A. and Werner S. A., Neutron interferometric search of quaternions in quantum mechanics, *Phys. Rev. A* **29**, 2276-2279 (1984).
- [24] Maxwell J. C., *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, Oxford (1873).

- 
- [25] Maxwell J. C., *The Scientific Letters and Papers of James Clerk Maxwell*, vol.II, ed. P.M. Harman, Cambridge Un. Press., 570-576 (1995).
- [26] Merzbacher E., *Quantum Mechanics* New York: *Quantum Physics*, John Wiley and Sons, New York (1998).
- [27] Olkhovsky V. S., Recami E. and Jakiel J., Unified time analysis of photon and particle tunnelling, *Phys. Rep.* **398**, 133-178 (2004).
- [28] Peres A., Proposed test for complex versus quaternion quantum theory, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 683-686 (1979).
- [29] Soffel M., Müller B. and Greiner W., Stability and decay of the Dirac vacuum in external gauge fields, *Phys. Rep.* **85**, 51-122 (1982).