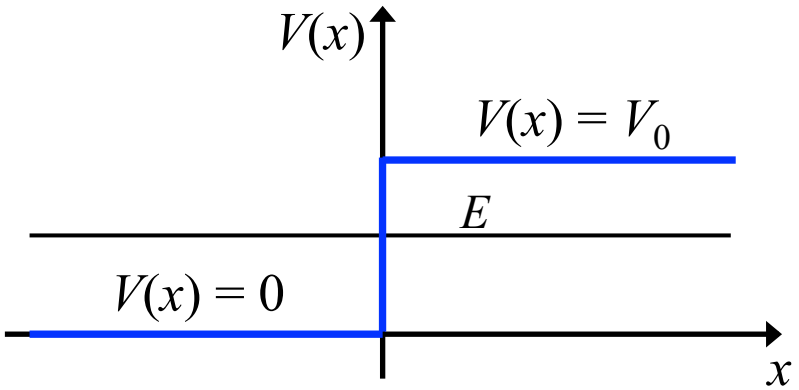
O potencial degrau I – $E < V_0$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \text{ , se } x > 0 \\ 0 \text{ , se } x \leq 0 \end{cases}$$



Situação não física: $dV/dx|_{x=0} = \infty$. Mas ...

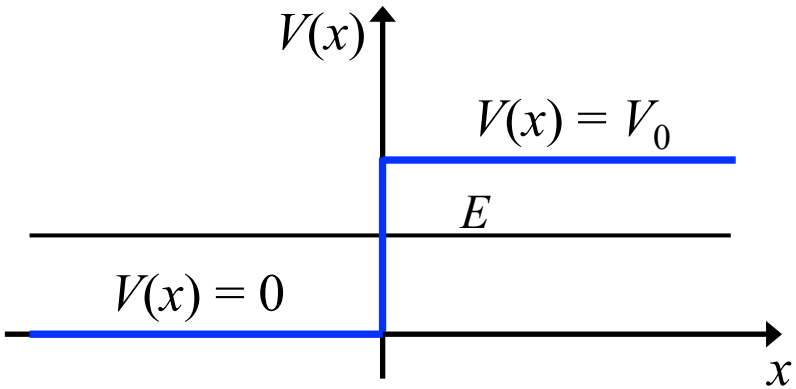
Idealização, pois $F = \infty$, mas $\Delta t = 0 \Rightarrow \Delta p = 2p$. Impulso finito.

Caso clássico: partícula refletida em $x = 0$, se $E < V_0$.

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x) \text{ para } x > 0 \Rightarrow \frac{p^2}{2m} < 0$$

O potencial degrau I – $E < V_0$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \text{ , se } x > 0 \\ 0 \text{ , se } x \leq 0 \end{cases}$$



Caso Quântico:

$$x < 0 : -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \; ; \qquad x > 0 : -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

Região $x \leq 0$: solução para a partícula livre: $\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

com: $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Região $x > 0$: nesse caso, $E < V_0 \Rightarrow$ solução oscilatória

Temos que ter solução que $\rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty$. Exponencial real decrescente:

$$\psi(x) = e^{-k_2 x}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \left(-k_2\right)^2 e^{-k_2 x} = k_2^2 \psi(x)$$

Substituindo na equação de Schrödinger, temos:

$-\frac{\hbar^2}{2m} k_2^2 \psi(x) + V_0 \psi(x) = E\psi(x)$, que é satisfeita se: $k_2 = \frac{\sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}}{\hbar}$

Outra solução particular é a exponencial crescente: $\psi(x) = e^{k_2 x}$

Solução geral, para $x > 0$: $\psi(x) = Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x}$

Agora temos que determinar as constantes A, B, C e D, que satisfaçam os requisitos para ψ e $d\psi/dx$: finitas, unívocas e contínuas.

$\psi(x)$ finita $\forall x \Rightarrow C = 0$. As funções são unívocas.
Falta a continuidade. Tomemos o ponto $x = 0$:

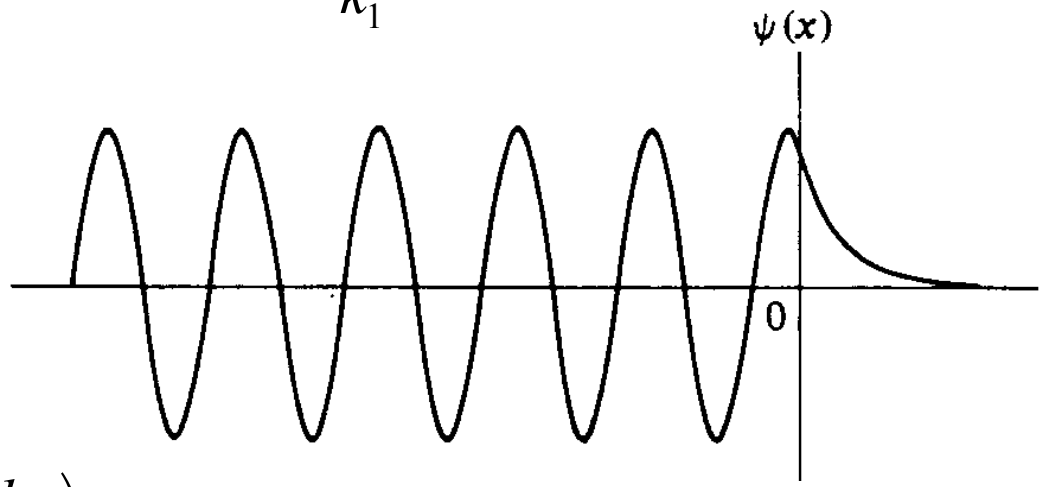
$\psi(x)$ contínua $\Rightarrow$ $De^{-k_2 x}\Big|_{x=0} = Ae^{ik_1 x}\Big|_{x=0} + Be^{-ik_1 x}\Big|_{x=0} \Rightarrow D = A + B \;\; (1)$

$d\psi(x)/dx$ contínua $\Rightarrow$

$$\Rightarrow -k_2 De^{-k_2 x}\Big|_{x=0} = ik_1 Ae^{ik_1 x}\Big|_{x=0} - ik_1 Be^{-ik_1 x}\Big|_{x=0} \Rightarrow \frac{ik_2}{k_1} D = A - B \;\; (2)$$

$$(1) + (2) \Rightarrow A = \frac{D}{2}\left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right)$$

$$(1) - (2) \Rightarrow B = \frac{D}{2}\left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)$$



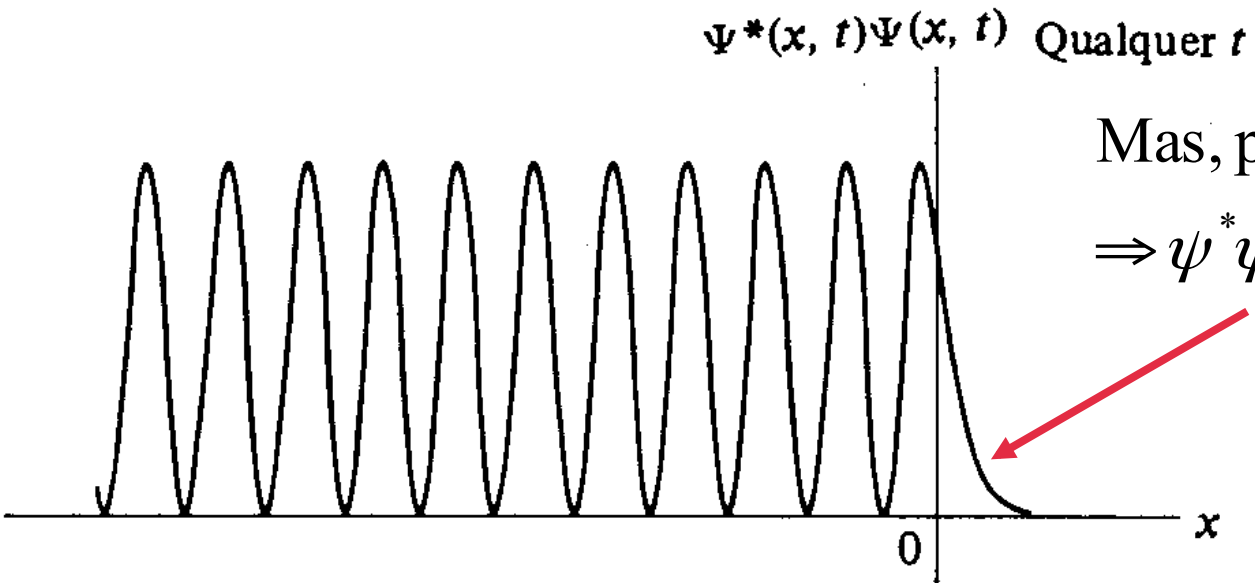
$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2}\left(1 + \frac{ik_2}{k_1}\right)e^{ik_1 x} + \frac{D}{2}\left(1 - \frac{ik_2}{k_1}\right)e^{-ik_1 x}, x \le 0 \\ De^{-k_2 x}, x \ge 0 \end{cases}$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$$

O coeficiente de reflexão é definido por:

$$R = \frac{B^* B}{A^* A} = \frac{(1 - ik_2/k_1)^*(1 - ik_2/k_1)}{(1 + ik_2/k_1)^*(1 + ik_2/k_1)} = \frac{(1 + ik_2/k_1)(1 - ik_2/k_1)}{(1 - ik_2/k_1)(1 + ik_2/k_1)} = 1$$

Portanto a partícula é sempre refletida. Na região $x < 0$, a soma das 2 ondas que se propagam em sentidos contrários produz uma onda estacionária.



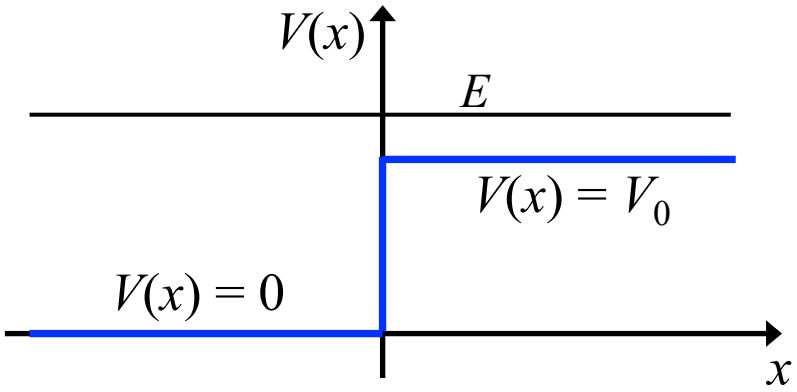
Mas, para $x \geq 0 \Rightarrow$

$$\Rightarrow \psi^* \psi = P(x) = D^* D e^{-2k_2 x} \geq 0$$

Existe penetração na região proibida, em que $E < V_0$ ($e^{-2} = 0{,}135$).

O potencial degrau II – $E > V_0$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \text{ , se } x > 0 \\ 0 \text{ , se } x \leq 0 \end{cases}$$



Caso quântico:

$$x < 0 : -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

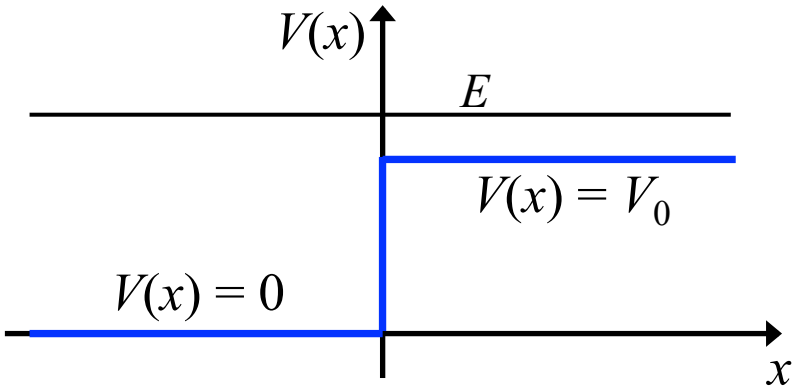
$$x > 0 : -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - V_0)\psi$$

Para $x \leq 0$: solução para a partícula livre: $\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

com: $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \dfrac{p_1}{\hbar}$

O potencial degrau II – $E > V_0$

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \text{ , se } x > 0 \\ 0 \text{ , se } x \leq 0 \end{cases}$$



Região $x > 0$: solução para partícula livre, mas com:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar} \qquad \therefore \psi(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$

Devemos tomar $D = 0$, pois não deve haver partícula refletida em $x >> 0$. Continuidade de ψ e $d\psi/dx$ em $x = 0$:

$\psi(x)$ contínua $\Rightarrow$ $Ae^{ik_1x}\Big|_{x=0} + Be^{-ik_1x}\Big|_{x=0} = Ce^{ik_2x}\Big|_{x=0} \Rightarrow A + B = C \quad (1)$

$d\psi(x)/dx$ contínua $\Rightarrow$

$$\Rightarrow ik_1Ae^{ik_1x}\Big|_{x=0} - ik_1Be^{-ik_1x}\Big|_{x=0} = ik_2Ce^{ik_2x}\Big|_{x=0} \Rightarrow \frac{k_2}{k_1}C = A - B \quad (2)$$

O potencial degrau II – $E > V_0$

$$\text{Substit. (1) em (2)}: \frac{k_2}{k_1}(A+B) = A - B \Rightarrow k_2(A+B) = k_1(A-B) \Rightarrow$$

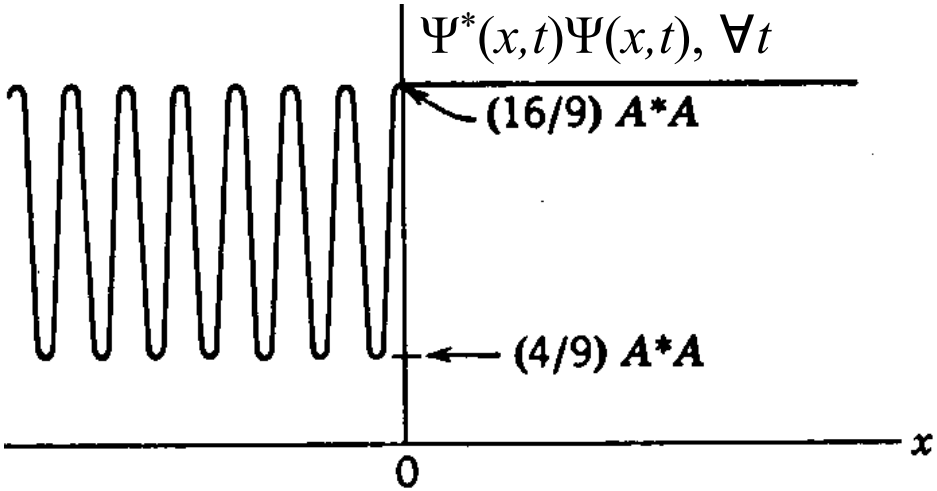
$$\Rightarrow (k_1 + k_2)B = (k_1 - k_2)A \Rightarrow B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A$$

$$\text{Substit. em (1)}: \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} + 1\right) A = C \Rightarrow C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1 x} + A\dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}, x \le 0 \\ A\dfrac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x}, x \ge 0 \end{cases}$$

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$$

Caso $k_1 = 2k_2$



A densidade de corrente de probabilidade: $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right)$

No nosso caso, para $x \leq 0$:

$$J = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^*\frac{d\Psi}{dx}\right) =$$

$$\frac{i\hbar}{2m}\left[\left(Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}\right)\left(-ik_1\right)\left(A^*e^{-ik_1x} - B^*e^{ik_1x}\right) -\right.$$

$$\left.-\left(A^*e^{-ik_1x} + B^*e^{ik_1x}\right)\left(ik_1\right)\left(Ae^{ik_1x} - Be^{-ik_1x}\right)\right] =$$

$$= \frac{\hbar k_1}{2m}\left[\left(\left|A\right|^2 - \left|B\right|^2 - AB^*e^{2ik_1x} + A^*Be^{-2ik_1x}\right) + \left(\left|A\right|^2 - \left|B\right|^2 + AB^*e^{2ik_1x} - A^*Be^{-2ik_1x}\right)\right] =$$

$$= \frac{\hbar k_1}{m}\left(\left|A\right|^2 - \left|B\right|^2\right) = J_{inc} + J_{refl}$$

Para $x \geq 0$: $$J = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx}\right) = \frac{\hbar k_2}{m}\left|C\right|^2 = J_{trans}$$

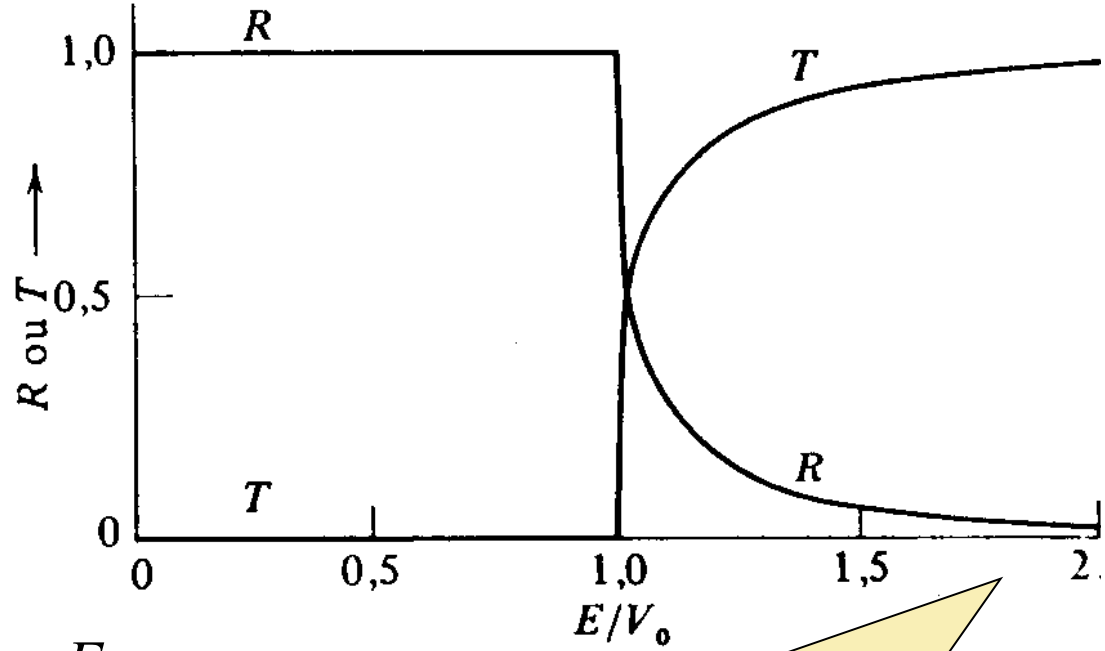
O coeficiente de reflexão pode ser calculado:

$$\left.\begin{aligned} J_{inc} &= \frac{\hbar k_1}{m}\left|A\right|^2 \\ J_{refl} &= \frac{\hbar k_1}{m}\left|B\right|^2 \end{aligned}\right\} \Rightarrow R = \left|\frac{J_{refl}}{J_{inc}}\right| = \frac{\left|B\right|^2}{\left|A\right|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

E o coeficiente de transmissão:

$$\left.\begin{aligned} J_{inc} &= \frac{\hbar k_1}{m}\left|A\right|^2 \\ J_{trans} &= \frac{\hbar k_2}{m}\left|C\right|^2 \end{aligned}\right\} \Rightarrow T = \left|\frac{J_{trans}}{J_{inc}}\right| = \frac{k_2}{k_1}\frac{\left|C\right|^2}{\left|A\right|^2} = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Como $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$ e $T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$ temos que $R + T = 1$



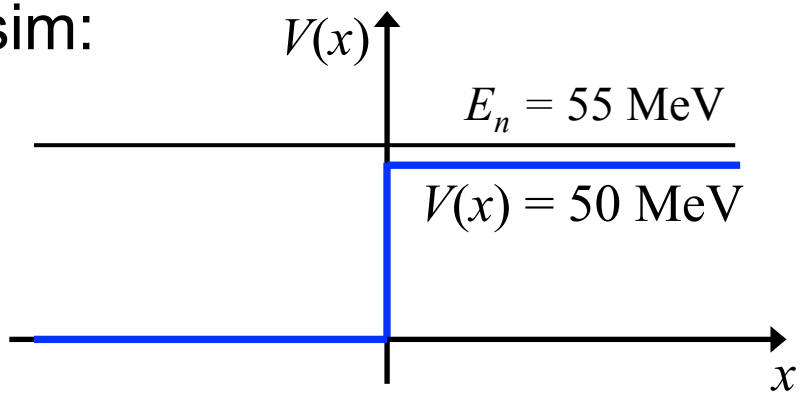
$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2, \text{se } \frac{E}{V_0} > 1$$

Fazer Ex. 6-3, pág. 257 (Eisberg)

R e T são simétricos pela troca $k_1 \leftrightarrow k_2$. Portanto, em termos de coeficientes de reflexão e transmissão, tanto faz se a partícula sobe ou desce o degrau.

Ex. 6-3: nêutron incidindo sobre um núcleo. E_n = 5 MeV e a situação pode ser aproximada supondo o nêutron incidindo sobre um degrau de potencial com 50 MeV de profundidade, que representaria a profundidade do potencial nuclear.

Ao chegar à superfície nuclear, o nêutron pode ser refletido, por causa da descontinuidade no potencial. Por cauda da simetria pela troca $k_1 \leftrightarrow k_2$, podemos resolver o caso, conforme a figura, em que o nêutron vem da direita. Assim:



$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2$$

com V_0 = 50 MeV e E_n = 55 MeV.

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 50/55}}{1 + \sqrt{1 - 50/55}} \right)^2 \approx 0,29$$