Universidade Estadual de Campinas

INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Departamento de Matemática Aplicada

Dissertação de Mestrado

Solução analítica para potenciais quaterniônicos tipo barreira

Kênia Cristina Pereira Silva

Mestrado em Matemática Aplicada - Unicamp

Orientador: Prof. Dr. Stefano de Leo

Departamento de Matemática Aplicada - Unicamp

Este trabalho contou com apoio financeiro do CNPq.

SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA POTENCIAIS QUATERNIÔNICOS TIPO BARREIRA

Este exemplar corresponde à redação final da dissertação devidamente corrigida e defendida por **Kênia Cristina Pereira Silva** e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 31 de Março de 2010

Prof. Dr:. Stefano De Leo
Orientador

Banca Examinadora:

1- Stefano De Leo (IMECC - UNICAMP)
2 – Adolfo Maia Jr. (IMECC - UNICAMP)
3 - Gisele Cristina Ducati (UF-ABC)

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP
Bibliotecária: Crisllene Queiroz Custódio – CRB8 / 7966

Silva, Kênia Cristina Pereira

Si38s Solução analítica para potenciais quaterniônicos tipo barreira / Kênia Cristina Pereira Silva -- Campinas, [S.P. : s.n.], 2010.

Orientador : Stefano de Leo

Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Schrödinger, Equação de. 2. Potencial barreira. 3. Potencial degrau. 4. Pacotes de onda. 5. Mecânica quântica. I. Leo, Stefano de. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título.

Título em inglês: Analytic solution for the quaternionic barrier

Palavras-chave em inglês (Keywords): 1. Schrödinger equation. 2. Potential barrier. 3. Potential step. 4. Wave packets. 5. Quantum mechanics.

Área de concentração: Física Matemática

Titulação: Mestre em Matemática Aplicada

Banca examinadora: Prof. Dr. Stefano de Leo (IMECC-Unicamp)
Prof. Dr. Adolfo Maia Junior (IMECC-Unicamp)
Profa. Dra. Gisele Cristina Ducati (UF-ABC)

Data da defesa: 31/03/2010

Programa de Pós-Graduação: Mestrado em Matemática Aplicada

Dissertação de Mestrado defendida em 31 de março de 2010 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.

Prof.(a). Dr(a). STEFANO DE LEO

Prof. (a). Dr (a). ADOLFO MAIA JUNIOR

Prof. (a). Dr (a). GISELE CRISTINA DUCATI

Aos que sempre estiveram ao meu lado, torcendo por mim.

Agradecimentos

Agradeço, em primeiro lugar, a Deus por ter me dado a vida e todos os dons que me fizeram alcançar objetivos.

Em seguida, à minha família que me deu base para minha formação, tanto acadêmica como cidadã, principalmente à minha mãe Sirlei e ao meu irmão Alex, que sempre estiveram ao meu lado para me apoiar.

Ao meu marido Fabiano que me fortalece com seu amor e acredita em mim mais do que eu mesma.

Aos muitos amigos conquistados em todos estes anos de Unicamp, desde a graduação até o mestrado, por todos os momentos de conversa e de ajuda.

Aos amigos que, mesmo não fazendo idéia do que é este mundo da matemática, sempre me apoiaram e torceram por mim.

À uma amiga muito especial que, independente de onde estiver agora, está muito feliz por mim.

Ao meu orientador, Professor Doutor Stefano De Leo (IMECC - Unicamp), pela orientação.

Aos professores do IMECC que contribuiram para minha formação.

À Professora Doutora Gisele Cristina Ducati (UF-ABC) e ao Professor Doutor Adolfo Maia Junior (IMECC- Unicamp) por aceitarem o convite de participar da banca.

Ao Professor Doutor Aurélio Ribeiro Leite de Oliveira (IMECC - Unicamp), pelos concelhos e ajudas.

E ao CNPq pelo apoio financeiro.

"A matemática é o alfabeto com o qual Deus escreveu o universo "

Pitágoras

Resumo

O objetivo principal deste trabalho é estudar a equação de Schrödinger para um potencial quaterniônico tipo barreira. A solução analítica encontrada permite comparar qualitativamente as diferenças entre a mecânica quântica complexa e a mecânica quântica quaterniônica. Antes de apresentar a solução analítica da barreira, para um melhor entendimento da motivação que leva ao estudo de uma mecânica quântica quaterniônica, será analisado em detalhes (ondas planas e pacotes de onda) o potencial tipo degrau.

Abstract

The main objective of this research is to study the Schrödinger equation for a quaternionic potential barrier. The analytical solution found allow us to compare qualitatively the differences between the complex quantum mechanics and the quaternionic quantum mechanics. Before presenting the barrier analytical solution, to a better understanding of the motivation that leads us to the study of quaternionic quantum mechanics, the potencial step will be discussed in detail (plane waves and wave packets).

SUMÁRIO

Introdução

Partindo da idéia de usar os números complexos para representar rotações no plano, Hamilton (1805-1865) tentou estender essa idéia para três dimensões, procurando por números da forma $a + bi + cj$ ($a, b, c \in \mathbb{R}$ e $i^2 = j^2 = -1$) para representar rotações no espaço. Todavia números desta forma não são fechados com relação a multiplicação, pois se fosse, teríamos

$$ij = \alpha + i\beta + j\gamma, \text{ com } \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}.$$

Isso implica, utilizando a propriedade associativa,

$$-j = (i\,i)\,j = i\,(i\,j) = i\,\alpha - \beta + i\,j\,\gamma = i\,\alpha - \beta + \alpha\gamma + i\,\beta\,\gamma + j\,\gamma^2.$$

Consequentemente $\gamma^2 = -1$, que é um absurdo, pois γ é real.

Em 16 de Outubro de 1843, percebeu que quatro números eram necessários para fechar a álgebra

$$q = q_0 + q_1 i + q_2 j + q_3 \tag{1}$$

com $q_n \in \mathbb{R}$, n=0,1,2,3 e

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1. \tag{2}$$

Nasciam assim os quatérnions e uma nova álgebra de divisão. Hamilton passou o resto de sua vida trabalhando com quatérnions e escreveu vários textos promovendo o uso de quatérnions em

física, mas morreu em setembro de 1865 deixando seu trabalho sobre quatérnions inacabado. Muito da obra *Lectures on quaternions* [1] é dedicada a aplicação dos quatérnions à geometria, à geometria diferencial e à física. De modo geral, Hamilton tratou os quatérnions como vetores e mostrou que formam um espaço vetorial sobre o corpo dos números reais. A obra ampliada *Elements of Quaternions* [2] foi publicada por seu filho um ano depois de sua morte.
A perda da propriedade comutativa da multiplicação para sistemas numéricos foi de particular importância para as sucessivas investigações. Em 1843, Graves encontrou uma álgebra não associativa com oito elementos reais, a álgebra das oitavas ou os octônions.

- ## Rotação no espaço

Todo quatérnion unitário pode ser escrito como

$$q = \cos\frac{\theta}{2} + u\sin\frac{\theta}{2} = e^{u\frac{\theta}{2}}, \tag{3}$$

com

$$u = u_1 i + u_2 j + u_3 k \quad \text{e} \quad |u| = 1.$$

Se um vetor $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^3$ é associado ao quatérnion imaginário puro $xi + yj + zk$, então $\boldsymbol{v}' = q\boldsymbol{v}q^{-1}$ representa a rotação de $\boldsymbol{v}$ de um ângulo θ, em torno do eixo u . Usando o fato que $q^{-1} = \bar{q} = e^{-u\frac{\theta}{2}}$, temos

$$\boldsymbol{v}' = q\boldsymbol{v}q^{-1} = q\boldsymbol{v}\bar{q} = e^{u\frac{\theta}{2}}Pe^{-u\frac{\theta}{2}} = \left(cos\frac{\theta}{2} + usin\frac{\theta}{2}\right)(ix + jy + kz)\left(cos\frac{\theta}{2} - usin\frac{\theta}{2}\right).$$

- ## Rotação no plano

Se utilizarmos o vetor $u = k$, ou seja, $u_1 = u_2 = 0$, a comutatividade de $e^{k\frac{\theta}{2}}$ com zk e a anticomutatividade de k com ix ou jy, a rotação de $\boldsymbol{v} = (x, y, z)$ em torno do eixo z, é dada por

$$\boldsymbol{v}' = x'i + y'j + z'k = e^{k\frac{\theta}{2}}(xi + yj + zk)e^{-k\frac{\theta}{2}} = e^{k\theta}(xi + yj) + zk.$$

Levando em consideração que

$$x'i + y'j = e^{k\theta}(xi + yj) \Rightarrow (x' + y'k) = e^{k\theta}(x + yk),$$

concluimos que

$$x' = x\cos\theta - y\sin\theta,$$

$$y' = x\sin\theta + y\cos\theta,$$

$$z' = z.$$

- ## Motivação

Em mecânica quântica, o primeiro estudo da equação de Schrödinger é feito com ondas planas. A partir delas podemos construir pacotes de onda. O objetivo desta dissertação é encontrar a solução analítica para o potencial quaterniônico tipo barreira. Até o momento os trabalhos publicados sobre a barreira quaterniônica eram só numéricos. Este trabalho possibilita estender as dicussões já feitas para o potencial tipo degrau (com pacotes de onda) para a barreira. O estudo é feito considerando o caso de difusão, onde a energia é maior que a altura do potencial.

Estrutura da dissertação

No capítulo 1, apresentaremos a equação de Schrödinger para funções de onda complexa em presença de um potencial real, unidimensional e independente do tempo. Em particular, estudaremos o potencial tipo degrau e o potencial tipo barreira.

No capítulo 2, apresentaremos os resultados correspondentes ao degrau de potencial quaterniônico. A solução analítica para ondas planas pode ser comparada com os resultados obtidos no capítulo anterior. O método da fase estacionária é aplicado para encontrar diferenças qualitativas entre a mecânica quântica complexa e a mecânica quântica quaterniônica.

No capítulo 3, estenderemos o estudo analítico feito para o degrau de potencial quaterniônico para o caso da barreira de potencial quaterniônico. A solução analítica encontrada permite fazer análises mais detalhadas da mecânica quântica quaterniônica. O estudo será apresentado para o caso de difusão e para o caso particular $\epsilon = 1$ (limite entre difusão e tunelamento).

No capítulo 4, apresentaremos o enfoque com pacotes de onda e o fenômeno de multipla difusão para a barreira complexa.

Nas conclusões, resumiremos quanto apresentado na dissertação e serão propostos novos tópicos a serem investigados.

CAPÍTULO 1

Equação de Schrödinger para potenciais complexos

Neste capítulo, apresentaremos a equação de Schrödinger para funções de onda complexa em presença de um potencial real, unidimensional e independente do tempo. Em particular, estudaremos o potencial tipo degrau e o potencial tipo barreira. A evolução no tempo de sistemas físicos é descrito pelo Hamiltoniano H, o fato de trabalhar com uma equação diferencial de primeira ordem em t, permite que conhecendo $\psi(x, t_0)$ seja possível determinar $\psi(x, t) = e^{-iHt}\psi(x, t_0)$. A linearidade em t garante que em presença de Hamiltoniano hermitiano a norma seja conservada.

1.1 Estados estacionários

A função de onda de uma partícula em presença de potencial unidimensional independente do tempo satisfaz a equação de Schrödinger [3]

$$i\hbar\partial_t \psi(x,t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_{xx}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t), \tag{1.1}$$

com $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ e $\psi : (\mathbb{R},\mathbb{R}) \to \mathbb{C}$.

A equação (1.1) pode ser reescrita na forma adimensional, introduzindo

$$\boxed{\upsilon(x) = \frac{V(x)}{V_0} \quad \xi = x\,\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \quad \tau = \frac{V_0 t}{\hbar}}.$$

A versão adimensional da equação (1.1) é

$$i\,\partial_\tau\,\psi(\xi,\tau) = -\partial_{\xi\xi}\,\psi(\xi,\tau) + \upsilon(\xi)\,\psi(\xi,\tau). \tag{1.2}$$

O fato do potencial ser independente do tempo garante a existência de soluções da forma $\psi(\xi,\tau) = \phi(\xi)\chi(\tau)$, que substituindo em (1.2) encontramos

$$i\,\frac{\dot{\chi}(\tau)}{\chi(\tau)} = \frac{-\phi''(\xi) + \upsilon(\xi)\,\phi(\xi)}{\phi(\xi)} = \epsilon^2.$$

Com $\dot{\chi}(\tau) = \partial_\tau\,\chi(\tau)$ e $\phi''(\xi) = \partial_{\xi\xi}\,\phi(\xi)$.

Foi possível separar à direita uma função só de τ e à esquerda uma função só de ξ, para que a igualdade seja satisfeita é preciso que cada função seja uma constante, que será fixada como ϵ^2 com $\epsilon = \sqrt{E/V_0}$. Agora, as duas equações devem ser resolvidas separadamente

$$\chi(\tau) = Ce^{-i\epsilon^2\tau}, \tag{1.3}$$

$$\phi_0(\xi) = A_0 e^{i\epsilon\xi} + \widetilde{A}_0 e^{-i\epsilon\xi} \qquad [\text{Caso } \upsilon(\xi) = 0], \tag{1.4}$$

$$\phi(\xi) = Ae^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\xi} + \widetilde{A}e^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\xi} \qquad [\text{Caso } \upsilon(\xi) = 1]. \tag{1.5}$$

Com C, A_0, $\widetilde{A}_0$, A e $\widetilde{A}$ constantes complexas.

Funções deste tipo são chamadas de soluções estacionárias para a equação de Schrödinger e esse método de resolução é chamado de separação de variáveis.

1.2 Densidade de probabilidade

Um conceito muito importante em mecânica quântica é o de probabilidade. A função $\psi(\xi,\tau)$ é interpretada como uma amplitude de probabilidade de presença da partícula.

Para encontrar a expressão que relaciona densidade de probabilidade $[\rho(\xi,\tau)]$ e densidade de corrente $[J(\xi,\tau)]$ utilizamos a equação (1.2) e sua complexa conjugada,

$$\partial_\tau \psi(\xi,\tau) = i\,\partial_{\xi\xi}\,\psi(\xi,\tau) - i\,\upsilon(\xi)\,\psi(\xi,\tau), \tag{1.6}$$

$$\partial_\tau \overline{\psi}(\xi,\tau) = -i\,\partial_{\xi\xi}\,\overline{\psi}(\xi,\tau) + i\,\overline{\psi}(\xi,\tau)\upsilon(\xi). \tag{1.7}$$

Somando a multimplicação de (1.6) por $\overline{\psi}(\xi,\tau)$ com a multimplicação de (1.7) por $\psi(\xi,\tau)$, obtemos a equação

$$\partial_\tau\rho(\xi,\tau) + \partial_\xi J(\xi,\tau) = 0,$$

com densidade de corrente

$$J(\xi,\tau) = i[\psi(\xi,\tau)\partial_\xi\,\overline{\psi}(\xi,\tau) - \overline{\psi}(\xi,\tau)\,\partial_\xi\,\psi(\xi,\tau)]. \tag{1.8}$$

Sendo

$$\boxed{\partial_\tau \int \rho(\xi,\tau)\,d\xi = 0},$$

$\rho(\xi,\tau)$ é uma densidade de probabilidade.

Para estados estacionários $\psi(\xi,\tau) = \phi(\xi)\,e^{-i\epsilon^2\tau}$,

$$\rho(\xi,\tau) = \overline{\psi}(\xi,\tau)\,\psi(\xi,\tau) = \overline{\phi}(\xi)\,\phi(\xi),$$

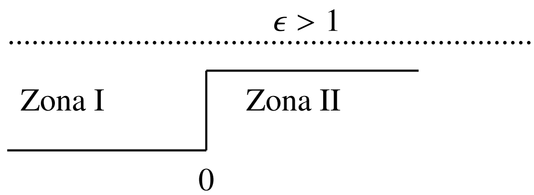
$$J(\xi) = i\,[\overline{\phi}'(\xi)\,\phi(\xi) - \overline{\phi}(\xi)\,\phi'(\xi)]. \tag{1.9}$$

Como $\partial_\tau \rho(\xi,\tau) = 0$, claramente temos

$$\partial_\xi J(\xi) = 0, \text{ isso implica que } J \text{ constante.}$$

1.3 Degrau de potencial

- **Difusão**



Para o degrau de potencial, existe uma região com potencial igual a zero ($\xi < 0$) e uma região com potencial adimensional igual a um ($\xi > 0$).

A Zona I é formada pela superposição de duas ondas, a primeira corresponde as partículas incidentes com isso $A_0 = 1$, a segunda corresponde as partículas refletidas pelo degrau, portanto $\widetilde{A}_0 = R$, na equação (1.4).

Para a Zona II, a solução é dada pela equação (1.5). Como nenhuma onda é refletida, $\widetilde{A} = 0$ e $A = T$, que representa as partículas transmitidas.

Logo, a solução é reescrita da seguinte maneira

$$\begin{cases} e^{i\epsilon\xi} + Re^{-i\epsilon\xi} & \xi < 0, \\ Te^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\xi} & \xi > 0. \end{cases} \tag{1.10}$$

As condições de continuidade $\phi_I(0) = \phi_{II}(0)$ e $\phi'_I(0) = \phi'_{II}(0)$, levam ao sistema

$$\begin{cases} 1 + R = T, \\ 1 - R = \dfrac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon} T, \end{cases} \tag{1.11}$$

que pode ser facilmente resolvido, com solução dada por

$$\boxed{T = \frac{2\epsilon}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}, \quad R = \frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}}. \tag{1.12}$$

Lembrando que a densidade de corrente é constante (pode ser calculada para qualquer valor de ξ, os cálculos foram feitos do modo mais simples, em $\xi = 0$),

$$J_I = J_{II}.$$

Com

$$J_I = 2\epsilon(1 - |R|^2) \quad \text{e} \quad J_{II} = 2\sqrt{\epsilon^2 - 1}|T|^2,$$

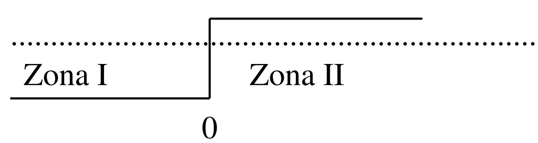
de onde encontramos a relação ente R e T

$$\boxed{|R|^2 + \frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon}|T|^2 = 1}. \tag{1.13}$$

$|R|^2$ é a probabilidade de reflexão, e $\frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon}|T|^2$ a probabilidade de transmissão. Com isso, independente do conhecimento da solução do sistema acima, sabemos a relação entre R e T.

- **Tunelamento**

$\epsilon < 1$



Outra observação é que a solução para a região de tunelamento ($\epsilon < 1$) pode ser obtida de (1.12), utilizando o fato de que se $\epsilon < 1$ então $\sqrt{\epsilon^2 - 1} = i\sqrt{1 - \epsilon^2}$ encontramos

$$\boxed{T = \frac{2\epsilon}{\epsilon + i\sqrt{1-\epsilon^2}} \quad R = \frac{\epsilon - i\sqrt{1-\epsilon^2}}{\epsilon + i\sqrt{1-\epsilon^2}}}, \tag{1.14}$$

$$J_I = 2\epsilon(1 - |R|^2) \quad \text{e} \quad J_{II} = 0.$$

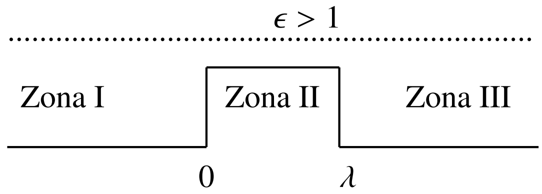
De onde obtemos

$$\boxed{|R|^2 = 1}, \tag{1.15}$$

o que não quer dizer que $T = 0$. Com a presença da onda evanescente $e^{-\sqrt{1-\epsilon^2}\xi}$ a partícula tem, durante um pequeno intervalo de tempo, uma probabilidade diferente de zero de ser encontrada em uma região classicamente proibida. Existe uma fase na reflexão que vem do fato da partícula ser atrasada quando penetra na região $\xi > 0$.

1.4 Barreira de potencial

- **Difusão**



Para a barreia de potencial, exitem duas regiões com potencial igual a zero ($\xi < 0$ e $\xi > \lambda$), com solução dada pela equação (1.4) e uma região com potencial adimensional igual a um ($0 < \xi < \lambda$), com solução dada pela equação (1.5).

Na Zona I, $A_0 = 1$ representa as partículas incidentes e $\widetilde{A}_0 = R$ representa as partículas refletidas pela barreira .

Na Zona III, $\widetilde{A}_0 = 0$, pois nessa região não existe reflexão e $A_0 = T$, representa as partículas transmitidas.

Na Zona II, $A = A$ e $\widetilde{A} = B$, com A e B constantes complexas.

Logo, a solução é reescrita da seguinte maneira

$$\begin{cases} e^{i\epsilon\xi} + Re^{-i\epsilon\xi} & \xi < 0, \\ Ae^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\xi} + Be^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\xi} & 0 < \xi < \lambda, \\ Te^{i\epsilon\xi} & \xi > \lambda. \end{cases} \tag{1.16}$$

As condições de continuidade

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0) \quad \phi_{II}(\lambda) = \phi_{III}(\lambda),$$
$$\phi'_I(0) = \phi'_{II}(0) \quad \phi'_{II}(\lambda) = \phi'_{III}(\lambda),$$

levam ao seguinte sistema

$$\begin{cases} 1+R &= A+B, \\ 1-R &= \frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon}(A-B), \\ Ae^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}+Be^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda} &= Te^{i\epsilon\lambda}, \\ \frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon}(Ae^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}-Be^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}) &= Te^{i\epsilon\lambda}. \end{cases} \tag{1.17}$$

Resolveremos o sistema (1.17) usando a forma matricial.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = \mathcal{M}(0)\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \tag{1.18}$$

$$\mathcal{M}(\lambda)\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}Te^{i\epsilon\lambda}. \tag{1.19}$$

Onde

$$\mathcal{M}(\lambda) = \begin{pmatrix} e^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda} & e^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda} \\ \frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon}e^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda} & -\frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon}e^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda} \end{pmatrix}.$$

Isolando o vetor $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ na equação (1.17), substituindo em (1.18) depois isolando $\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix}$, chegamos a

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^{-1}\mathcal{M}(0)\mathcal{M}(\lambda)^{-1}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}Te^{i\epsilon\lambda}. \tag{1.20}$$

Observe que $\mathcal{M}(\lambda) = \mathcal{M}(0)\mathcal{D}(\lambda)$, com

$$\mathcal{D}(\lambda) = diag(e^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}, e^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}).$$

E (1.20), pode ser reescrito como

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^{-1}\mathcal{M}(0)\mathcal{D}(\lambda)^{-1}\mathcal{M}(0)^{-1}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}Te^{i\epsilon\lambda}.$$

Logo

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} = \mathcal{N} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} T e^{i\epsilon\lambda}. \tag{1.21}$$

Onde

$$\mathcal{N} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) - \frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{2\epsilon} i \sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) & \frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) - \frac{\epsilon}{2\sqrt{\epsilon^2-1}} i \sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) \\ \frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) + \frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{2\epsilon} i \sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) & -\frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) - \frac{\epsilon}{2\sqrt{\epsilon^2-1}} i \sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) \end{pmatrix}.$$

A solução para os coeficientes R e T é

$$\boxed{\begin{aligned} T &= \frac{e^{-i\epsilon\lambda}}{\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) + \frac{(1-2\epsilon^2)}{2\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1}} i \sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda)} \\ R &= \frac{-i\sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda)}{(2\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1})\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) + i(1-2\epsilon^2)\sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda)} \end{aligned}}. \tag{1.22}$$

Utilizando a equação (1.9) encontramos

$$J_I = 2\epsilon(1 - |R|^2) \quad \text{e} \quad J_{III} = 2\epsilon|T|^2.$$

E pelo fato da densidade de corrente ser constante, $J_I = J_{III}$ chegamos a relação

$$\boxed{|R|^2 + |T|^2 = 1}. \tag{1.23}$$

Que pode ser encontrado sem o cálculo prévio de R e T, ainda neste momento encontrar R e T não é uma tarefa muito difícil, mas, nos próximos capítulos, quando o potencial é quaterniônico, as contas se complicam e as relações diretas entre R e T passam a ter uma importância maior.

A figura (1.1) mostra como se comporta o coeficiente de transmissão em função do comprimento da barreira. Quando $\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda = n\pi$ $(R = 0)$ temos o fenômeno de ressonância que corresponde ao caso $|T|^2 = 1$.

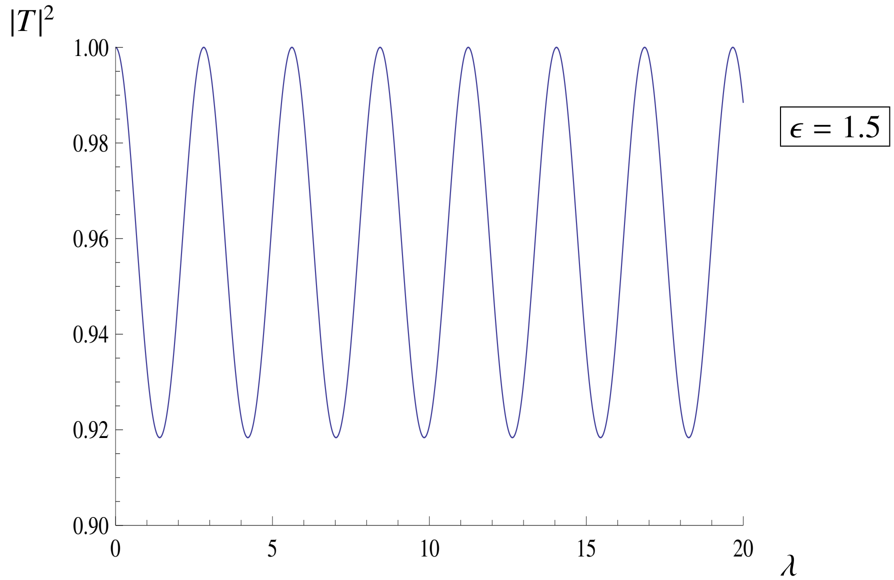
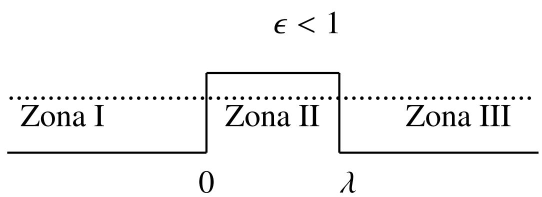


Figura 1.1: Variação da probabilidade de transmissão $|T|^2$ em função do comprimento da barreira λ, para $\epsilon = 1.5$.

- **Tunelamento**



Novamente, se na expressão encontrada para R e T fizermos $\sqrt{\epsilon^2-1} = i\sqrt{1-\epsilon^2}$, temos a solução para o caso de tunelamento

$$\boxed{\begin{aligned} T &= \frac{e^{-i\epsilon\lambda}}{\cosh(\sqrt{1-\epsilon^2}\lambda) + \frac{(1-2\epsilon^2)}{2\epsilon\sqrt{1-\epsilon^2}} i \sinh(\sqrt{1-\epsilon^2}\lambda)} \\ R &= \frac{-i\sinh(\sqrt{1-\epsilon^2}\lambda)}{(2\epsilon\sqrt{1-\epsilon^2})\cosh(\sqrt{1-\epsilon^2}\lambda) + i(1-2\epsilon^2)\sinh(\sqrt{1-\epsilon^2}\lambda)} \end{aligned}}. \tag{1.24}$$

A função de onda na Zona II tem um comportamento de onda evanescente, mas $|T|^2 \neq 0$ então a partícula tem uma probabilidade diferente de zero de ser encontrada em uma região classicamente proibida, é o chamado efeito tunelamento (figura 1.2).

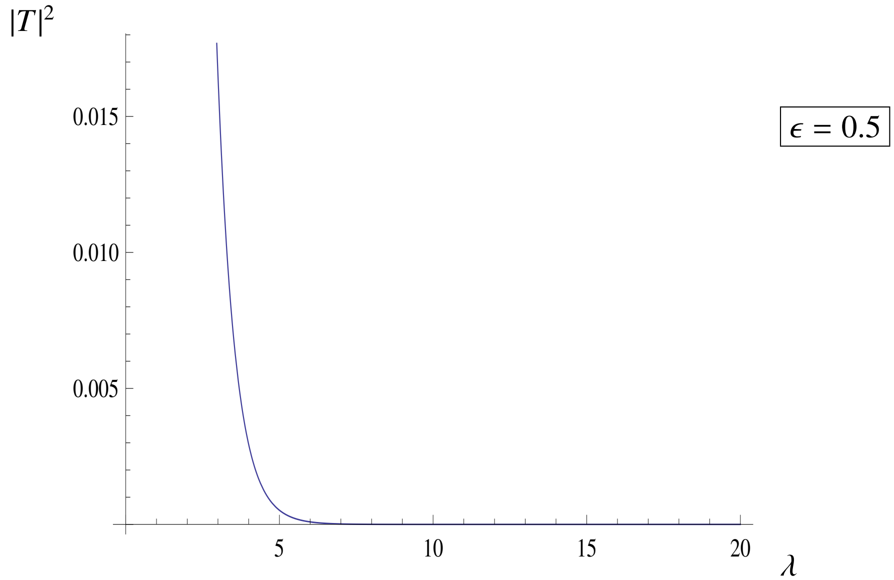


Figura 1.2: Variação da probabilidade de transmissão $|T|^2$ em função do comprimento da barreira λ, para $\epsilon = 0.5$.

CAPÍTULO 2

Potencial quaterniônico tipo degrau

Apresentaremos neste capítulo os resultados correspondentes ao degrau de potencial quaterniônico. Em particular, daremos a solução analítica para ondas planas e faremos uma comparação com os resultados obtidos no capítulo anterior. Aplicaremos o método da fase estacionária para encontrar diferenças qualitativas entre a mecânica quântica complexa e a mecânica quântica quaterniônica. Apresentaremos o estudo para o caso de difusão $E > V_0 \Rightarrow \epsilon > 1$.

2.1 Equação de Schrödinger quaterniônica

A equação de Schrödinger quaterniônica é escrita da seguinte maneira [4]

$$\partial_t \psi(\boldsymbol{r},t) = i\,\frac{\hbar}{2m}\,\nabla^2\,\psi(\boldsymbol{r},t) - \frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r},t)}{\hbar}\,\psi(\boldsymbol{r},t), \tag{2.1}$$

com

$$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r},t) = [V_1(\boldsymbol{r},t), V_2(\boldsymbol{r},t), V_3(\boldsymbol{r},t)], \qquad V_{1,2,3} : (\mathbb{R}^3,\mathbb{R}) \to \mathbb{R},$$

$$\psi : (\mathbb{R}^3,\mathbb{R}) \to \mathbb{H},$$

$$\boldsymbol{q} = (i, j, k) \in \mathbb{H}^3.$$

A equação complexa (1.1) pode ser obtida da equação (2.1) no limite $V_{2,3} \to 0$, dessa maneira a validade da solução encontrada com potencial quaterniônico pode ser testada no limite complexo.

O fato da equação (2.1) ser linear no tempo garante a existência de uma densidade de probabilidade positiva [6]. Escrevendo a expressão de onda para $\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$ [conjugada quaterniônica de $\psi(\boldsymbol{r},t)$],

$$\partial_t \overline{\psi}(\boldsymbol{r},t) = -\,\frac{\hbar}{2m}\,\nabla^2\,\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,i + \overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,\frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r},t)}{\hbar}, \tag{2.2}$$

e multiplicando a equação (2.1) a esquerda por $\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)$ e a equação (2.2) a direita por $\psi(\boldsymbol{r},t)$ depois somando os resultados obtidos, encontramos

$$\partial_t\,[\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,\psi(\boldsymbol{r},t)] = \frac{\hbar}{2m}[\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,i\,\nabla^2\,\psi(\boldsymbol{r},t) - \nabla^2\,\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,i\,\psi(\boldsymbol{r},t)] \tag{2.3}$$

$$= \nabla\left\{\frac{\hbar}{2m}[\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,i\,\nabla\,\psi(\boldsymbol{r},t) - \nabla\,\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,i\,\psi(\boldsymbol{r},t)]\right\}.$$

Integrando por partes e lembrando que ∇ é um operador anti-hermitiano sobre funções quaterniônicas,

$$\partial_t \int [\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\,\psi(\boldsymbol{r},t)]d\boldsymbol{r} = 0.$$

Logo $\rho(\boldsymbol{r},t) = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ define uma densidade de probabilidade. A equação de continuidade de probabilidade é dada por

$$\partial_t\, \rho(\boldsymbol{r},t) + \nabla \cdot \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = 0,$$

com

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\hbar}{2m}\left[\nabla\,\overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\, i\, \psi(\boldsymbol{r},t) - \overline{\psi}(\boldsymbol{r},t)\, i\, \nabla\, \psi(\boldsymbol{r},t)\right].$$

A densidade de corrente em mecânica quântica quaterniônica $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)$ é “formalmente igual”a da mecânica quântica complexa. A posição da unidade imaginária i é imposta pelo operador de evolução temporal

$$\boldsymbol{A_H} = i\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r},t)}{\hbar}.$$

2.2 Potencial independente do tempo

O potencial estudado será unidimensional e independente do tempo. Consideremos,

$$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{V}(x) = \begin{cases} \boldsymbol{0} & x < 0 \quad \text{Zona I,} \\ (V_1, V_2, V_3) & x > 0 \quad \text{Zona II.} \end{cases}$$

Essa independência no tempo permite o uso do método de separação de variáveis.

Neste capítulo, o estudo continua sendo feito com a equação de Schrödinger adimensional e unidimensional, para fazer essa mudança utilizaremos as quantidades adimensionais introduzidas no capítulo anterior, com

$$\boxed{V_0 = \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}}\,.$$

A equação adimensional é dada por

$$\partial_\tau \psi(\xi,\tau) = i\, \partial_{\xi\xi}\, \psi(\xi,\tau) - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{v}(\xi)\, \psi(\xi,\tau). \tag{2.4}$$

A equação de continuidade de probabilidade para $\psi(\xi,\tau)$ é dada por

$$\partial_\tau\, \rho(\xi,\tau) + \partial_\xi J(\xi,\tau) = 0.$$

Com

$$J(\xi,\tau) = [\partial_\xi\, \overline{\psi}(\xi,\tau)\, i\, \psi(\xi,\tau) - \overline{\psi}(\xi,\tau)\, i\, \partial_\xi\, \psi(\xi,\tau)]. \tag{2.5}$$

2.2.1 Estados estacionários

Como $\boldsymbol{v}$ é independente do tempo, podemos aplicar o método de separação de variáveis [5], procuramos soluções para a equação (2.4) da forma

$$\psi(\xi,\tau) = \phi(\xi)\, \chi(\tau).$$

No caso quaterniônico, a posição de $\chi(\tau)$ é importante [$\psi(\xi,\tau) = \chi(\tau)\, \phi(\xi)$ não é solução da equação (2.4)]. Substituindo na equação (2.4)

$$\phi(\xi)\, \dot{\chi}(\tau) = [i\phi''(\xi) - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{v}(\xi)\, \phi(\xi)]\, \chi(\tau),$$

reorganizando os fatores levando em consideração a não comutatividade dos quatérnions (as posições das multiplicações não podem ser trocadas), temos

$$\dot{\chi}(\tau)\frac{1}{\chi(\tau)} = \frac{1}{\phi(\xi)}[i\, \phi''(\xi) - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{v}(\xi)\phi(\xi)] = -i\, \epsilon^2.$$

Com $\epsilon = \sqrt{E/V_0}$,

$$\phi, \chi : \mathbb{R} \to \mathbb{H}.$$

Logo

$$\chi(\tau) = Ce^{-i\epsilon^2\tau}, \tag{2.6}$$

com C constante complexa. Para completar a solução falta resolver

$$i\,\phi''(\xi) - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\upsilon}(\xi)\,\phi(\xi) = -\phi(\xi)\,i\,\epsilon^2. \tag{2.7}$$

O potencial em cada região é uma constante quaterniônica. Para encontrar a solução é preciso resolver uma equação diferencial de segunda ordem com coeficientes quaterniônicos. Para maiores detalhes sobre este assunto, consultar referências [6], [7] e [8]. A solução é da forma

$$\phi(\xi) = (\widetilde{z} + j\widetilde{w})\,e^{\alpha\xi}, \;\; \text{com } \widetilde{z},\;\; \widetilde{w},\;\; \alpha \in \mathbb{C}.$$

Para obter $\widetilde{z}$, $\widetilde{w}$, α usamos a equação (2.7) separando a parte complexa da puramente quaterniônica,

$$i\,\alpha^2\widetilde{z} - i\,\upsilon_1\widetilde{z} - (j\upsilon_2 + k\upsilon_3)\,j\,\widetilde{w} = -\widetilde{z}\,i\,\epsilon^2\;,$$

$$k\,\alpha^2\,\widetilde{w} - (j\upsilon_2 + k\upsilon_3)\widetilde{z} - k\upsilon_1\widetilde{w} = -j\,\widetilde{w}\,i\,\epsilon^2.$$

Dado que $\widetilde{z}$ é complexo e pode ser fatorado a direita podemos escolher, por simplicidade de cálculos, $\widetilde{z} = 1$. Neste caso, isolando α^2 nas duas equações e igualando, temos a seguinte equação de segundo grau em $\widetilde{w}$

$$(i\upsilon_2 - \upsilon_3)\widetilde{w}^2 - 2\epsilon^2\,\widetilde{w} - (i\upsilon_2 + \upsilon_3) = 0.$$

Logo

$$\widetilde{w}_\pm = \frac{\epsilon^2 \pm \sqrt{\epsilon^4 - \upsilon_2^2 - \upsilon_3^2}}{(i\upsilon_2 - \upsilon_3)}, \;\; \alpha_\pm = \sqrt{\upsilon_1 \pm \sqrt{\epsilon^4 - \upsilon_2^2 - \upsilon_3^2}}.$$

Com isso, a solução geral da equação (2.7) é dada por

$$\phi(\xi) = (1 + j\widetilde{w}_-)[Ae^{\alpha_-\xi} + Be^{-\alpha_-\xi}] + (1 + j\widetilde{w}_+)[\widetilde{\widetilde{A}}e^{\alpha_+\xi} + \widetilde{\widetilde{B}}e^{-\alpha_+\xi}]. \tag{2.8}$$

Devido a linearidade complexa à direita podemos escolher $(\widetilde{\widetilde{A}}, \widetilde{\widetilde{B}}) = (\widetilde{A}, \widetilde{B})\widetilde{w}_+^{-1}$,

$$\phi(\xi) = (1 + j\widetilde{w}_-)[Ae^{\alpha_- \xi} + Be^{-\alpha_- \xi}] + (\widetilde{w}_+^{-1} + j)[\widetilde{A}e^{\alpha_+ \xi} + \widetilde{B}e^{-\alpha_+ \xi}]. \tag{2.9}$$

Chamando

$$w = \widetilde{w}_- \quad \text{e} \quad z = \widetilde{w}_+^{-1}.$$

Logo a solução geral pode ser reescrita como

$$\phi(\xi) = (1 + jw)[Ae^{\alpha_- \xi} + Be^{-\alpha_- \xi}] + (z + j)[\widetilde{A}e^{\alpha_+ \xi} + \widetilde{B}e^{-\alpha_+ \xi}]. \tag{2.10}$$

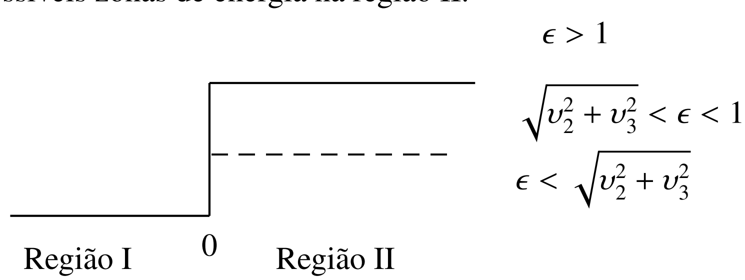
Com um pouco de álgebra

$$w = \frac{-i(\upsilon_2 - i\upsilon_3)}{\epsilon^2 + \sqrt{\epsilon^4 - \upsilon_2^2 - \upsilon_3^2}}, \quad z = \frac{i(\upsilon_2 + i\upsilon_3)}{\epsilon^2 + \sqrt{\epsilon^4 - \upsilon_2^2 - \upsilon_3^2}}.$$

Onde A, $\widetilde{A}$, B e $\widetilde{B}$ são números complexos que podem ser determinados utilizando o fato que a solução deve ser limitada e que as partículas incidem da esquerda. Com isso, se na equação (2.7) for considerado $\boldsymbol{\upsilon}(\xi) = \mathbf{0}$, a solução é dada por

$$e^{i\epsilon\xi} + Re^{-i\epsilon\xi} + j\widetilde{R}e^{\epsilon\xi}. \tag{2.11}$$

Existem três possíveis zonas de energia na região II.



- Difusão: $\epsilon > 1 \Rightarrow (\alpha_+, \alpha_-) \in (\mathbb{R}, i\mathbb{R})$.
- Tunelamento: $\sqrt{\upsilon_2^2 + \upsilon_3^2} < \epsilon < 1 \Rightarrow (\alpha_+, \alpha_-) \in (\mathbb{R}, \mathbb{R})$.
- $\epsilon < \sqrt{\upsilon_2^2 + \upsilon_3^2} \Rightarrow (\alpha_+, \alpha_-) \in (\mathbb{C}, \mathbb{C})$.

Similarmente a mecânica quântica complexa, no caso da difusão a partícula tem uma probabilidade diferente de zero de voltar e no caso de tunelamento encontramos uma reflexão total, mas uma probabilidade diferente de zero de encontrar a partícula em $\xi > 0$ por um curto intervalo de tempo. A diferença é o surgimento de uma terceira região $0 < \epsilon < \sqrt{\upsilon_2^2 + \upsilon_3^2}$, onde o comportamento oscilatório da partícula é abafado pela presença da onda evanescente $e^{-Re(\alpha)\xi}$ (para esta região não existe um limite complexo).
Como neste trabalho a região analisada será a de difusão, usaremos

$$\alpha_- = i\rho = i\sqrt{\sqrt{\epsilon^4 - \upsilon_2^2 - \upsilon_3^2} - \upsilon_1},$$

$$\alpha_+ = \alpha = \sqrt{\upsilon_1 + \sqrt{\epsilon^4 - \upsilon_2^2 - \upsilon_3^2}}.$$

Na Região II, referente ao potencial constante $\boldsymbol{\upsilon}$, solução (2.10), $\widetilde{A} = 0$ mantêm a solução limitada e $\widetilde{B} = \widetilde{T}$. Nessa região, não existem partículas que chegam da direita então $A = T$ e $B = 0$.
Logo, a solução de ondas planas é dada por

$$\begin{cases} e^{i\epsilon\xi} + Re^{-i\epsilon\xi} + j\widetilde{R}e^{\epsilon\xi}, & \boldsymbol{\upsilon}(\xi) = \mathbf{0}, \\ (1 + jw)Te^{i\rho\xi} + (z + j)\widetilde{T}e^{-\alpha\xi}, & \boldsymbol{\upsilon}(\xi) = \boldsymbol{\upsilon}. \end{cases} \tag{2.12}$$

Para encontar os valores de T, $\widetilde{T}$, R e $\widetilde{R}$, o seguinte sistema, obtido a partir das condições de continuidade $\phi_I(0) = \phi_{II}(0) \quad \phi_I'(0) = \phi_{II}'(0)$, deve ser resolvido.

$$\begin{cases} 1 + R &= T + z\widetilde{T}, \\ \widetilde{R} &= wT + \widetilde{T}, \\ 1 - R &= \frac{\rho}{\epsilon}T + i\frac{\alpha}{\epsilon}z\widetilde{T}, \\ \widetilde{R} &= i\frac{\rho}{\epsilon}wT - \frac{\alpha}{\epsilon}\widetilde{T}. \end{cases}$$

Cuja Solução

$$\boxed{\begin{array}{ll} T = \dfrac{2\epsilon(\alpha+\epsilon)}{(\alpha+\epsilon)(\epsilon+\rho)+zw(\epsilon+i\alpha)(i\rho-\epsilon)} & \widetilde{T} = \dfrac{2\epsilon w(i\rho-\epsilon)}{(\alpha+\epsilon)(\epsilon+\rho)+zw(\epsilon+i\alpha)(i\rho-\epsilon)} \\ \\ R = \dfrac{(\epsilon-\rho)(\alpha+\epsilon)+zw(\epsilon-i\alpha)(i\rho-\epsilon)}{(\alpha+\epsilon)(\epsilon+\rho)+zw(\epsilon+i\alpha)(i\rho-\epsilon)} & \widetilde{R} = \dfrac{2w\epsilon(\alpha+i\rho)}{(\alpha+\epsilon)(\epsilon+\rho)+zw(\epsilon+i\alpha)(i\rho-\epsilon)} \end{array}}\,. \tag{2.13}$$

R e T dependem de ϵ e υ_1, que é a parte complexa do potencial, do mesmo modo que na mecânica quântica complexa, mas dependem também de $|\upsilon_2{+}i\upsilon_3|$, o módulo da parte quaterniônica do potencial. Com isso, qualquer rotação no plano (υ_2,υ_3) não altera o valor dos coeficientes de transmissão e reflexão, já que as rotações mantêm constante o módulo.

2.2.2 Densidade de probabilidade

Como $\psi(\xi,\tau)=\phi(\xi)\,\chi(\tau)$ a função de densidade não depende de τ, isto é

$$\rho(\xi,\tau)=|\psi(\xi,\tau)|^2=\psi(\xi,\tau)\,\overline{\psi}(\xi,\tau)=\phi(\xi)\,\chi(\tau)\,\overline{\chi}(\tau)\,\overline{\phi}(\xi)=\phi(\xi)\,\overline{\phi}(\xi),$$

de onde a equação de continuidade de probabilidade satisfaz

$$\partial_\xi\, J(\xi)=0\Rightarrow J\,\text{constante},$$

e

$$\begin{gathered} J(\xi,\tau)=\overline{\chi}(\tau)\,\overline{\phi'}(\xi)\,i\,\phi(\xi)\,\chi(\tau)-\overline{\chi}(\tau)\,\overline{\phi}(\xi)\,i\,\phi'(\xi)\,\chi(\tau)= \\ \overline{\chi}(\tau)\,\overline{\phi'}(\xi)\,\overline{\chi}(\tau)\,i\,\phi(\xi)-\overline{\chi}(\tau)\,\overline{\phi}(\xi)\,\overline{\chi}(\tau)\,i\,\phi'(\xi)= \\ \overline{\chi}(\tau)\,\chi(\tau)\,\overline{\phi'}(\xi)\,i\,\phi(\xi)-\overline{\chi}(\tau)\,\chi(\tau)\,\overline{\phi}(\xi)\,i\,\phi'(\xi). \end{gathered}$$

Logo

$$J(\xi)=\{\overline{\phi'}(\xi)\,i\,\phi(\xi)-\overline{\phi}(\xi)\,i\,\phi'(\xi)\}. \tag{2.14}$$

Os valores das densidades de corrente em cada região são calculados pela equação (2.14), lembrando que, devido a não comutatividade dos quatérnions, a posição da unidade imaginária i é importante. Logo

$$J_I = 2\epsilon(1 - |R|^2) \quad \text{e} \quad J_{II} = 2\rho(1 - |w|^2)|T|^2.$$

A continuidade de $\phi(\xi)$ e de sua derivada em $\xi = 0$ implicam na continuidade da densidade corrente $J_I = J_{II}$, com isso é possível encontrar as expressões para o coeficiente de reflexão $|R|^2$ e para o coeficiente de transmissão $\frac{\rho}{\epsilon}(1 - |w|^2)|T|^2$, que são as probabilidades de reflexão e de transmissão, respectivamente. E a relação

$$\boxed{|R|^2 + \frac{\rho}{\epsilon}(1 - |w|^2)|T|^2 = 1}. \tag{2.15}$$

2.3 Método da fase estacionária

Seja $\mathcal{I}$ uma integral complexa da forma

$$\mathcal{I} = \int F(\epsilon)d\epsilon = \int |F(\epsilon)|e^{i\theta(\epsilon)}d\epsilon. \tag{2.16}$$

Onde $|F(\epsilon)|$ tem um ponto de máximo em $\epsilon = \epsilon_0$. Se $\theta(\epsilon)$ varia de forma suficientemente suave no intervalo onde $|F(\epsilon)|$ está sendo considerada, $\theta(\epsilon)$ pode ser espandido em uma série de Taylor em torno de ϵ_0

$$\theta(\epsilon) = \theta(\epsilon_0) + (\epsilon - \epsilon_0)\theta'(\epsilon_0) + O[(\epsilon - \epsilon_0)^2].$$

As derivadas de segunda ordem e ordem superiores não precisam ser utilizadas se o módulo de $F(\epsilon)$ tem um pico suficientemente acentuado. E a equação (2.16) pode ser aproximada por

$$\mathcal{I} \approx e^{i\theta(\epsilon_0)} \int |F(\epsilon)|e^{i(\epsilon-\epsilon_0)\theta'(\epsilon_0)}d(\epsilon - \epsilon_0). \tag{2.17}$$

Analisando o integrando, percebemos que grandes oscilações são responsáveis por uma integral nula, com isso, a máxima contribuição para a integral é quando $\theta'(\epsilon_0) = 0$.

2.3.1 Método da fase estacionária aplicado ao degrau de potencial

Agora, a evolução no tempo será considerada através do estudo de pacotes de onda quaterniônico. Na seção anterior, encontramos soluções de ondas planas para a equação de Schrödinger, mas o princípio da superposição garante que toda combinação linear real de ondas planas $\phi_I(x)e^{-i\epsilon^2\tau}$ e $\phi_{II}(x)e^{-i\epsilon^2\tau}$ ainda satisfazem a equação (2.4). Essas superposições podem ser escritas como

$$\Omega_1 = \int_{\epsilon_{min}}^{\infty} \{e^{i\epsilon\xi} + Re^{-i\epsilon\xi} + j\widetilde{R}e^{\epsilon\xi}\}e^{-i\epsilon^2\tau}g(\epsilon)d\epsilon,$$

$$\Omega_2 = \int_{\epsilon_{min}}^{\infty} \{(1 + jw)Te^{i\rho\xi} + (z + j)\widetilde{T}e^{-\alpha\xi}\}e^{-i\epsilon^2\tau}g(\epsilon)d\epsilon,$$

com, $\epsilon_{min} = \sqrt{V_0}$ e $g(\epsilon)$ uma distribuição gaussiana com máximo em ϵ_0.
No caso complexo, R e T são reais, logo não interferem na fase das ondas refletidas e transmitidas. Já com a presença de perturbações quaterniônicas R e T são complexos,

$$T = \frac{2\epsilon(\alpha + \epsilon)}{\sqrt{[(\alpha + \epsilon)(\epsilon + \rho) - zw(\epsilon^2 + \alpha\rho)]^2 + (zw)^2\epsilon^2(\rho - \alpha)^2}}e^{i\theta_T},$$

$$R = \frac{\sqrt{[(\alpha + \epsilon)(\epsilon - \rho) - zw(\epsilon^2 - \alpha\rho)]^2 + (zw)^2\epsilon^2(\rho + \alpha)^2}}{\sqrt{[(\alpha + \epsilon)(\epsilon + \rho) - zw(\epsilon^2 + \alpha\rho)]^2 + (zw)^2\epsilon^2(\rho - \alpha)^2}}e^{i\theta_R},$$

onde

$$\theta_T = \arctan\left[\frac{zw\epsilon(\alpha - \rho)}{(\alpha + \epsilon)(\epsilon + \rho) - zw(\epsilon^2 + \alpha\rho)}\right],$$

$$\theta_R = \arctan\left[\frac{zw\epsilon(\alpha + \rho)}{(\alpha + \epsilon)(\epsilon - \rho) - zw(\epsilon^2\alpha - \rho)}\right] + \theta_T.$$

E as fases das ondas incidentes, refletidas e transmitidas respectivamente, são dadas por

$$\theta_{inc}[\epsilon, \xi, \tau] = \epsilon\xi - \epsilon^2\tau,$$

$$\theta_{ref}[\epsilon, \xi, \tau] = -\epsilon\xi - \epsilon^2\tau + \theta_R,$$

$$\theta_{tra}[\epsilon, \xi, \tau]^{\{1,i\}} = \rho\xi - \epsilon^2\tau + \theta_T,$$

$$\theta_{tra}[\epsilon, \xi, \tau]^{\{j,k\}} = \left\{\rho\xi - \epsilon^2\tau + \theta_T + \arctan\left[\frac{\upsilon_2}{\upsilon_3}\right]\right\}.$$

A condição de fase estacionária (derivada da fase em relação a ϵ calculada em ϵ_0 e igualada a zero) permite calcular a posição do máximo dos pacotes de onda

$$\xi_{inc}^{max}(\tau) = 2\epsilon_0\tau,$$

$$\xi_{ref}^{max}(\tau) = -2\epsilon_0\tau + \left[\frac{d\theta_R}{d\epsilon}\right]_0,$$

$$\xi_{tra}^{max}(\tau) = \frac{2\epsilon_0\tau - \left[\frac{d\theta_T}{d\epsilon}\right]_0}{\left[\frac{d\rho}{d\epsilon}\right]_0}.$$

Para facilitar a análise, os máximos dos pacotes de onda estão reescritos em termos de E_0, que é o valor de máxima probabilidade.

$$x_{inc}^{max}(t) = \sqrt{\frac{2E_0}{m}}t,$$

$$x_{ref}^{max}(t) = -\sqrt{\frac{2E_0}{m}}t + \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}}\left[\frac{d\theta_R}{d\sqrt{\frac{E}{V_0}}}\right]_0,$$

$$x_{tra}^{max}(t) = \left\{\sqrt{\frac{2E_0}{m}}t - \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_0}}\left[\frac{d\theta_T}{d\sqrt{\frac{E}{V_0}}}\right]_0\right\} / \left[\frac{d\rho}{d\epsilon}\right]_0.$$

A partir da posição dos máximos dos pacotes de onda, podemos calcular as velocidades e os tempos de propagação

$$v_{in} = \sqrt{\frac{2E_0}{m}}, \quad v_{ref} = -v_{inc} \quad \text{e} \quad v_{tra} = v_{in} / \left[\frac{d\rho}{d\epsilon} \right]_0 .$$

$$t_{ref} = \frac{\hbar}{2\sqrt{E_0 V_0}} \left[\frac{d\theta_R}{d\sqrt{\frac{E}{V_0}}} \right]_0 , \quad t_{tra} = \frac{\hbar}{2\sqrt{E_0 V_0}} \left[\frac{d\theta_T}{d\sqrt{\frac{E}{V_0}}} \right]_0 .$$

A onda incidente que se propaga a uma velocidade v_{in} chega ao degrau no tempo $t = 0$, durante um certo intervalo de tempo o pacote de onda fica localizado perto de $x = 0$. Após um longo intervalo, o pacote de onda incidente praticamente desaparece e resta somente o pacote de onda refletida, cujo máximo só é encontrado em $x = 0$ no tempo t_{ref} e se propaga no sentido contrário com velocidade $-v_{in}$. Do mesmo modo, o máximo do pacote da onda transmitida encontra-se em $x = 0$ no tempo t_{tra}, com velocidade de propagação v_{tra}.

Com isso, no caso de perturbações quaterniônicas, os coeficientes de reflexão e trasmissão não são necessariamente instantâneos como no caso complexo. Como $\theta_T \neq \theta_R$, é possível que um deles seja instantâneo, enquanto o outro não. Para uma discussão mais detalhada sobre este assunto consultar [6],[7] e [8].

2.4 Análise comparativa

Para que fique mais clara a falta de simetria que pode ocorrer no caso de perturbações quaterniônicas, dois exemplos extremos serão considerados. O limite puramente complexo, onde a simetria existe, não contrariando as expectativas da mecânica quântica complexa, e o limite puramente quaterniônico onde a simetria é quebrada. As velocidades de grupo também são calculadas nos dois casos.

2.4.1 Limite complexo

No limite $\upsilon_{2,3} = 0$, $\upsilon_1 = 1$ obtemos os resultados para o caso complexo, dados por

$$\alpha = \sqrt{1 + \epsilon^2}, \quad \rho = \sqrt{\epsilon^2 - 1}, \quad z = w = 0.$$

Os coeficientes encontrados são os mesmos de quando resolvemos a equação complexa,

$$\boxed{T_C = \frac{2\epsilon}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2 - 1}} \quad R_C = \frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2 - 1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2 - 1}} \quad \widetilde{T}_C = 0 \quad \widetilde{R}_C = 0}. \tag{2.18}$$

$$\boxed{|R|^2 + \tfrac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon}|T|^2 = 1}. \tag{2.19}$$

Este resultado pode ser comparado com a solução dada no capítulo anterior (1.12).

O limite complexo confirma o esperado, ambos os coeficientes são instantâneos, pois são reais ($\theta_R = \theta_T = 0$). Isso significa que no tempo $t = 0$, o máximo das ondas incidentes, transmitidas e refletidas estão em $x = 0$.

As velocidades de grupo dos pacotes de onda transmitida são dadas por

$$v_{tra} = v_{in}\sqrt{1 - \frac{V_0}{E_0}}.$$

Dependendo do sinal de V_0, v_{tra} é maior ou menor que v_{in}. Com isso, se o potencial é negativo a partícula é acelerada.

2.4.2 Limite puramente quaterniônico

Agora considerando o limite $\upsilon_1 = 0$, $\upsilon_2^2 + \upsilon_3^2 = 1$, obtemos os resultados para o caso puramente queterniônico, dados por

$$\alpha = \sqrt[4]{\epsilon^4 - 1}, \quad \rho = \alpha, \quad z = \frac{i(\upsilon_2 + i\upsilon_3)}{\epsilon^2 + \sqrt{\epsilon^4 - 1}}, \quad w = \bar{z}.$$

Solução

$$\boxed{\begin{array}{ll} T_q = \dfrac{\epsilon}{\alpha} & R_q = \dfrac{\epsilon}{\alpha}\left(1 + wz\left(\dfrac{i\alpha - \epsilon}{\alpha + \epsilon}\right) - \dfrac{\alpha}{\epsilon}\right) \\ \\ \widetilde{T}_q = \dfrac{\epsilon}{\alpha}w\left(\dfrac{i\alpha - \epsilon}{\alpha + \epsilon}\right) & \widetilde{R}_q = \left(\dfrac{1 + i}{\alpha + \epsilon}\right)w\epsilon \end{array}}. \tag{2.20}$$

$$\boxed{|R|^2 + \tfrac{2\alpha^3}{\epsilon(\epsilon^2+\alpha^2)}|T|^2 = 1}. \tag{2.21}$$

A transmissão é instantânea, pois T é real ($\theta_T = 0$), enquanto a reflexão não, pois R é complexo e ($\theta_R \neq 0$). Este é um exemplo claro onde a simetria entre o tempo de transmissão e reflexão é quebrada ($t_{tra} = 0$ e $t_{ref} \neq 0$). E, além disso, as velocidades de grupo dos pacotes de onda transmitida são sempre menores do que as velocidades de grupo da região livre, pois a dependência é quadrática em V_0,

$$v_{tra} = v_{in} \left(1 - \left(\frac{V_0}{E_0} \right)^2 \right)^{\frac{3}{4}} .$$

O potencial puramente quaterniônico diminui a velocidade da partícula, independentemente de ser positivo ou negativo.

2.4.3 Análise qualitativa

A figura (2.1) mostra a diferença de comportamento das velocidades de grupo dos pacotes de onda transmitida para o limite complexo e para o limite puramente quaterniônico, que são iguais para $\dfrac{V_0}{E_0} = 0, 0.839, 1$.

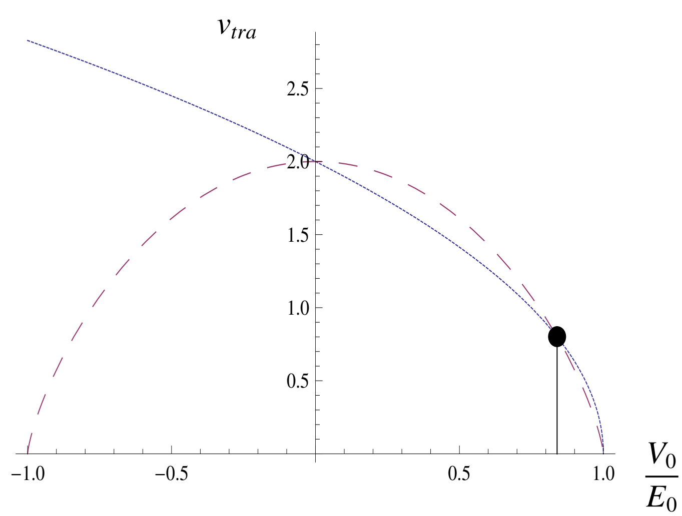


Figura 2.1: As velocidades de grupo dos pacotes de onda transmitida para o limite complexo (linha contínua) e para o limite puramente quaterniônico (linha tracejada), $v_{in} = 2$.

A figura (2.2) mostra que se $V_0 > 0$ então $v_{tra,q} > v_{tra,c}$ para $\approx\ 0.839 < \dfrac{V_0}{E_0} < 1$. O máximo da função $\dfrac{v_{tra,q}}{v_{tra,c}}$ é encontrado em $E_0 = 2V_0$.

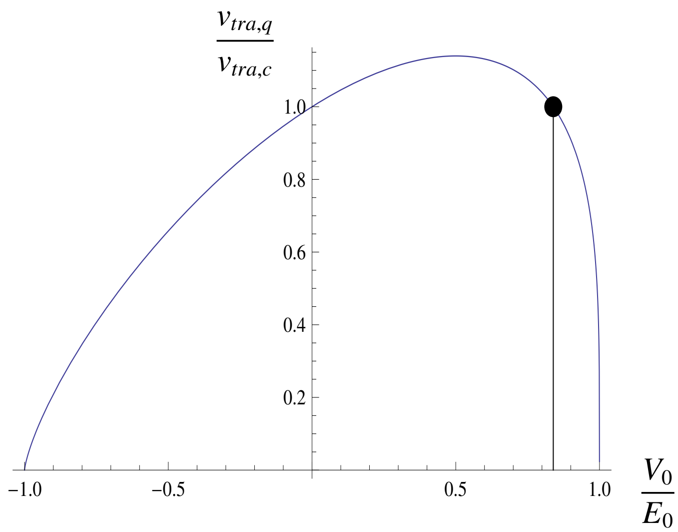


Figura 2.2: Razão entre as velocidades de grupo dos pacotes de onda transmitida $v_{in} = 2$.

CAPÍTULO 3

Potencial quaterniônico tipo barreira

Estenderemos o estudo feito para o degrau de potencial para o caso da barreira de potencial. Este capítulo será dedicado ao estudo da barreira de potencial quaterniônico e à solução analítica no caso de difusão. Muitos trabalhos feitos até o momento se limitaram a análises numéricas sobre a barreira de potencial, nesta dissertação encontramos a solução analítica no caso geral, apesar de muito complicada, permite fazer análises mais detalhadas da mecânica quântica quaterniônica.

3.1 Potencial independente do tempo

Considerando o potencial unidimensional independente do tempo, $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r},t) = V(x)$, temos para a barreira três zonas de potencial ([9],[10],[11]),

$$\boldsymbol{\upsilon}(\xi) = \begin{cases} \mathbf{0} & \xi < 0 & \text{Zona I}, \\ (\upsilon_1, \upsilon_2, \upsilon_3) & 0 < \xi < \lambda & \text{Zona II}, \\ \mathbf{0} & \xi > \lambda & \text{Zona III}. \end{cases}$$

Com $\xi = x\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$.

A equação diferencial a ser resolvida é

$$i\phi''(\xi) - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\upsilon}(\xi)\phi(\xi) = -\phi(\xi)i\epsilon^2. \tag{3.1}$$

As soluções de onda plana são

$$\begin{cases} e^{i\epsilon\xi} + Re^{-i\epsilon\xi} + j\widetilde{R}e^{\epsilon\xi} & \xi < 0, \\ (1+jw)[Ae^{i\rho\xi} + Be^{-i\rho\xi}] + (z+j)[\widetilde{A}e^{\alpha\xi} + \widetilde{B}e^{-\alpha\xi}] & 0 < \xi < \lambda, \\ Te^{i\epsilon\xi} + j\widetilde{T}e^{-\epsilon\xi} & \xi > \lambda. \end{cases} \tag{3.2}$$

Na Zona II, temos a solução geral dada pela equação (2.10) com A, B, $\widetilde{A}$ e $\widetilde{B}$. Na zona I, $A = 1$ representa a situação de partículas incidentes da esquerda, $B = R$ representa as partículas refletidas e $\widetilde{A} = \widetilde{R}$ e $\widetilde{B} = 0$ garantem uma solução limitada das partículas incidentes de $\xi = -\infty$. Na zona III, $A = T$ representa as partículas transmitidas, $B = 0$ garante que nenhuma partícula chegue da direita e $\widetilde{A} = 0$ e $\widetilde{B} = \widetilde{T}$ garantem a solução limitada quando $\xi \to \infty$. As condições de continuidade

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0), \quad \phi'_I(0) = \phi'_{II}(0),$$
$$\phi_{II}(\lambda) = \phi_{III}(\lambda), \quad \phi'_{II}(\lambda) = \phi'_{III}(\lambda),$$

fornecem dois sistemas

$$\begin{cases} 1+R &= A+B+z(\widetilde{A}+\widetilde{B}), \\ 1-R &= \dfrac{\rho}{\epsilon}(A-B) - iz\dfrac{\alpha}{\epsilon}(\widetilde{A}-\widetilde{B}), \\ \widetilde{R} &= w(A+B)+(\widetilde{A}+\widetilde{B}), \\ \widetilde{R} &= iw\dfrac{\rho}{\epsilon}(A-B)+\dfrac{\alpha}{\epsilon}(\widetilde{A}-\widetilde{B}), \end{cases} \tag{3.3}$$

e

$$\begin{cases} Te^{i\epsilon\lambda} &= Ae^{i\rho\lambda}+Be^{-i\rho\lambda}+z(\widetilde{A}e^{\alpha\lambda}+\widetilde{B}e^{-\alpha\lambda}), \\ Te^{i\epsilon\lambda} &= \dfrac{\rho}{\epsilon}(Ae^{i\rho\lambda}-Be^{-i\rho\lambda}) - i\,\dfrac{\alpha}{\epsilon}\,z(\widetilde{A}e^{\alpha\lambda}-\widetilde{B}e^{-\alpha\lambda}), \\ \widetilde{T}e^{-\epsilon\lambda} &= w(Ae^{i\rho\lambda}+Be^{-i\rho\lambda})+\widetilde{A}e^{\alpha\lambda}+\widetilde{B}e^{-\alpha\lambda}, \\ -\widetilde{T}e^{-\epsilon\lambda} &= \dfrac{i\rho}{\epsilon}\,w(Ae^{i\rho\lambda}-Be^{-i\rho\lambda})+\ \dfrac{\alpha}{\epsilon}(\widetilde{A}e^{\alpha\lambda}-\widetilde{B}e^{-\alpha\lambda}). \end{cases} \tag{3.4}$$

O valor da densidade de corrente é calculado pela equação (2.5), e o fato de $J(\xi)$ ser constante permite igualar $J_I = J_{III}$, onde

$$J_I = 2\epsilon(1-|R|^2) \quad \text{e} \quad J_{III} = 2\epsilon|T|^2,$$

obtendo

$$\boxed{|R|^2+|T|^2=1}. \tag{3.5}$$

Sem resolver os sistemas (3.3) e (3.4) é possível encontrar a relação entre $|R|^2$ e $|T|^2$.

3.2 Forma matricial

Os sistemas (3.3) e (3.4) podem ser reescritos em forma matricial,

$$\mathcal{F}\begin{pmatrix} 1 \\ R \\ \widetilde{R} \\ \widetilde{R} \end{pmatrix} = \mathcal{M}(0)\begin{pmatrix} A \\ B \\ \widetilde{A} \\ \widetilde{B} \end{pmatrix}, \tag{3.6}$$

e

$$\mathcal{M}(\lambda)\begin{pmatrix} A \\ B \\ \widetilde{A} \\ \widetilde{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Te^{i\epsilon\lambda} \\ Te^{i\epsilon\lambda} \\ \widetilde{T}e^{-\epsilon\lambda} \\ -\widetilde{T}e^{-\epsilon\lambda} \end{pmatrix}, \tag{3.7}$$

onde

$$\mathcal{F} = diag(\mathcal{G}, \mathcal{I}) \quad \text{com} \quad \mathcal{G} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathcal{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

e

$$\mathcal{M}(\lambda) = \mathcal{M}(0)\mathcal{D}(\lambda),$$

com

$$\mathcal{M}(0) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & z & z \\ \frac{\rho}{\epsilon} & -\frac{\rho}{\epsilon} & -iz\frac{\alpha}{\epsilon} & iz\frac{\alpha}{\epsilon} \\ w & w & 1 & 1 \\ iw\frac{\rho}{\epsilon} & -iw\frac{\rho}{\epsilon} & \frac{\alpha}{\epsilon} & -\frac{\alpha}{\epsilon} \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{D}(\lambda) = diag(e^{i\rho\lambda}, e^{-i\rho\lambda}, e^{\alpha\lambda}, e^{-\alpha\lambda}).$$

Diante disso, invertemos a matriz $\mathcal{M}(\lambda)$ na equação (3.7) isolando o vetor $(A, B, \widetilde{A}, \widetilde{B})$ e depois substituindo na equação (3.6) e invertendo a matriz $\mathcal{F}$, chegamos ao sistema,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \\ \widetilde{R} \\ \widetilde{R} \end{pmatrix} = \mathcal{F}^{-1}\mathcal{M}(0)\mathcal{D}(\lambda)^{-1}\mathcal{M}(0)^{-1}\begin{pmatrix} Te^{i\epsilon\lambda} \\ Te^{i\epsilon\lambda} \\ \widetilde{T}e^{-\epsilon\lambda} \\ -\widetilde{T}e^{-\epsilon\lambda} \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

Chamaremos a matriz $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{M}(0)\mathcal{D}(\lambda)^{-1}\mathcal{M}(0)^{-1}$ de $\mathcal{N}$, onde n_{ij} representa a componente da linha i e coluna j da matriz $\mathcal{N}$.

Levando em consideração que todos os elementos da matriz $\mathcal{N}$ estão divididos por $2(1 - zw)$, são apresentados abaixo os $\widetilde{n}_{ij}$, tais que $\widetilde{n_{ij}} = 2(1 - zw)n_{ij}$.

$$\widetilde{n}_{11} = \cos(\rho\lambda) - i\frac{\rho}{\epsilon}\sin(\rho\lambda) - z\,w\cosh(\alpha\lambda) - i\,w\,z\frac{\alpha}{\epsilon}\sinh(\alpha\lambda),$$

$$\widetilde{n}_{12} = \cos(\rho\lambda) - i\frac{\epsilon}{\rho}\sin(\rho\lambda) - z\,w\cosh(\alpha\lambda) + i\,z\,w\frac{\epsilon}{\alpha}\sinh(\alpha\lambda),$$

$$\widetilde{n}_{13} = z\,[-\cos(\rho\lambda) + i\frac{\rho}{\epsilon}\sin(\rho\lambda) + \cosh(\alpha\lambda) + i\frac{\alpha}{\epsilon}\sinh(\alpha\lambda),$$

$$\widetilde{n}_{14} = z\,[-i\cosh(\alpha\lambda) + i\cos(\rho\lambda) - \frac{\epsilon}{\alpha}\sinh(\alpha\lambda) + \frac{\epsilon}{\rho}\sin(\rho\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{21} = \cos(\rho\lambda) + i\frac{\rho}{\epsilon}\sin(\rho\lambda) - z\,w\cosh(\alpha\lambda) + i\,w\,z\frac{\alpha}{\epsilon}\sinh(\alpha\lambda),$$

$$\widetilde{n}_{22} = -\cos(\rho\lambda) - i\frac{\epsilon}{\rho}\sin(\rho\lambda) + z\,w\cosh(\alpha\lambda) + i\,z\,w\frac{\epsilon}{\alpha}\sinh(\alpha\lambda),$$

$$\widetilde{n}_{23} = z\,[-\cos(\rho\lambda) - i\frac{\rho}{\epsilon}\sin(\rho\lambda) + \cosh(\alpha\lambda) - i\frac{\alpha}{\epsilon}\sinh(\alpha\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{24} = z\,[i\cosh(\alpha\lambda) - i\cos(\rho\lambda) - \frac{\epsilon}{\alpha}\sinh(\alpha\lambda) + \frac{\epsilon}{\rho}\sin(\rho\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{31} = 2\,w\,[\cos(\rho\lambda) - \cosh(\alpha\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{32} = 2\,i\,w\,[\frac{\epsilon}{\alpha}\sinh(\alpha\lambda) - \frac{\epsilon}{\rho}\sin(\rho\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{33} = 2\,[-z\,w\cos(\rho\lambda) + \cosh(\alpha\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{34} = 2\,[-\frac{\epsilon}{\alpha}\sinh(\alpha\lambda) + z\,w\frac{\epsilon}{\rho}\sin(\rho\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{41} = 2\,w\,[\frac{\rho}{\epsilon}\sin(\rho\lambda) + \frac{\alpha}{\epsilon}\sinh(\alpha\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{42} = 2\,i\,w\,[\cos(\rho\lambda) - \cosh(\alpha\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{43} = -2\,[z\,w\frac{\rho}{\epsilon}\sin(\rho\lambda) + \frac{\alpha}{\epsilon}\sinh(\alpha\lambda)],$$

$$\widetilde{n}_{44} = 2\,[-z\,w\cos(\rho\lambda) + \cosh(\alpha\lambda)].$$

3.3 Solução geral

Utilizando a equação (3.8), encontramos os valores de T, R, $\widetilde{T}$, $\widetilde{R}$, que são dados por

$$\boxed{T = \frac{[(n_{43} + n_{34}) - (n_{33} + n_{44})]e^{-i\epsilon\lambda}}{(n_{11} + n_{12})[(n_{43} + n_{34}) - (n_{33} + n_{44})] + (n_{13} - n_{14})[(n_{31} + n_{32}) - (n_{41} + n_{42})]}}, \tag{3.9}$$

$$\boxed{\widetilde{T} = \frac{[(n_{31} + n_{32}) - (n_{41} + n_{42})]e^{\epsilon\lambda}}{(n_{11} + n_{12})[(n_{43} + n_{34}) - (n_{33} + n_{44})] + (n_{13} - n_{14})[(n_{31} + n_{32}) - (n_{41} + n_{42})]}}, \tag{3.10}$$

$$\boxed{R = \frac{(n_{21} + n_{22})[(n_{43} + n_{34}) - (n_{33} + n_{44})] + (n_{23} - n_{24})[(n_{31} + n_{32}) - (n_{41} + n_{42})]}{(n_{11} + n_{12})[(n_{43} + n_{34}) - (n_{33} + n_{44})] + (n_{13} - n_{14})[(n_{31} + n_{32}) - (n_{41} + n_{42})]}}, \tag{3.11}$$

$$\boxed{\widetilde{R} = \frac{(n_{31} + n_{32})[(n_{43} + n_{34}) - (n_{33} + n_{44})] + (n_{33} - n_{34})[(n_{31} + n_{32}) - (n_{41} + n_{42})]}{(n_{11} + n_{12})[(n_{43} + n_{34}) - (n_{33} + n_{44})] + (n_{13} - n_{14})[(n_{31} + n_{32}) - (n_{41} + n_{42})]}}. \tag{3.12}$$

Lembrando que $\widetilde{n}_{ij} = 2(1 - zw)n_{ij}$ e observando que com relação a n_{ij} o numerador de T e $\widetilde{T}$ é linear e o denominador é quadrático, temos $T(n_{ij}) = 2(1 - zw)T(\widetilde{n}_{ij})$, $\widetilde{T}(n_{ij}) = 2(1 - zw)\widetilde{T}(\widetilde{n}_{ij})$. Observando que tanto o numerador quanto o denominador de R e $\widetilde{R}$ têm dependência quadrática em $\widetilde{n}_{ij}$, isso implica que $R(n_{ij}) = R(\widetilde{n}_{ij})$ e $\widetilde{R}(n_{ij}) = \widetilde{R}(\widetilde{n}_{ij})$.

3.3.1 Limite complexo

Para que o potencial seja complexo, $\upsilon_2 = \upsilon_3 = 0$ e com isso $w = z = 0$. Seja $\overline{n}_{ij}$, n_{ij} com $z = w = 0$.

$$\overline{n}_{11} = \frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) - i\frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{2\epsilon}\sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda),$$
$$\overline{n}_{12} = \frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) - i\frac{\epsilon}{2\sqrt{\epsilon^2-1}}\sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda),$$
$$\overline{n}_{21} = \frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) + i\frac{\sqrt{\epsilon^2-1}}{2\epsilon}\sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda),$$
$$\overline{n}_{22} = -\frac{1}{2}\cos(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda) - i\frac{\epsilon}{2\sqrt{\epsilon^2-1}}\sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda),$$
$$\overline{n}_{33} = \overline{n}_{44} = \cosh(\sqrt{1+\epsilon^2}\lambda),$$
$$\overline{n}_{34} = \frac{-\epsilon}{\sqrt{1+\epsilon^2}}\sinh(\sqrt{1+\epsilon^2}\lambda),$$
$$\overline{n}_{43} = -\frac{\sqrt{1+\epsilon^2}}{\epsilon}\sinh(\sqrt{1+\epsilon^2}\lambda),$$
$$\overline{n}_{13} = \overline{n}_{14} = \overline{n}_{23} = \overline{n}_{24} = \overline{n}_{31} = \overline{n}_{32} = \overline{n}_{41} = \overline{n}_{42} = 0.$$

Reescrevendo as equações (3.9), (3.11), (3.10) e (3.12) encontramos a expressões simplificada,

$$T = \frac{1}{\overline{n}_{11} + \overline{n}_{12}} e^{-i\epsilon\lambda}, \tag{3.13}$$

$$R = \frac{\overline{n}_{21} + \overline{n}_{22}}{\overline{n}_{11} + \overline{n}_{12}}, \tag{3.14}$$

$$\widetilde{T} = \widetilde{R} = 0. \tag{3.15}$$

E diante destas equações, podemos facilmente chegar aos coeficientes dados por

$$\boxed{\begin{gathered} T = \frac{e^{-i\epsilon\lambda}}{\cos(\sqrt{\epsilon^2 - 1}\lambda) + \frac{(1-2\epsilon^2)}{2\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1}} i \sin(\sqrt{\epsilon^2 - 1}\lambda)} \\ \\ R = \frac{-i \sin(\sqrt{\epsilon^2 - 1}\lambda)}{(2\epsilon\sqrt{\epsilon^2 - 1})\cos(\sqrt{\epsilon^2 - 1}\lambda) + i(1 - 2\epsilon^2)\sin(\sqrt{\epsilon^2 - 1}\lambda)} \\ \\ \widetilde{T} = 0 \qquad \widetilde{R} = 0 \end{gathered}}.$$

A partir da solução geral para a equação de Schrödinger quaterniônica foi possível resgatar o caso complexo.

3.4 Análise comparativa

Após encontrar a solução analítica, podemos através dela encontrar diferenças entre o caso puramente quaterniônico e o caso complexo, seguindo a mesma linha de comparações feitas no capítulo anterior. Na solução analítica, o limite complexo foi resgatado da solução geral, mas o limite puramente quaterniônico não se mostra muito simplificado diante da solução geral, por isso algumas análises gráficas serão feitas para efetuar tais comparações.

Na figura (3.1) é feita uma análise, mantendo-se ϵ constante em 1.5 (já que para estar na região de difusão $\epsilon > 1$) que compara o comportamente de $|T|^2$ (probabilidade de transmissão).

A linha contínua mostra o comportamento do limite complexo e a tracejada, do limite puramente quaterniônico. É possível perceber que o fenômeno de ressonância ($|T|^2 = 1$) também ocorre no limite puramente quaterniônico, mas, diferentemente do caso complexo, os valores de λ onde ocorrem o fenômeno não são dados por $\sqrt{\epsilon^2 - 1}\lambda = n\pi$, mas existe periodicidade .

A figura (3.2), deixa fixo o comprimento da barreira e analisa o comportamento da solução complexa (linha contínua) e da solução puramente quaterniônica (linha tracejada) quando é variada a energia ou a altura do potencial, pois $\epsilon = \sqrt{E/V_0}$. Percebemos que a solução puramente quaterniônica oscila mais que a solução complexa à medida que se varia ϵ, com isso, o valor da energia para a qual, a partir dela a solução complexa se mantenha em transmissão total é menor que a energia necessária para que a transmissão se mantenha total na solução puramente quaterniônica.

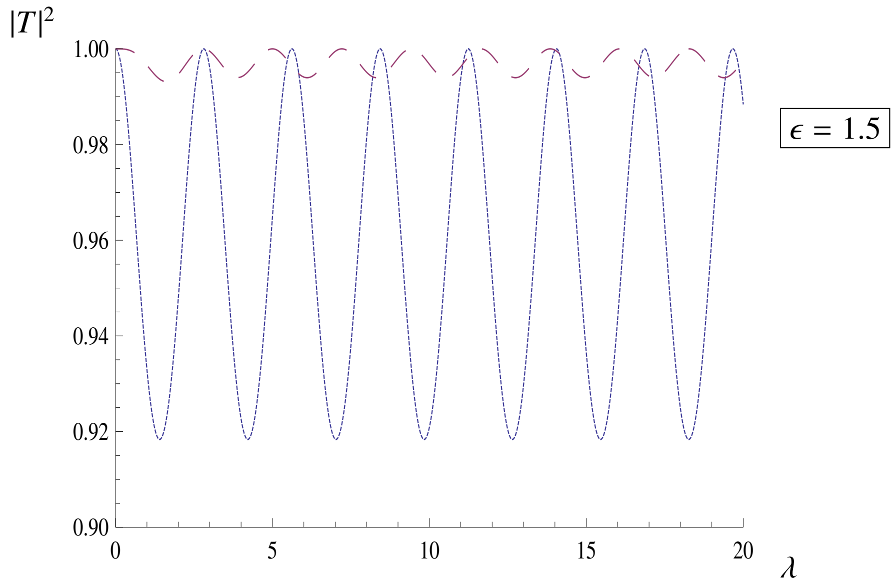


Figura 3.1: Variação do coeficiente de transmissão $|T|^2$ em função do comprimento da barreira λ, para $\epsilon = 1.5$. Limite complexo (linha contínua) e limite puramente quaterniônico (linha tracejada).

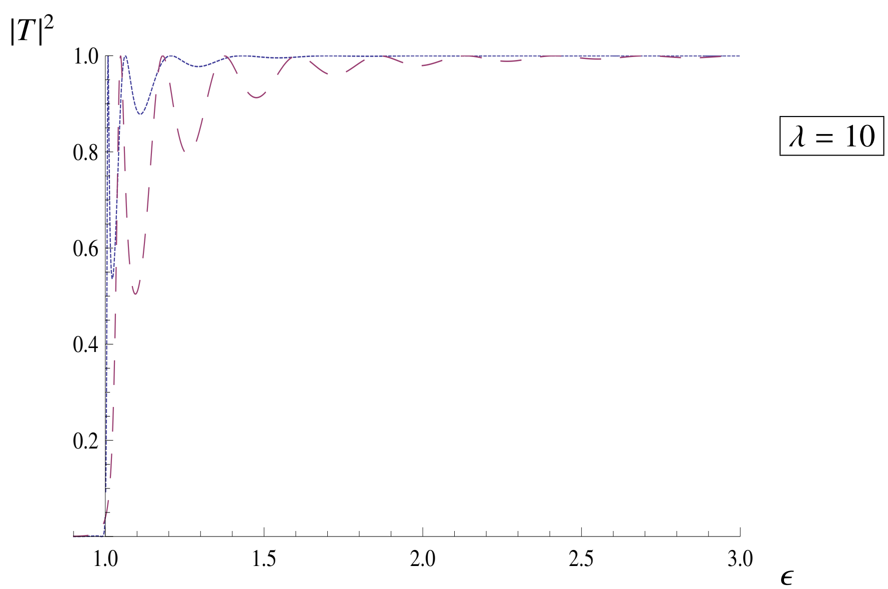


Figura 3.2: Variação do coeficiente de transmissão $|T|^2$ em função de ϵ para $\lambda = 10$. Limite complexo (linha contínua) e limite puramente quaterniônico (linha tracejada).

3.5 Equação de Schrödinger para $\epsilon = 1$

Nesta seção, será analisado o que ocorre com $\epsilon = 1$, tanto para o caso complexo quanto para o caso puramente quaterniônico. Para esses cálculos, será conveniente usar

$$V_c = V_1/V_0, \quad V_q = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}/V_0 \quad \text{e} \quad \arctan\theta = V_3/V_2.$$

De onde podemos reescrever,

$$z = i\frac{V_q e^{i\theta}}{\epsilon^2 + \sqrt{\epsilon^4 - V_q^2}} \quad \text{e} \quad w = -i\frac{V_q e^{-i\theta}}{\epsilon^2 + \sqrt{\epsilon^4 - V_q^2}}.$$

3.5.1 Caso complexo

No caso $V_q = 0$ temos, $V_c = 1$ e a equação (2.7) se reduz a

$$i\phi''(\xi) = i\phi(\xi) - \phi(\xi)i. \tag{3.16}$$

Considerando $\phi(\xi) = \varphi(\xi) + j\,\psi(\xi)$ com

$$\varphi, \psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R},$$

temos

$$i\,[\varphi''(\xi) + j\,\psi''(\xi)] = i\,[\varphi(\xi) + j\,\psi(\xi)] - [\varphi(\xi) + j\,\psi(\xi)]\,i$$

que leva a um sistema complexo

$$\begin{cases} i\,\varphi''(\xi) = i\,\varphi(\xi) - \varphi(\xi)\,i = 0, \\ \psi''(\xi) = \psi(\xi) + \psi(\xi). \end{cases}$$

De onde encontramos

$$\varphi(\xi) = A\xi + B \qquad \text{e}$$

$$\psi(\xi) = Ce^{\sqrt{2}\xi} + De^{-\sqrt{2}\xi}.$$

E a solução da equação (3.16) é dada por

$$\phi(\xi) = A\xi + B + j(Ce^{\sqrt{2}\xi} + De^{-\sqrt{2}\xi}). \tag{3.17}$$

Logo as soluções estacionárias são

$$\begin{cases} e^{i\xi} + Re^{-i\xi} + j\widetilde{R}e^{\xi} & \xi < 0, \\ A\xi + B + j\,(Ce^{\sqrt{2}\xi} + De^{-\sqrt{2}\xi}) & 0 < \xi < \lambda, \\ Te^{i\xi} + j\widetilde{T}e^{-\xi} & \xi > \lambda. \end{cases} \tag{3.18}$$

As condições de continuidade

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0), \quad \phi'_I(0) = \phi'_{II}(0),$$
$$\phi_{II}(\lambda) = \phi_{III}(\lambda), \quad \phi'_{II}(\lambda) = \phi'_{III}(\lambda),$$

fornecem os sistemas

$$\begin{cases} 1 + R &= B, \\ 1 - R &= -iA, \\ \widetilde{R} &= C + D, \\ \widetilde{R} &= \sqrt{2}(C - D), \end{cases} \tag{3.19}$$

e

$$\begin{cases} Te^{i\lambda} &= A\lambda + B, \\ Te^{i\lambda} &= -iA, \\ \widetilde{T}e^{-\lambda} &= Ce^{\sqrt{2}\lambda} + De^{-\sqrt{2}\lambda}, \\ -\widetilde{T}e^{-\lambda} &= \sqrt{2}(Ce^{\sqrt{2}\lambda} - De^{-\sqrt{2}\lambda}). \end{cases} \tag{3.20}$$

Reescrevendo o sistema em forma matricial como em (3.6) e (3.7), onde

$$\mathcal{M}(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\sqrt{2}\lambda} & e^{-\sqrt{2}\lambda} \\ 0 & 0 & \sqrt{2}e^{\sqrt{2}\lambda} & -\sqrt{2}e^{-\sqrt{2}\lambda} \end{pmatrix}.$$

O sistema em forma matricial é dado por

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \\ \widetilde{R} \\ \widetilde{R} \end{pmatrix} = \mathcal{F}^{-1}\mathcal{M}(0)\mathcal{M}(\lambda)^{-1} \begin{pmatrix} Te^{i\lambda} \\ Te^{i\lambda} \\ \widetilde{T}e^{-\lambda} \\ -\widetilde{T}e^{-\lambda} \end{pmatrix}, \tag{3.21}$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \\ \widetilde{R} \\ \widetilde{R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1-\lambda i}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{-1-\lambda i}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cosh(\sqrt{2}\lambda) & \frac{-\sinh(\sqrt{2}\lambda)}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}\sinh(\sqrt{2}\lambda) & \cosh(\sqrt{2}\lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Te^{i\lambda} \\ Te^{i\lambda} \\ \widetilde{T}e^{-\lambda} \\ -\widetilde{T}e^{-\lambda} \end{pmatrix}. \tag{3.22}$$

Com solução dada por

$$\boxed{T = \frac{2e^{-i\lambda}}{2-\lambda i} \quad R = -\frac{\lambda i}{2-\lambda i} \quad \widetilde{T} = \widetilde{R} = 0}. \tag{3.23}$$

Da equação (3.19), encontramos também $C = D = 0$.

3.5.2 Caso quaterniônico

Admitindo $V_q = 1$ temos $V_c = 0$. A equação se reduz a

$$i\,\phi''(\xi) = je^{-i\theta}\phi(\xi) - \phi(\xi)\,i. \tag{3.24}$$

Do mesmo modo que no limite complexo, considerando, $\phi(\xi) = \varphi(\xi) + j\,\psi(\xi)$, com

$$\varphi, \psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R},$$

então,

$$i\,[\varphi''(\xi) + j\,\psi''(\xi)] = j\,e^{-i\theta}[\varphi(\xi) + j\,\psi(\xi)] - \varphi(\xi)i - j\,\psi(\xi)\,i.$$

Que resulta no seguinte sistema,

$$\begin{cases} i\,\varphi''(\xi) = -\psi(\xi)e^{i\theta} - \varphi(\xi)\,i, \\ k\,\psi''(\xi) = j\,e^{-i\theta}\varphi(\xi) + k\,\psi(\xi). \end{cases}$$

Com isso

$$\varphi''(\xi) = i\,\psi(\xi)\,e^{i\theta} - \varphi(\xi).$$

$$\psi''(\xi) = i\,e^{-i\theta}\varphi(\xi) + \psi(\xi).$$

$$\varphi''''(\xi) = i\,e^{i\theta}\psi''(\xi) - \varphi''(\xi) = i\,e^{i\theta}[i\,e^{-i\theta}\,\varphi(\xi) + \psi(\xi)] - i\,e^{i\theta}\,\psi(\xi) + \varphi(\xi) = 0.$$

Logo,

$$\varphi(\xi) = A\xi^3 + B\xi^2 + C\xi + D.$$

Usando o fato de que

$$\psi(\xi) = [\varphi''(\xi) + \varphi(\xi)](-i\,e^{-i\theta}).$$

Chegamos a

$$\psi(\xi) = [A\xi^3 + B\xi^2 + (6A + C)\xi + 2B + D]ie^{-i\theta},$$

substituindo essas equações na equação (3.24), temos a expressão geral da solução,

$$\phi(\xi) = A\xi^3 + B\xi^2 + C\xi + D - ji[A\xi^3 + B\xi^2 + (6A + C)\xi + 2B + D]e^{-i\theta}. \tag{3.25}$$

A solução estacionária é dada por

$$\begin{cases} e^{i\xi} + Re^{-i\xi} + j\widetilde{R}e^{\xi} & \xi < 0, \\ A\xi^3 + B\xi^2 + C\xi + D - jie^{-i\theta}(A(\xi^3 + 6\xi) + B(\xi^2 + 2) + C\xi + D) & 0 < \xi < \lambda, \\ Te^{i\xi} + j\widetilde{T}e^{-\xi} & \xi > \lambda. \end{cases} \tag{3.26}$$

Com as condições de continuidade

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0), \quad \phi'_I(0) = \phi'_{II}(0),$$
$$\phi_{II}(\lambda) = \phi_{III}(\lambda), \quad \phi'_{II}(\lambda) = \phi'_{III}(\lambda),$$

chegamos aos sistemas,

$$\begin{cases} 1 + R &= D, \\ 1 - R &= -iC, \\ \widetilde{R} &= i(2B + D)e^{-i\theta}, \\ \widetilde{R} &= i(6A + C)e^{-i\theta}. \end{cases} \tag{3.27}$$

e

$$\begin{cases} Te^{i\lambda} &= A\lambda^3 + B\lambda^2 + C\lambda + D, \\ Te^{i\lambda} &= 3A\lambda^2 + 2B\lambda + C, \\ -\widetilde{T}e^{-\lambda} &= ie^{-i\theta}(A(\lambda^3 + 6\lambda) + B(\lambda^2 + 2) + C\lambda + D), \\ \widetilde{T}e^{-\lambda} &= ie^{-i\theta}(3A(\lambda^2 + 6) + B\lambda + C). \end{cases} \tag{3.28}$$

Refazendo o raciocínio usado em (3.6) e (3.7), o sistema é reescrito em forma matricial, com

$$\mathcal{M}(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda^3 & \lambda^2 & \lambda & 1 \\ 3\lambda^2 & 2\lambda & 1 & 0 \\ \lambda^3 + 6\lambda & \lambda^2 + 2 & \lambda & 1 \\ 3\lambda^2 + 6 & 2\lambda & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \mathcal{F} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ i & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R \\ ie^{i\theta}\widetilde{R} \\ ie^{i\theta}\widetilde{R} \end{pmatrix} = \underbrace{\mathcal{F}^{-1}\mathcal{M}(0)\mathcal{M}(\lambda)^{-1}}_{\mathcal{N}} \begin{pmatrix} Te^{i\lambda} \\ iTe^{i\lambda} \\ i\widetilde{T}e^{-\lambda}e^{i\theta} \\ -i\widetilde{T}e^{-\lambda}e^{i\theta} \end{pmatrix}. \tag{3.29}$$

Com

$$\mathcal{N} = \begin{pmatrix} \dfrac{-\lambda^2+2-2i\lambda}{4} & \dfrac{\lambda^3+3i\lambda^2-6\lambda-6i}{12} & \dfrac{\lambda^2+2i\lambda}{4} & \dfrac{\lambda^3-3i\lambda^2}{12} \\ \dfrac{-\lambda^2+2+2i\lambda}{4} & \dfrac{\lambda^3-3i\lambda^2-6\lambda+6i}{12} & \dfrac{\lambda^2-2i\lambda}{4} & \dfrac{\lambda^3+3i\lambda^2}{12} \\ \dfrac{-\lambda^2}{2} & \dfrac{\lambda^2}{6} & \dfrac{1}{2}(\lambda^2+2) & -\dfrac{\lambda}{6}(\lambda^2+6) \\ \lambda & \dfrac{-\lambda^2}{2} & -\lambda & \dfrac{1}{2}(\lambda^2+2) \end{pmatrix}.$$

Logo,

$$\boxed{\begin{aligned} T &= -2\,e^{-i\lambda}\frac{\lambda^3+6\lambda^2+12\lambda+12}{\lambda^4+4(i+1)\lambda^3+18\,i\lambda^2+24\lambda(i-1)-24} \\ R &= i\,\frac{\lambda^4+4\lambda^3+6\lambda^2}{\lambda^4+4(i+1)\lambda^3+18\,i\,\lambda^2+24\lambda(i-1)-24} \\ \widetilde{T} &= -2\,i\lambda\,e^{-i\theta+\lambda}\frac{i\lambda^2+3\lambda(i-1)-6}{\lambda^4+4(i+1)\lambda^3+18i\lambda^2+24\lambda(i-1)-24} \\ \widetilde{R} &= -i\,\lambda e^{-i\theta}\frac{\lambda^3(i+1)+4i\,\lambda^2+6\lambda(i-1)-12}{\lambda^4+4(i+1)\lambda^3+18i\lambda^2+24\lambda(i-1)-24} \end{aligned}}. \tag{3.30}$$

3.5.3 Análise comparativa

Encontrado o valor de T para $\epsilon = 1$, podemos comparar como se comportam o limite complexo e o limite puramente quaterniônico de modo a encontrar diferenças ou semelhanças entre eles. Observando a figura (3.3) percebemos que as curvas tem um comportamente muito parecido e que a função $|T|^2$ no limite puramente quaterniônico é sempre superior a função no caso complexo. Além disso, perecebemos que $\epsilon = 1$ leva $|T|^2$ a um comportamentom da região de tunelamento, onde a medida que λ aumenta a probabilidade de transmissão diminui assintóticamente. O mesmo raciocínio pode ser feito diretamente na expressão encontrada para T, nos dois casos, pois quando $\lambda \to \infty$, $|T|^2 \to 0$.

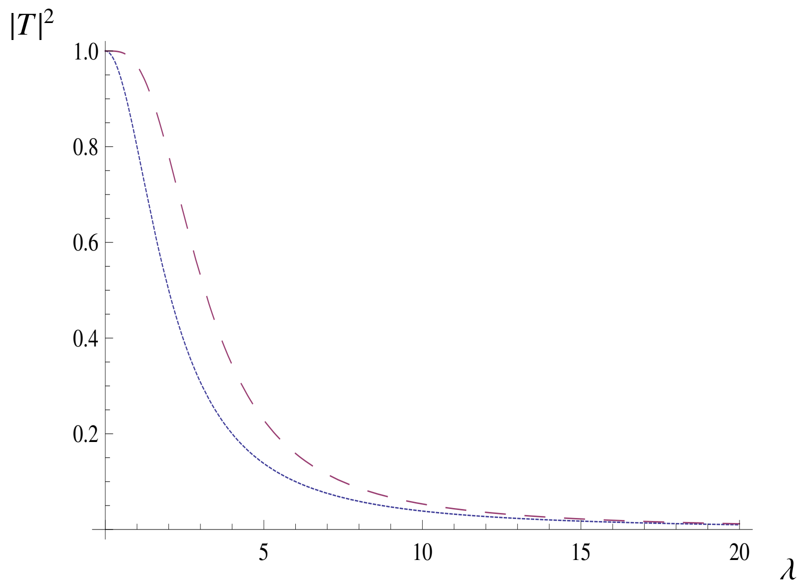


Figura 3.3: Variação da probabilidade de transmissão $|T|^2$ em função do comprimento da barreira λ. Limite complexo (linha contínua) e limite puramente quaterniônico (linha tracejada).

CAPÍTULO 4

Método da fase estacionária aplicado ao potencial complexo tipo barreira

O método da fase estacionária é um método analítico utilizado para encontrar o máximo de uma integral. Esse método baseia-se no uso da fase do integrando, para uma correta aplicação uma série de condições devem ser respeitadas. O método aplicado sem respeitar tais restrições pode ocasionar vários paradoxos. A aplicação do método da fase estacionária para o tempo de tunelamento em um potencial tipo barreira, tem sido muito estudado nos últimos anos, o resultado leva a velocidades maiores que a velocidade da luz. A aplicação direta do método da fase estacionária leva a paradoxos também no caso da difusão. Este capítulo é dedicado a analisar algumas situações sobre o método da fase estacionária.

4.1 Fases e tempos dos máximos do pacotes de onda

Para aplicar o método da fase estacionária no caso da barreira de potencial, é preciso ter as fases dos coeficientes, R, T, A e B,

$$T = 4\frac{\epsilon^2(\epsilon^2-1)}{\mathcal{D}(\epsilon)}e^{-i[\epsilon\lambda-\mathcal{L}(\epsilon)]}, \qquad R = \frac{\sin(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda)}{\mathcal{D}(\epsilon)}e^{-i[-\mathcal{L}(\epsilon)+\frac{\pi}{2}]},$$

$$A = \frac{2\epsilon^2(\sqrt{\epsilon^2-1}+1)+\epsilon}{\mathcal{D}(\epsilon)}e^{-i[\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda-\mathcal{L}(\epsilon)]}, \quad B = \frac{2\epsilon^2(\sqrt{\epsilon^2-1}+1)-\epsilon}{\mathcal{D}(\epsilon)}e^{i[\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda+\mathcal{L}(\epsilon)]}.$$

Onde

$$\mathcal{D}(\epsilon) = [4\epsilon^2(\epsilon^2-1)+\sin^2(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda)]^{\frac{1}{2}}, \quad \mathcal{L}(\epsilon) = \arctan\left[\frac{2\epsilon^2-1}{2\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1}}\tan(\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda)\right].$$

A partir destes coeficientes podemos com superposições das ondas planas construir os pacotes de onda

$$\Omega_1 = \int [e^{i\epsilon\xi} + Re^{-i\epsilon\xi}]e^{-i\epsilon^2\tau}g(\epsilon)d\epsilon,$$

$$\Omega_2 = \int [Ae^{i\sqrt{\epsilon^2-1}\xi} + Be^{-i\sqrt{\epsilon^2-1}\xi}]e^{-i\epsilon^2\tau}g(\epsilon)d\epsilon,$$

$$\Omega_3 = \int [Te^{i\epsilon\xi}]e^{-i\epsilon^2\tau}g(\epsilon)d\epsilon.$$

Ω_1, Ω_2 e Ω_3, correspondem as regiões I ($\xi < 0$), II ($0 < \xi < \lambda$) e III ($\xi > \lambda$), respectivamente. As fases na região I (incidentes, refletidas), na região de potencial (A, B) e na região III (transmitida) são dadas por

$$\theta_{inc}(\epsilon,\xi,\tau) = \epsilon\xi - \epsilon^2\tau,$$

$$\theta_{ref}(\epsilon,\xi,\tau) = \mathcal{L}(\epsilon) - \frac{\pi}{2} - \epsilon\xi - \epsilon^2\tau,$$

$$\theta_A(\epsilon,\xi,\tau) = \mathcal{L}(\epsilon) + \sqrt{\epsilon^2-1}(\xi-\lambda) - \epsilon^2\tau,$$

$$\theta_B(\epsilon, \xi, \tau) = \mathcal{L}(\epsilon) + \sqrt{\epsilon^2 - 1}(\lambda - \xi) - \epsilon^2 \tau,$$

$$\theta_{tra}(\epsilon, \xi, \tau) = \mathcal{L}(\epsilon) + \epsilon(\xi - \lambda) - \epsilon^2 \tau.$$

Utilizando a condição de fase estacionária (derivada da fase em relação a ϵ calculada em ϵ_0 depois igualada a zero), encontramos a posição do máximo dos pacotes de onda. Onde

$$\mathcal{L}'(\epsilon_0) = \frac{2}{\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}} \frac{\epsilon_0^2(2\epsilon_0^2 - 1)\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}\lambda - \sin\left(\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}\lambda\right)\cos\left(\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}\lambda\right)}{4\epsilon_0^2(\epsilon_0^2 - 1) + \sin^2\left(\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}\lambda\right)}.$$

$$\xi_{inc}^{max}(\tau) = 2\epsilon_0 \tau,$$

$$\xi_{ref}^{max}(\tau) = -2\epsilon_0 \tau + \mathcal{L}'(\epsilon_0),$$

$$\xi_A^{max}(\tau) = \lambda + \frac{\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}}{2\epsilon_0}\left[2\epsilon_0 \tau - \mathcal{L}'(\epsilon_0)\right],$$

$$\xi_B^{max}(\tau) = \lambda + \frac{\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}}{2\epsilon_0}\left[-2\epsilon_0 \tau + \mathcal{L}'(\epsilon_0)\right],$$

$$\xi_{tra}^{max}(\tau) = \lambda + 2\epsilon_0 \tau - \mathcal{L}'(\epsilon_0).$$

A partir destas podemos encontrar os tempos para os quais as ondas incidentes e refletidas encontram-se em $\xi = 0$

$$\tau_{inc} = 0, \quad \tau_{ref} = \frac{\mathcal{L}'(\epsilon_0)}{2\epsilon_0}.$$

Para a transmissão temos

$$\xi_{tra}^{max}(\tau_{tra}) = \lambda.$$

De onde

$$\tau_{tra}(\tau) = \frac{\mathcal{L}'(\epsilon_0)}{2\epsilon_0}.$$

4.2 Problemas encontrados na aplicação à barreira de potencial

Duas situações são possíveis no caso da barreira de potencial. A primeira é quando os pacotes de onda são largos com relação ao comprimento da barreira, os pacotes podem ser considerados como onda plana, com isso o método da fase estacionária pode ser aplicado a solução. Mas, se ao contrário, os pacotes de onda forem estreitos com relação ao comprimento da barreira, eles terão duas descontinuidades e irão se dividir em múltiplos pacotes. Para mostrar quais são os problemas encontrados para pacotes de onda estreitos com relação ao comprimento da barreira, vamos aplicar o método da fase estacionária diretamente às soluções de onda plana e considerar ϵ_0 próximo ao valor para o qual $\sqrt{\epsilon_0^2 - 1}\lambda = n\pi$, temos

$$\mathcal{L}'(\epsilon_0) = \frac{(2\epsilon_0^2 - 1)\lambda}{2(\epsilon_0^2 - 1)} > 0.$$

$$\tau_{tra} = \tau_{ref}.$$

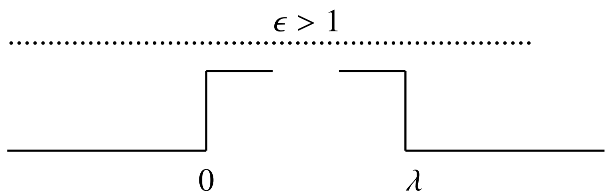
Nesse momento, podemos perceber o primeiro problema, se consideramos o intervalo de tempo que vai de $\tau = 0$ até τ_A, nenhum pico é encontrado, pois $\tau_{ref} = \tau_{tra} > \tau_A$. O que não está de acordo com a conservação de probabilidade, pois em $\xi = 0$ (e / ou $\xi = \lambda$) o fluxo de probabilidades de entrada é diferente do fluxo de probabilidades de saída.

O segundo problema diz respeito ao comportamento da solução quando o comprimento da barreira é muito grande ($\lambda \to \infty$), nesse caso esperamos que a solução se aproxime da solução limite, que é o potencial tipo degrau. Mas, ainda na condição de ressonância, encontramos uma transmissão total ($|R| = 0$), o que não é possível para o degrau de potencial, além de um atraso no tempo de reflexão, que para o degrau é instantâneo. Também é possível, fora da condição de ressonânica, encontrar $\tau_{ref} < 0$ e com isso, onda incidente e refletida podem existir ao mesmo momento, contrariando mais uma vez a conservação de probabilidade.

O artigo [13], faz análises numéricas e através delas percebemos a existência de múltiplos picos devido a dois pontos de reflexão ($\xi = 0$ e $\xi = \lambda$). A próxima seção mostra como utilizar as conclusões tiradas da análise numérica para acabar com os problemas citados acima.

4.3 Múltiplos picos e o método da fase estacionária

Para resolver o problema é preciso levar em consideração as duas descontinuidades da barreira. Consideramos a barreira como dois degraus, como no esquema abaixo [15],



Com isso, a onda incidente toca o primeiro degrau em $\xi = 0$, tem uma reflexão instantânea R_1 e uma onda A_1 que continua em direção ao segundo degrau, essa onda toca a segunda descontinuidade $\xi = \lambda$ com isso uma parte é transmitida T_1 e outra parte volta B_1 que caminha em direção novamente a descontinuidade em $\xi = 0$ e o processo se repete. Essas múltiplas difusões resultam em múltiplos picos, quando aplicamos o método da fase estacionária anteriormente, consideramos pico único.

Diante disso, as condições de continuidade devem ser analisadas em $\xi = 0$ e $\xi = \lambda$ como dois degraus, e além disso, devem ser consideradas para cada vez que a partícula toca a descontinuidade, separadamente. Aplicando as condições de continuidade desta maneira, podemos reescrever os coeficientes como séries,

$$\boxed{\begin{aligned}
R = \textstyle\sum_{n=1}^{\infty} R_n &= R_1 + R_2\left[1 - \left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2 - 1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2 - 1}}\right)^2 e^{2i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}\right]^{-1}\\
A = \textstyle\sum_{n=1}^{\infty} A_n &= A_1\left[1 - \left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2 - 1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2 - 1}}\right)^2 e^{2i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}\right]^{-1}\\
B = \textstyle\sum_{n=1}^{\infty} B_n &= B_1\left[1 - \left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2 - 1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2 - 1}}\right)^2 e^{2i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}\right]^{-1}\\
T = \textstyle\sum_{n=1}^{\infty} T_n &= T_1\left[1 - \left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2 - 1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2 - 1}}\right)^2 e^{2i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda}\right]^{-1}
\end{aligned}}\,.$$

Com,

$$R_1 = \frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}, \quad A_1 = \frac{2\epsilon}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}, \quad B_1 = \frac{2\epsilon(\sqrt{\epsilon^2-1}-\epsilon)}{(\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1})^2} e^{2i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda},$$

$$T_1 = \frac{4\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1}}{(\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1})^2} e^{i(\sqrt{\epsilon^2-1}-\epsilon)\lambda}, \quad R_2 = \frac{4\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1}(\sqrt{\epsilon^2-1}-\epsilon)}{(\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1})^3} e^{2i\sqrt{\epsilon^2-1}\lambda},$$

$$\frac{R_{n+2}}{R_{n+1}} = \frac{A_{n+1}}{A_n} = \frac{B_{n+1}}{B_n} = \frac{T_{n+1}}{T_n} = \left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}\right)^2 e^{2i\sqrt{\epsilon^2-1}} \quad n = 1, 2, ...$$

Para verificar que essas considerações tornam válida a conservação de probabilidade, é preciso verificar que $\sum_{n=1}^{\infty}|R_n|^2 + \sum_{n=1}^{\infty}|T_n|^2 = 1$, pois sabemos que para ondas planas

$$\boxed{|R|^2 + |T|^2 = |\sum_{n=1}^{\infty} R_n|^2 + |\sum_{n=1}^{\infty} T_n|^2 = 1}.$$

Mas,

$$\sum_{n=1}^{\infty}|R_n|^2 + \sum_{n=1}^{\infty}|T_n|^2 = |R_1|^2 + |T_1|^2 + |R_2|^2 + |T_2|^2 + (|R_2|^2 + |T_2|^2)\sum_{n=3}^{\infty}\left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}\right)^{4(n-2)}$$

$$= |R_1|^2 + |T_1|^2 + (|R_2|^2 + |T_2|^2)(1 + \sum_{m=1}^{\infty}\left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}\right)^{4m}) =$$

$$|R_1|^2 + |T_1|^2 + (|R_2|^2 + |T_2|^2)\left(\frac{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}{4\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1}}\right) = \frac{1 + 16\epsilon^2(\epsilon^2-1)}{(\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1})^4} + \frac{4\epsilon^2\sqrt{\epsilon^2-1}}{(\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1})^4} = 1.$$

É possível verificar também que, utilizando este método não se tem mais transmissão total, pois

$$\sum_{n=1}^{\infty}|T_n|^2 = \frac{16\epsilon^2\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{\epsilon - \sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon + \sqrt{\epsilon^2-1}}\right)^{4(n-2)} = \frac{\epsilon\sqrt{\epsilon^2-1}}{\epsilon^2-1} < 1.$$

Logo, a condição de ressonância não é mais um impedimento de se ter como limite a solução do degrau, quando $\lambda \to \infty$.

Conclusões

A solução analítica para um potencial quaterniônico tipo barreira foi o principal objetivo desta dissertação. Trabalhos anteriores sobre a barreira de potencial quaterniônico eram apenas numéricos. Mas além disso, alguns estudos foram feitos visando um melhor entendimento das diferenças qualitativas entre a mecânica quântica complexa e a mecânica quântica quaterniônica.

- **Tópicos apresentados neta dissertação:**
  - Estudo da equação de Schrödinger complexa, com potencial tipo degrau e potencial tipo barreira;
  - Solução analítica e pacotes de onda para o potencial quaterniônico tipo degrau;
  - Comparações entre o limite complexo e o limite puramente quaterniônico através do método da fase estacionária aplicado ao potencial quaterniônico tipo degrau;
  - Solução analítica para potencial quaterniônico tipo barreira;
  - Comparações gráficas entre o limite complexo e o limite puramente quaterniônico para o potencial quaterniônico tipo barreira;
  - Solução analítica para o limite entre a difusão e o tunelamento ($\epsilon = 1$);
  - Discussão de pacotes de onda para o potencial complexo tipo barreira.

- **Tópicos para futuras investigações:**
  - Formalismo de pacotes de ondas para potenciais quaterniônicos tipo barreira;
  - Fenômeno de ressonância;
  - Fenômeno de múltipla difusão;
  - Análise das diferenças entre potenciais complexos e potenciais puramente quaterniônicos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] W.R. H ,
Lectures on quaternions,
Dublin(1853)

[2] W.R. H ,
Elements of quaternions,
Chelsea Publishing Co., New York (1969)

[3] C. C -T , B.D F. L ,
Quantum mechanics,
New York: John Wiley & Sons, 1977.

[4] A S.L.,
Quaternionic Quantum Mechanics and Quantum Fields,
Oxford UP. New York 1995.

[5] D L S. D G.C.,
Quaternionic diferential operators,
J. Math. Phys. 42 ,2236-2265 (2001).

[6] D L S.; D G.C. M M. T.,
Analytic plane wave solutions for the quaternionic potential step,
J. Math. Phys. 47, 082106-15 (2006).

[7] D L S. D G.C.,
Quaternionic diffusion by a potencial step,
J. Math. Phys. 47, 102104-9 (2006).

[8] D L S. D G.C.,
Quaternionic wave packets,
J. Math. Phys. 48 ,025111-10 (2007).

[9] D , A.J. M K , B.H.,
Nonrelativistic quaternionic quantum mechanics in one dimension,
Phys. Rev. A 40, 4209-4214 (1989).

[10] D , A.J. M , B.H.,
Observability of quaternionic quantum mechanics,
Phys. Rev. A. 46, 3671-3675 (1992).

[11] D L S.; D G.C. N ,C.C.,
Quaternionic potentials in non-relativistic quantum mechanics,
J. Math. Phys. 35, 5411-5426 (2002).

[12] D G.C.,
Operadores diferencias quaterniônicos e aplicações em Física,
Unicamp Campinas (2002).

[13] D L S.;B , A.E. R , P.P.,
Above barrier potential diffusion,
Mod.Phys.Lett.A 19, 2717-2725 (2004).

[14] L , V.J.H.C.,
O formalismo de pacotes de onda aplicado a fenômenos de múltipla difusão,
Universidade Federal do Paraná, Curitiba 2009.

[15] B , A.E.,

Principe of stationary phase for propagating wave packets in unidimensional scattering problem,

Eur. Phys. J.C. 56, 545-556 (2008).