

10: Exemplos simples

- Poço quadrado unidimensional
- Conectando as soluções
- A equação da continuidade
- A barreira de potencial
- Condições de contorno

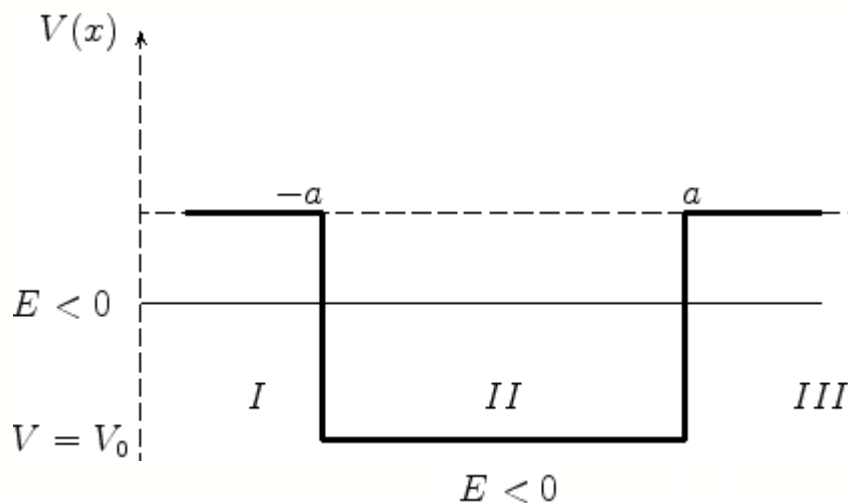
Poço quadrado unidimensional

Uma partícula de massa m se move sob a ação de um campo de forças que

confere à partícula uma energia potencial $V(x)$ tal que

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{para } |x| < a \\ 0 & \text{para } |x| > a \end{cases} \quad (71)$$

como descrito na figura.



Vamos considerar primeiro o caso $E < 0$, onde E é a energia total da partícula. No caso clássico, a partícula não pode atingir as

regiões I e III. De fato, sua energia total é $E = mv^2/2 + V(x)$, ou

seja, $mv^2/2 = E - V(x)$. Nas regiões I e III temos $V(x) = 0$, o que

daria $mv^2/2 = E$. Mas $E < 0$, o que daria uma energia cinética negativa, impossível.¹⁰

Na região II não há problema, pois teríamos

$$\frac{mv^2}{2} = E + V_0 \quad (72)$$

e é possível ter energia cinética positiva mesmo com $E < 0$.

A equação de Schrödinger para os estados estacionários é

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \phi(x) = E\phi(x) \quad (73)$$

Para $x < -a$ ou $x > a$, temos $V(x) = 0$, e

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} = E\phi(x) \quad (74)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi = \frac{2m|E|}{\hbar^2}\phi \quad (75)$$

Pondo

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \quad (76)$$

temos

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \kappa^2\phi \quad (77)$$

cuja solução geral é

$$\phi = C e^{-\kappa x} + A e^{\kappa x} \quad (78)$$

Para $x > 0$ o termo em $e^{\kappa x}$ é inadequado, pois daria uma probabilidade de localização da partícula tendendo a infinito para $x \rightarrow \infty$. Logo, temos de tomar $C' = 0$. Assim,

Autor: Henrique Fleming

$$\phi(x) = C e^{-\kappa x} \text{ para } x > 0. \quad (79)$$

Por um raciocínio análogo,

$$\phi(x) = A e^{\kappa x} \text{ para } x < 0. \quad (80)$$

Nas soluções acima C e A são constantes arbitrárias, a determinar posteriormente.

Na região interna, $V(x) = -V_0$, e a equação é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} = (E + V_0)\phi(x) \quad (81)$$

ou

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)\phi(x) \quad (82)$$

Pondo

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)} \quad (83)$$

temos a solução geral

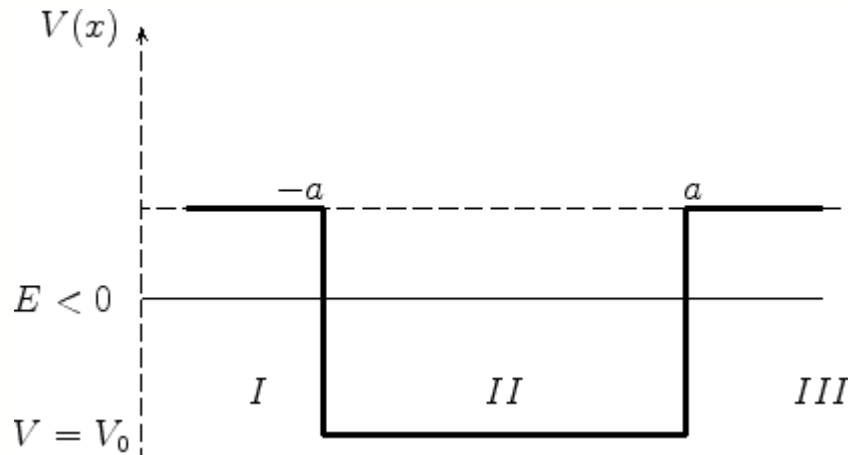
$$\phi(x) = B \sin qx + B' \cos qx \quad (84)$$

Conectando as soluções

A energia potencial $V(x)$ descrita acima é uma função descontínua, e portanto

não-diferenciável, nos pontos $x = -a$ e $x = a$. A equação diferencial deve

ser, então, tratada como 3 equações, uma para cada região onde $V(x)$ é contínua e diferenciável. Por isso a resolvemos separadamente para as regiões I, II e III. O potencial descontínuo é uma idealização de um potencial semelhante, mas de “bordas arredondadas”, alguma coisa assim:



A razão prática para tratar o potencial idealizado, e não o real", é que assim é muito mais fácil resolver a equação diferencial. Landau[3] trata, no exercício 5 do §23, um problema do tipo acima, em que o potencial é

$$V(x) = -\frac{V_0}{\cosh^2 \alpha x}.$$

É possível determinar os níveis de energia e as funções de onda dos estados estacionários, mas o uso de funções hipergeométricas torna desaconselhável seu tratamento em um curso introdutório.

O preço que se paga pelo uso de um potencial descontínuo é: como "ligar" entre si as soluções das três regiões? A matemática nos dá a chave: como a equação diferencial é de segunda ordem, sua solução é determinada dando-se, em um ponto, o valor da função e de sua derivada primeira. Então, para conectar as regiões, procedemos assim: em um ponto comum às regiões I e II (este ponto

é $x = -a$) exigimos que $\phi_I = \phi_{II}$ e $d\phi_I/dx = d\phi_{II}/dx$, onde ϕ_I é a solução na região I, e ϕ_{II} é a solução na região II. Para conectar as regiões II e III, agimos da mesma forma:

$$\phi_{II}(a) = \phi_{III}(a) \text{ e } \frac{d\phi_{II}(a)}{dx} = \frac{d\phi_{III}(a)}{dx}$$

Em $x = a$,

$$C e^{-\kappa a} = B \sin qa + B' \cos qa \quad (85)$$

$$-\kappa C e^{-\kappa a} = qB \cos qa - qB' \sin qa \quad (86)$$

Em $x = -a$,

$$Ae^{-\kappa a} = -B \sin qa + B' \cos qa \quad (87)$$

$$\kappa Ae^{-\kappa a} = qB \cos qa + qB' \sin qa \quad (88)$$

É uma questão de técnica determinar as constantes. Dividindo (85) por (87) temos:

$$\frac{C}{A} = \frac{B \sin qa + B' \cos qa}{-B \sin qa + B' \cos qa} = \frac{B \tan qa + B'}{-B \tan qa + B'} \quad (89)$$

Pondo $\tan qa = t$, temos

$$C \frac{tB + B'}{-tB + B'} \quad (90)$$

Dividindo (86) por (88) temos

$$-\frac{C}{A} = \frac{qB \cos qa - qB' \sin qa}{qB \cos qa + qB' \sin qa} \quad (91)$$

ou

$$C \frac{tB' - B}{tB' + B} \quad (92)$$

Combinando (90) e (92), temos

$$\frac{C}{A} = \frac{tB + B'}{-tB + B'} = \frac{tB' - B}{tB' + B} \quad (93)$$

De onde se tira sem dificuldade que

$$(t^2 + 1)BB' = 0 \quad (94)$$

Isto nos informa que temos ou $B = 0$ ou $B' = 0$. Para $B = 0$ as funções são, na região $-a \leq x \leq a$, cosenos, ou seja, são funções pares de x . Para $B' = 0$, são senos, ou seja, funções ímpares de x . Vamos tratar os dois casos separadamente.

(i) $B' = 0$ (funções ímpares).

$$\phi(x) = B \sin qx \text{ para } |x| < a \quad (95)$$

$$\phi(x) = -C e^{\kappa x} \text{ para } x < -a \quad (96)$$

$$\phi(x) = C e^{-\kappa x} \text{ para } x > a \quad (97)$$

Note que $A = C$, pois $\phi(a) = -\phi(-a)$, já que a função é ímpar.

Para $x = a$ temos as relações:

$$B \sin qa = C e^{-\kappa a} \quad (98)$$

$$qB \cos qa = -\kappa C e^{-\kappa a} \quad (99)$$

É desnecessário fazer uso das relações em $x = -a$, porque, sendo a função ímpar, elas repetem as relações em $x = a$. Dividindo a de cima pela de baixo, obtém-se:

$$\tan qa = -\frac{q}{\kappa} \quad (100)$$

É esta equação que irá determinar para que valores da energia existem estados estacionários nesse poço. Equações deste tipo (que não são equações algébricas¹¹, e só em raros casos podem ser resolvidas analiticamente. Este não é, infelizmente, um desses raros casos. Recorre-se então a soluções numéricas. Neste particular caso, porém, é possível usar um método gráfico que ilustra muito bem as características gerais da solução.

Autor: Henrique Fleming

Em primeiro lugar, vamos escrever (100) de outra forma. Introduzo as

variáveis $\xi = qa$ e $\eta = \kappa a$, que são tais que

$$\xi^2 + \eta^2 = q^2 a^2 + \kappa^2 a^2 = a^2 (q^2 + \kappa^2) \quad (101)$$

ou

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \quad (102)$$

Nessas variáveis, a equação (100) fica

$$\tan \xi = -\frac{\xi}{\eta} \quad (103)$$

Mas

$$\eta^2 = a^2 \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - \xi^2, \quad (104)$$

logo,

$$-\frac{\xi}{\eta} = -\xi \left[\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - \xi^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (105)$$

e a equação (103) se escreve

$$\tan \xi = -\xi \left[\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - \xi^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (106)$$

Cada solução desta equação dá um valor de ξ , e, portanto, um valor de q , ou seja, de $|E|$. Esta é, por isso, a equação para os autovalores da energia.

A ideia é a seguinte: traço os gráficos da função $\tan \xi$ e da função que está no segundo membro de (106). Onde as curvas se cortem estarão os valores de ξ que são as soluções de (106).

Para traçar a curva da função que está no segundo membro, vamos estudar um pouco suas propriedades. Vamos analisar a função

$$f(\xi) = -\xi \left[\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - \xi^2 \right]^{-\frac{1}{2}} = -\xi (\mathcal{A}^2 - \xi^2)^{-\frac{1}{2}} \quad (107)$$

Sua derivada pode ser escrita, após alguma álgebra,

$$f'(\xi) = -\frac{\mathcal{A}^2}{(\mathcal{A}^2 - \xi^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (108)$$

e é sempre negativa, tornando-se $-\infty$ para $\xi = \mathcal{A}$, isto é

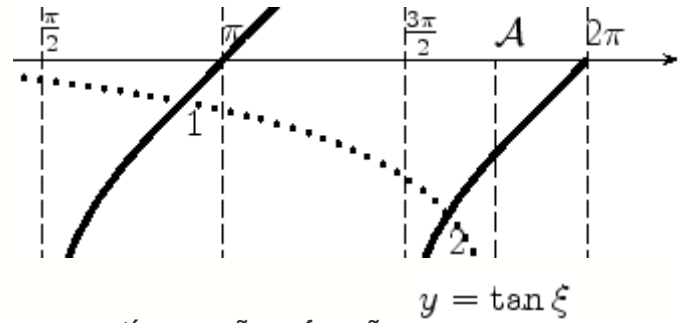
$$\xi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0} a \quad (109)$$

O gráfico abaixo contém as curvas $y = \tan \xi$ e $y = f(\xi)$. As soluções da equação

$$\tan \xi = -\xi \left[\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - \xi^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (110)$$

são as interseções dessas duas curvas. Como $\xi = qa$ e $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|)}$

, os valores de ξ que satisfazem a equação acima permitem calcular os valores de E correspondentes. Esses serão os valores possíveis para a energia do sistema.



Na figura, as curvas contínuas são a função $y = \tan \xi$ e a curva pontilhada é a função $y = f(\xi)$. Os pontos 1 e 2 correspondem às soluções da equação.

Vemos assim que o número de autovalores da energia para os estados ímpares é finito, podendo ser nulo (se $A < \frac{\pi}{2}$).

(ii) $B = 0$ (soluções pares).

Neste caso as equações ficam:

$$C e^{-\kappa a} = B' \cos qa \quad (111)$$

$$-\kappa C e^{-\kappa a} = -qB' \sin qa \quad (112)$$

$$A e^{-\kappa a} = B' \cos qa \quad (113)$$

$$\kappa A e^{-\kappa a} = qB' \sin qa \quad (114)$$

Comparando (111) com (113) vemos que $A = C$. Dividindo (114) por (113) temos, então,

$$\frac{\kappa}{q} = \tan qa \quad (115)$$

e, introduzindo de novo as variáveis $\xi = aq$ e $\eta = \kappa a$,

$$\tan \xi = \frac{\eta}{\xi} \quad (116)$$

com

$$\eta = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 - \xi^2} \quad (117)$$

de maneira que a equação que determina os autovalores da energia é

$$\tan \xi = \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 - \xi^2} . \quad (118)$$

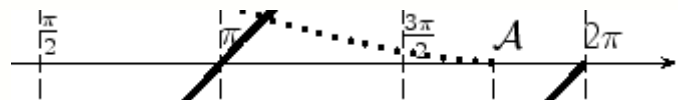
Seja

$$f(\xi) = \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 - \xi^2} \equiv \frac{1}{\xi} \sqrt{\mathcal{A}^2 - \xi^2} \quad (119)$$

Temos que $\xi \leq \mathcal{A}$ ($\xi > 0$) e $f(\mathcal{A}) = 0$, e, ainda,

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} f(\xi) = \infty \quad (120)$$

$$\frac{df}{dx} = -\frac{1}{\sqrt{\mathcal{A}^2 - \xi^2}} - \frac{1}{\xi^2} \sqrt{\mathcal{A}^2 - \xi^2} < 0 \text{ para todo } \xi \quad (121)$$



A figura mostra algumas soluções da equação para os autovalores da energia . São as interseções entre a curva pontilhada e o gráfico da tangente. Note-se que, por pequeno que seja \mathcal{A} , sempre haverá ao menos uma solução.

Podemos concluir então que o poço quadrado possui sempre soluções de energia negativa. Os autovalores da energia de tais estados são discretos e em número finito. O menor valor, correspondente ao *estado fundamental*, ocorre para um estado cuja função de onda é par.

A equação da continuidade

A interpretação probabilística da mecânica quântica é introduzida pelo postulado

de Born¹², que diz que $|\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$ é a probabilidade de a partícula,

cuja função de onda é $\psi(x, y, z)$, estar, em um determinado instante, num

elemento de volume $dx dy dz$ em torno do ponto de coordenadas x, y, z .

Queremos examinar o que ocorre com $|\psi(x, y, z)|^2$ quando o movimento da partícula é levado em conta.

A equação de Schrödinger diz que

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi . \quad (122)$$

Tomando-se o complexo conjugado, termo a termo, temos

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^* . \quad (123)$$

Multiplicando (122) à direita por ψ^* e (123) à esquerda por ψ e subtraindo, obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left((\nabla^2 \psi) \psi^* - \psi \nabla^2 \psi^* \right) \quad (124)$$

O segundo membro pode ser posto numa forma mais transparente, notando que

$$\vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi) = \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi + \psi^* \nabla^2 \psi \quad (125)$$

ou

$$\psi^* \nabla^2 \psi = \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi) - \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi \quad (126)$$

Autor: Henrique Fleming

Tomando o complexo conjugado desta relação:

$$\psi \vec{\nabla}^2 \psi^* = \vec{\nabla} \cdot (\psi \vec{\nabla} \psi^*) - \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \psi^* \quad (127)$$

Subtraíndo (127) de (126),

$$((\vec{\nabla}^2 \psi) \psi^* - \psi \vec{\nabla}^2 \psi^*) = \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (128)$$

Levando (128) ao segundo membro de (124), chega-se a

$$i\hbar \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (129)$$

Introduzindo as notações

$$\rho = |\psi|^2 \quad (130)$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (131)$$

temos, então,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (132)$$

que tem a forma da equação da continuidade, conhecida seja da mecânica dos fluidos, onde explicita a conservação da massa do fluido, seja do eletromagnetismo, onde faz o mesmo para a conservação da carga. Poderíamos então dizer que ela expressa, aqui, a conservação de probabilidade.

Assim como, no eletromagnetismo, a equação da continuidade fornece detalhes sobre como se dá a conservação da carga ¹³, na mecânica quântica ela faz o mesmo com a probabilidade.

Aqui convém adotar uma linguagem que, embora equivalente, é mais familiar do que a que usamos até agora. Suponhamos que, em vez de uma partícula, considerássemos um conjunto de réplicas da partícula, idênticas, ou seja, com a

mesma função de onda, e independentes, isto é, que não interagem. Sejam N essas réplicas. Se normalizarmos a função de onda de modo que

$$\int d^3\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 = N, \quad (133)$$

estendendo-se a integral a todo o espaço, e considerarmos um volume V delimitado por uma superfície S fechada, a integral

$$N_V = \int_V d^3\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 \quad (134)$$

dará, não a probabilidade de uma partícula estar em V , mas o número N_V de partículas, das N existentes, que estão dentro de V . Seja \vec{n} o campo das normais externas à superfície S . Temos

$$\frac{dN_V}{dt} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3\vec{r} = - \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} d^3\vec{r} = - \int_S \vec{j} \cdot \vec{n} dS \quad (135)$$

onde, na última passagem, fizemos uso do teorema do divergente. Suponhamos

que N_V decresça com o tempo. Então $\frac{dN_V}{dt} < 0$, e

$$\int_S \vec{j} \cdot \vec{n} dS > 0. \quad (136)$$

A Eq.(136) mede, portanto, o número de partículas que, na unidade de tempo, saem do volume V , atravessando a superfície S ¹⁴(este saem, para ser mais preciso, é o número de partículas que saem menos o de partículas que entram, por unidade de tempo). Depreende-se disso que, se dS é um trecho infinitesimal de uma superfície, e se \vec{n} for uma normal a ela, então

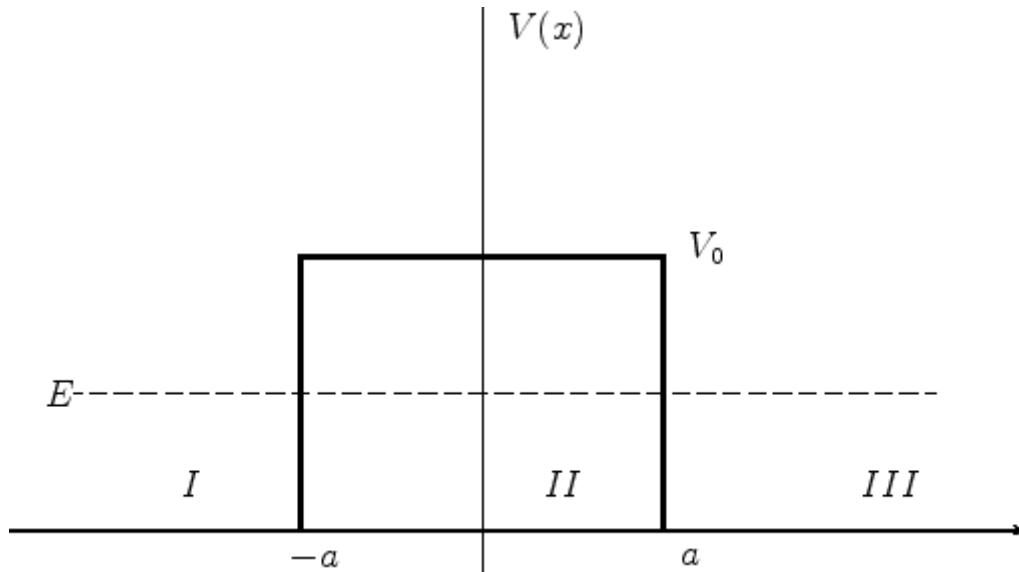
$$\vec{j} \cdot \vec{n} dS$$

é o número (resultante) de partículas que atravessam dS por unidade de tempo no sentido indicado pela normal. Se o número for negativo, o fluxo majoritário

será no sentido de $-\vec{n}$.

A barreira de potencial

Uma partícula de massa m se move num campo de forças, com uma energia potencial da forma



ou,

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para } |x| < a \\ 0 & \text{para } |x| > a \end{cases}$$

sendo sua energia total E localizada entre 0 e V_0 . Vamos procurar seus estados estacionários. Para especificar mais o problema, digamos que a partícula incide sobre a barreira vindo da esquerda.

Se estivéssemos tratando de estados localizados (*pacotes de onda*), a caracterização deste particular problema (incidência da esquerda para a direita) seria trivial. Mas, para estados estacionários, isto é, tais que a probabilidade de posição não depende do tempo, isto é mais sutil. Recorramos a uma imagem clássica. Para conseguir um fenômeno análogo (isto é, sem dependência temporal) na mecânica clássica, precisamos recorrer a muitas partículas, incidindo sobre a barreira da esquerda para a direita. Imaginemos um fluxo contínuo dessas partículas. Depois de um certo tempo, teremos uma figura que não se altera mais, constituída por um certo número de partículas incidindo sobre a barreira, superpostas a um fluxo de partículas refletidas por ela. Embora cada partícula esteja se movendo, o conjunto todo parece parado, no regime

estacionário. O fato de as partículas virem da esquerda pode ser descoberto, neste regime estacionário, pelo fato de que há partículas refletidas à esquerda da barreira.

Passemos ao caso quântico. No regime estacionário esperamos ter, como no caso clássico, ondas incidentes e ondas refletidas, à esquerda da barreira. Mas, e esta é a principal diferença introduzida pela mecânica quântica neste problema, pode haver ondas *saindo* da barreira, no lado direito. O que caracteriza, então, o problema estacionário como advindo de uma partícula incidente da esquerda para a direita é que, do lado direito da barreira, existem apenas partículas afastando-se da barreira.

Para $|x| > a$ temos as regiões I e III, onde a partícula não está sujeita a nenhuma força. Nestes casos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (137)$$

ou

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \quad (138)$$

onde usamos

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (139)$$

A solução geral de (138) é

$$\psi(x) = A e^{ikx} + A' e^{-ikx} \quad (140)$$

e é um estado estacionário, portanto, com dependência temporal dada por uma exponencial:

$$\psi(x,t) = \left(A e^{ikx} + A' e^{-ikx} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (141)$$

onde

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (142)$$

A corrente de probabilidade

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi)$$

dá, para a as parcelas que constituem a função (140):

(i) Para $\psi(x) = \exp ikx$ $k > 0$
(),

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) = \frac{\hbar k}{m} = v \quad (143)$$

ou seja, e^{ikx} representa uma partícula com velocidade positiva, movendo-se da esquerda para a direita.

(ii) Para $\psi(x) = \exp -ikx$ $v < 0$, temos , e a partícula se move da direita para a esquerda.

Para fixar o nosso problema, diremos então que, na região I teremos

$$\text{Para. } x < -a \quad \psi(x) = AE^{ikx} + A'e^{-ikx} \quad (144)$$

que inclui a partícula incidente ($\exp ikx$) e a refletida ($\exp -ikx$).

Na região III tenderíamos a supor que a função de onda fosse zero, baseando-se na mecânica clássica, pois uma partícula clássica não pode atravessar a barreira: na zona II ela teria uma energia cinética negativa! Porém, se fizéssemos esta hipótese, não encontraríamos solução. Pomos, então,

$$\text{Para. } x > a \quad \psi(x) = C e^{ikx} \quad (145)$$

que descreve uma partícula que, vindo da esquerda, ultrapassou a barreira.

Finalmente, dentro da barreira (região II), a equação de Schrödinger é

Autor: Henrique Fleming

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \quad (146)$$

ou

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi \quad (147)$$

com

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) . \quad (148)$$

A solução geral desta equação de Schrödinger é

$$\psi(x) = B e^{-\kappa x} + B' e^{\kappa x} \text{ com } \kappa > 0 . \quad (149)$$

Vamos denominar “função de onda incidente” ao termo

$$A e^{ikx} , \quad (150)$$

“função de onda refletida” ao termo $A' e^{-ikx}$, e “função de onda transmitida” ao termo $C e^{ikx}$.

A densidade de corrente incidente é

$$j_I = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 . \quad (151)$$

Definimos

$$j_R = \frac{\hbar k}{m} |A'|^2 \quad (152)$$

como a densidade de corrente refletida, e

$$j_T = \frac{\hbar k}{m} |C|^2 \quad (153)$$

como a densidade de corrente transmitida. Então, devemos ter (para que não desapareçam partículas),

$$j_I = j_T + j_R . \quad (154)$$

Autor: Henrique Fleming

Definido os coeficientes de reflexão e transmissão por

$$R = \frac{j_R}{j_I} \quad (155)$$

$$T = \frac{j_T}{j_I} \quad (156)$$

podemos então escrever a relação entre as correntes como

$$R + T = 1 \quad (157)$$

Note que a densidade de corrente dentro da barreira é zero (calcule!). Logo, usando

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (158)$$

vemos que, dentro da barreira, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, ou seja, ρ é constante. Logo, não há variação no número de partículas, dentro da barreira.

Condições de contorno

A continuidade das funções de onda e suas derivadas em $x = -a$ e $x = a$ dá as seguintes condições:

(i) Para $x = -a$:

$$A e^{-ika} + A' e^{ika} = B e^{\kappa a} + B' e^{-\kappa a} \quad (159)$$

$$ikA e^{-ika} - ikA' e^{ika} = -\kappa B e^{\kappa a} + \kappa B' e^{-\kappa a} \quad (160)$$

(ii) Para $x = a$:

$$C e^{ika} = B e^{-\kappa a} + B' e^{\kappa a} \quad (161)$$

$$ikC e^{ika} = -\kappa B e^{-\kappa a} + \kappa B' e^{\kappa a} \quad (162)$$

Dividindo (161) por (162):

$$\frac{1}{ik} = \frac{B e^{-\kappa a} + B' e^{\kappa a}}{-\kappa B e^{-\kappa a} + \kappa B' e^{\kappa a}} \quad (163)$$

de onde se tira

$$(ik + \kappa)e^{-\kappa a} B + (ik - \kappa)e^{\kappa a} B' = 0 \quad (164)$$

Como a função de onda dentro da barreira é

$$\psi(x) = B e^{-\kappa x} + B' e^{\kappa x} \quad (165)$$

temos, escrevendo B' em termos de B ,

$$\psi(x) = B \left\{ e^{-\kappa x} + \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} e^{-2\kappa a} e^{\kappa x} \right\} \quad (166)$$

onde se vê que o termo dominante é a exponencial decrescente $\exp -\kappa x$.

Voltando à equação (161), obtém-se facilmente que

$$\frac{C}{B} = \frac{2\kappa}{\kappa - ik} e^{(ik-\kappa)a} \quad (167)$$

e

$$\left| \frac{C}{B} \right|^2 = \frac{4\kappa^2}{\kappa^2 + k^2} \quad (168)$$

Vamos introduzir as quantidades

$$X = \frac{A'}{A} \quad Y = \frac{C}{A} \quad Z = \frac{B}{A} \quad Z' = \frac{B'}{A} \quad (169)$$

As equações (159),(160),(161), (162) então ficam:

$$e^{-ika} + X e^{ika} = Z e^{\kappa a} + Z' e^{-\kappa a} \quad (170)$$

$$ike^{ika} - ikX e^{ika} = -\kappa Z e^{\kappa a} + \kappa Z' e^{-\kappa a} \quad (171)$$

$$Y e^{ika} = Z e^{-\kappa a} + Z' e^{\kappa a} \quad (172)$$

$$ikY e^{ika} = -\kappa Z e^{-\kappa a} + \kappa Z' e^{\kappa a} \quad (173)$$

Autor: Henrique Fleming

Como $Z'/Z = B'/B$, temos

$$Z' = \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} e^{-2\kappa a} Z \quad (174)$$

Introduzindo os símbolos auxiliares

$$W = e^{\kappa a} + \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} e^{-3\kappa a} \quad (175)$$

e

$$W' = \frac{\kappa}{ik} \left(-e^{\kappa a} + \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} e^{-3\kappa a} \right) \quad (176)$$

podemos, após alguma álgebra, obter

$$T = |Y|^2 = \frac{16\kappa^2}{\kappa^2 + k^2} \frac{E^{-2\kappa a}}{|W + W'|^2} \quad (177)$$

$$R = |X|^2 = \frac{|W - W'|^2}{|W + W'|^2} \quad (178)$$

e

$$\frac{T}{R} = \frac{16\kappa^2}{\kappa^2 + k^2} e^{-2\kappa a} \frac{k^2}{|e^{\kappa a} - e^{-3\kappa a}|^2 (\kappa^2 + k^2)} \quad (179)$$

de onde se vê que o comportamento assintótico de $\frac{T}{R}$ é dado por

$$\frac{T}{R} \sim e^{-4\kappa a} \quad (180)$$

que revela, ao mesmo tempo, a inevitabilidade do tunelamento (a ausência de

tunelamento seria $T/R = 0$) e se trata de um efeito pequeno, para valores apreciáveis de a .

Posteriormente, quando estudarmos a aproximação quase clássica, seremos capazes de obter expressões mais simples para o tunelamento.