

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS E EXATAS E TECNOLÓGICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL
EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Cássio Almeida Lima

Modelagem Computacional do Efeito Túnel Angular

Ilhéus-BA

2014

CÁSSIO ALMEIDA LIMA

MODELAGEM COMPUTACIONAL DO EFEITO TÚNEL ANGULAR

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Estadual de Santa Cruz, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre. Área de Concentração: Modelagem Computacional. Linha de Pesquisa: Modelagem Matemática e Computacional Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. JORGE HENRIQUE DE OLIVEIRA SALES

Ilhéus-BA

2014

L732 Lima, Cássio Almeida
Modelagem computacional do efeito túnel angular /
Cássio Almeida Lima – Ilhéus, BA: UESC, 2014.
vii, 59 p.: il.

Orientador: Jorge Henrique de Oliveira Sales.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de
Santa Cruz. Programa de Pós-Graduação em Modelagem
Computacional em Ciência e Tecnologia.
Inclui bibliografia.

1. Tunelamento (Física).
 2. Teoria quântica.
 3. Modelos matemáticos.
 4. Computação - Matemática.
- I. Título.

CDD 530.12

CÁSSIO ALMEIDA LIMA

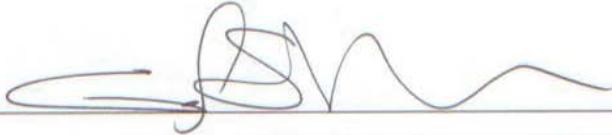
MODELAGEM COMPUTACIONAL DO EFEITO TÚNEL ANGULAR

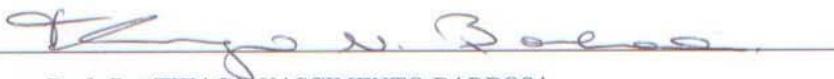
Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Estadual de Santa Cruz, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre. Área de Concentração: Modelagem Computacional. Linha de Pesquisa: Modelagem Matemática e Computacional Aplicada.

Aprovada em Setembro de 2014.

BANCA EXAMINADORA


Prof. Dr. JORGE HENRIQUE DE OLIVEIRA SALES - Orientador
UESC


Prof. Dr. GESIL SAMPAIO AMARANTE SEGUNDO
UESC


Prof. Dr. THIAGO NASCIMENTO BARBOSA
IFBA

Ilhéus-BA

2014

Ao meu orientador Prof. Dr. Jorge Henrique de Oliveira Sales; meu muito obrigado.

Agradecimentos

À minha família, por estar sempre comigo;

À minha amada Renata, pela paciência e suporte inabalável; te amo.

Ao meu orientador Prof. Dr. Jorge Henrique de Oliveira Sales, por todo o apoio e rara destreza acadêmica na condução do trabalho;

À agência financiadora CAPES, pelo suporte financeiro;

A todos os meus professores, em especial à professora Marylin Campos;

Ao Prof. Dr. Nelson Dinamarco, pelos conselhos e amizade;

Ao coordenador do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da UESC, Prof. Dr. Francisco Bruno, por sempre ter priorizado os interesses dos alunos;

Aos funcionários do PPGMC;

Ao Prof. Dr. Alejandro Javier Dimarco;

Ao meu guru intelectual, Prof. Dr. Anderson William Mol;

Ao NBCGIB por estar sempre de portas abertas;

Ao grande Prof. Dr. Paulo Ambrósio; por ter sido o meu tutor no mestrado;

Ao Dr. Elson Marcos por ter me ajudado a encontrar o equilíbrio emocional;

Aos meus colegas de mestrado, por toda a ajuda que sempre dispuseram e pela amizade construída;

A todos os meus amigos que, de várias maneiras, sempre me ajudaram a crescer e ter uma vida agradável fora da universidade;

À Prof. Dra. Luciana Cláudia de Paula Alonso, por ter me aturado durante tanto tempo em sua sala;

Ao Prof. Dr. Afonso Henriques, que sempre me alegrou com suas visitas ao meu ambiente de trabalho;

Ao colega Gislán Silveira, por todo o seu conhecimento em LATEX (e matemática) compartilhado;

Ao meu amigo Everton Costa Santos; minha referência;

Ao querido colega Pedro Girotto;

À querida Sara, funcionária do pavilhão Professor Júlio Cezar Mattos Cascardo, por ter alimentado meu vício em café;

Resumo

Nesta dissertação nós desenvolvemos um modelo computacional partindo da hipótese de que há probabilidade de tunelamento quântico de uma partícula em função do seu ângulo de incidência com a reta normal à superfície da barreira de potencial. Os resultados mostraram que o tunelamento angular, para o caso do elétron incidindo em uma barreira de potencial de 12 eV e espessura de 0,18 nm, é mais favorável do que o tunelamento usual ($\theta = 0^\circ$) para ângulos entre 0° e 25° e energia de 10 eV a 12 eV. A probabilidade de tunelamento angular não é igual a zero quando a energia do elétron E é igual à da barreira de potencial V , diferentemente do tunelamento usual. Mesmo para ângulos pequenos, há probabilidade de tunelamento angular quando $E = V$. A dissertação abriu várias vertentes de estudo, em especial o tempo de tunelamento, onde calculamos o tempo de permanência da partícula dentro da barreira de potencial. A probabilidade de tunelamento não apenas varia em função do ângulo de incidência da partícula, mas também em seu tempo de permanência dentro da barreira. Com isso podemos utilizar o conceito de tunelamento angular na microeletrônica para a fabricação de componentes eletrônicos mais rápidos. Como os circuitos eletrônicos digitais utilizam transistores para formar as portas lógicas, base do hardware a partir da qual todos os circuitos digitais são construídos, e um transistor pode ser visto como uma barreira de potencial, modificando o ângulo de incidência com o qual o fluxo de elétrons incide no transistor, teoricamente, o tempo de permanência dos elétrons dentro do transistor seria menor de acordo com nossos cálculos, o que resultaria em circuitos integrados mais rápidos.

Palavras Chaves: Modelagem Computacional, Mecânica Quântica; Tunelamento;

Abstract

In this work we have developed a computational model based on the assumption that there is likely to quantum tunneling of a particle depending on its angle of incidence with the normal line to the surface of the potential barrier. The results showed that the angular tunneling, for the case of electron striking in a potential barrier of 12 eV and a thickness of 0.18 nm, is more favorable than the usual tunneling ($\theta = 0^\circ$) for angles between 0° and 25° and energy from 10 eV to 12 eV. The probability of angular tunneling is not equal to zero when the electron energy E is equal to the potential barrier V , unlike the usual tunneling. Even for small angles, there are angular tunneling probability when $E = V$. The dissertation opened several strands of study, in particular the time of tunneling, where we calculate the residence time of the particle inside the potential barrier. The probability of tunneling not only varies with the angle of incidence of the particle, but also on your time spent inside the barrier. With this we can use the concept of angular tunneling in semiconductor manufacturing for faster electronic components. As digital electronic circuits using transistors to form logic gates, based hardware from which all digital circuits are built, and a transistor can be viewed as a potential barrier, altering the angle of incidence with which the flow focuses on electron transistor, theoretically, the residence time of electrons inside the transistor would be lower according to our calculations, resulting in faster integrated circuits.

Keywords: Computational Modeling, Quantum Mechanics, Tunneling;

Sumário

1	Introdução	1
2	A Equação de Schrödinger	4
2.1	A Equação Independente do Tempo	4
2.2	Interpretação Probabilística $\Psi(x, t)$	5
2.3	Normalização da Função de Onda	6
2.4	Valor Esperado	7
2.5	As Autofunções	11
2.6	A Partícula Livre	12
3	Barreira de Potencial	15
3.1	O Efeito Túnel	18
3.2	O Efeito Túnel do Elétron	21
4	Transmissão Angular	23
4.1	Cálculo das Correntes	24
4.1.1	Corrente Incidente	24
4.1.2	Corrente Refletida	25
4.1.3	Corrente Transmitida	26
4.1.4	Condições de Contorno	27
4.1.5	Analizando o Fator N	29
5	O Efeito Túnel Angular	30
6	O Efeito Túnel Angular do Elétron	32
6.1	Pontos Críticos	37
7	Conclusões e Trabalhos Futuros	46
Apêndice A - Estado Estacionário		48
Apêndice B - A Analogia Ótico-mecânica		50
Apêndice C - O Operador Momento		53

Apêndice D - Máximos e Mínimos de Funções de Várias Variáveis **55**

Referências Bibliográficas **57**

Listas de Figuras

2.5.1	Energia potencial $V(x)$ e energia total E de um sistema quântico	11
2.5.2	Comportamento da função de onda $\psi(x)$ para uma partícula sujeita a um potencial da Figura 2.5.1	12
3	Representação de uma barreira de potencial unidimensional	15
3.1	Tunelamento quântico	18
3.4	Esta imagem obtida com um microscópio eletrônico de tunelamento mostra átomos de sódio na superfície de um metal. (Fonte: IBM Corporation)	20
3.2.1	Probabilidade de tunelamento de um elétron	21
3.2.2	Relação entre a probabilidade de transmissão e reflexão	22
4.1	Barreira de potencial retangular	23
4.2	Tunelamento angular	24
6.1	Comparação entre a probabilidade de tunelamento angular e usual de um elétron com energia variando de 0 a 12 eV, e ângulo de incidência de 0°	33
6.2	Probabilidade de tunelamento quando a partícula incide com um ângulo de 90° em relação à superfície da barreira de potencial	33
6.3	Probabilidade de tunelamento em função do ângulo de incidência do elétron	34
6.4	Probabilidade de tunelamento em função do ângulo de incidência do elétron	34
6.5	Comparação entre o tunelamento angular e o tunelamento usual	36
6.6	Comparação entre o tunelamento angular e o tunelamento usual	36
6.7	Relação entre a probabilidade de reflexão e transmissão	37
6.8	Relação entre a probabilidade de reflexão e transmissão	37
6.9	Gráfico do determinante hessiano da função $T_{angular}$	38
6.10	Gráfico do determinante hessiano da função $T_{angular}$	39
6.11	Gráfico do determinante hessiano da função $T_{angular}$	39
A.1	Pontos de inversão	49
D.1	Ponto de máximo	55
D.2	Ponto de mínimo	56
D.3	Ponto de sela	57

Lista de Tabelas

6.1	Probabilidade de tunelamento em função do ângulo de incidência e energia	35
6.2	Valores do determinante hessiano para energia de 0 eV a 3 eV e ângulos de 0° a 90°	40
6.3	Valores do determinante hessiano para energia de 5 eV a 8 eV e ângulos de 0° a 90°	41
6.4	Valores do determinante hessiano para energia de 9 eV a 12 eV e ângulos de 0° a 90°	42
6.5	Pontos Críticos	44

Capítulo 1

Introdução

É frequentemente desejável descrever o comportamento de algum sistema ou fenômeno da vida real em termos matemáticos, quer sejam eles físicos, sociológicos ou mesmo econômicos. A descrição matemática de um sistema ou fenômeno, chamada de *modelo matemático*, é construída levando-se em consideração determinadas metas. Por exemplo, talvez queiramos predizer o tamanho futuro de uma população, como o número de trutas ou bagres vivendo em uma propriedade onde se criam peixes, ou datar fósseis por meio da análise do decaimento radioativo de uma substância que esteja no fóssil ou no estrato no qual foi descoberto.

A construção de um *modelo matemático* começa com a elaboração de um conjunto de hipóteses razoáveis ou pressuposições sobre o sistema que estamos tentando descrever. Essas hipóteses deverão incluir também quaisquer leis empíricas aplicáveis ao sistema. O *modelo matemático* pode ser uma equação diferencial, um sistema de equações não-lineares, uma equação integral e assim por diante.

Mesmo os modelos mais simples são complexos a ponto de tornar-se praticamente impossível a obtenção de soluções analíticas. Por solução analítica entende-se uma expressão que descreve a solução do problema. Uma técnica analítica pode nos levar a uma solução exata ou aproximada.

Nos casos mais complexos, a única saída é usar o computador para encontrar a solução do problema, traduzindo o *modelo matemático* em códigos computacionais. Essa tradução é conhecida como *modelagem computacional*, técnica que utiliza formulações matemáticas e conceitos da computação para simular soluções para problemas científicos. Discussões sobre modelagem e soluções computacionais podem ser encontradas em [1] e [2].

Quando o *modelo computacional* estiver finalizado, precisamos validá-lo. A fase de validação, do ponto de vista físico e matemático, é usada para verificar se o modelo, ao menos, representa fenômenos já conhecidos, para então partirmos para novas descobertas. Em outras palavras, queremos ver se os resultados relativos à parte matemática fazem sentido. Essas informações normalmente são visualizadas na forma de gráficos, a partir dos quais é possível fazer descobertas de cunho teórico ou prático.

Com o advento dos processadores de múltiplos núcleos (*multicore*) e da computação em GPU (Graphics Processing Unit) foi possível criar modelos mais sofisticados para simular uma gama maior de fenômenos [3]. Um típico processador possui vários núcleos de processamento, enquanto uma GPU pode

ter centenas ou até milhares de núcleos. Os modelos mais recentes são bem mais complexos e exigem um esforço computacional maior. Os engenheiros de simulação querem melhorar a qualidade do produto e reduzir o custo e o tempo de desenvolvimento. Isso frequentemente envolve métodos de simulação, como ferramentas de engenharia auxiliada por computador (CAE) para mecânica estrutural de elemento finito, dinâmica computacional de fluidos e eletromagnética. Como exemplos de *modelos computacionais* podemos citar:

- Identificação de placas ocultas em artérias: Ataques cardíacos são a maior causa de mortes no mundo todo. A Harvard Engineering, a Harvard Medical School e o Brigham & Women's Hospital se reuniram para usar GPUs com o objetivo de simular o fluxo sanguíneo e identificar placas arteriais ocultas sem o uso de procedimentos invasivos ou cirurgias.
- Análise do fluxo de tráfego aéreo: O National Airspace System (Sistema de Espaço Aéreo Nacional) gerencia a coordenação do fluxo de tráfego aéreo em âmbito nacional. Modelos computacionais ajudam a identificar novas maneiras de aliviar congestionamentos e manter o tráfego de aeronaves fluindo de forma eficiente. Utilizando o poder computacional das GPUs, uma equipe da NASA obteve grande ganho de desempenho, reduzindo o tempo de análise de dez minutos para três segundos.
- Visualização de moléculas: Uma simulação molecular denominada NAMD (dinâmica molecular em nanoescala) alcança um grande aumento de desempenho com o uso de GPUs.

O objetivo desta dissertação é desenvolver um *modelo computacional* partindo da hipótese de que há probabilidade de tunelamento de uma partícula em função do seu ângulo de incidência (ou seja, $\theta \neq 0^\circ$) com a reta normal à superfície da barreira de potencial. Os estudos relacionados a tunelamento normalmente consideram uma partícula movendo-se no eixo x (movimento unidimensional), na direção de um potencial constante e bidimensional, formando um ângulo de incidência $\theta = 0^\circ$ com a reta normal à superfície da barreira de potencial [4] e [5]. Entretanto, há estudos que levam em consideração potencial bidimensional e tridimensional dependente apenas da posição [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14].

O tunelamento é um fenômeno quântico onde uma partícula consegue penetrar e, na maioria dos casos, atravessar uma barreira de potencial. Segundo as leis da física clássica, se uma partícula possui energia inferior à altura da barreira de potencial, ela não pode atravessá-la. Entretanto, de acordo com a mecânica quântica, existe uma probabilidade diferente de zero de uma partícula atravessar uma barreira de potencial de altura finita, mesmo que esta altura seja superior à energia da partícula.

Os primeiros estudos sobre tunelamento remontam à década de 1930 [15, 16]. Desde então, as aplicações do tunelamento têm sido inúmeras. Podemos citar como exemplos o transporte de cargas elétricas em heteroestruturas [17], o transistor, os dispositivos semicondutores, o efeito Josephson [18] e o microscópio de tunelamento. Vários dispositivos da tecnologia moderna, principalmente da microeletrônica, têm sua operação baseada no fenômeno do tunelamento, como o diodo túnel e o SQUID (superconducting quantum interference device), que deram aos seus inventores o Prêmio Nobel em 1973, e o microscópio eletrônico de tunelamento, cujos inventores também foram laureados em 1986.

Há outros exemplos interessantes sobre tunelamento. Um deles, muito comum em nosso dia a dia, apesar de não ser reconhecido como tal, ocorre nas ligações elétricas com fios de alumínio. A forma usual como que os eletricistas juntam dois fios é torcendo-os em conjunto. No entanto, há uma camada de óxido de alumínio entre os dois fios, sendo este um ótimo material isolante. Mas como a camada é extremamente fina, os elétrons que se movem através do fio são capazes de ultrapassar a camada por tunelamento.

A presente dissertação está organizada da seguinte forma: o segundo capítulo contém a revisão bibliográfica da mecânica quântica ondulatória. No terceiro capítulo é feito um estudo do cálculo da corrente de tunelamento seguida da dedução da equação da probabilidade de *tunelamento* (ângulo de incidência da partícula $\theta = 0^\circ$ com a reta normal à superfície da barreira de potencial). No quarto e quinto capítulos, aplica-se a técnica utilizada no capítulo 3 para deduzir a equação da probabilidade de *tunelamento angular* (ângulo de incidência da partícula $\theta \neq 0^\circ$ com a reta normal à superfície da barreira de potencial), mas utilizando coordenadas polares. No sexto capítulo estudamos a probabilidade de tunelamento do elétron em função do seu ângulo de incidência. O capítulo sétimo é destinado à apresentação das conclusões e trabalhos futuros.

Capítulo 2

A Equação de Schrödinger

Neste capítulo, faremos uma revisão bibliográfica da equação desenvolvida por Schrödinger para a mecânica quântica, a qual descreve o comportamento de uma partícula não-relativística de massa m e energia E , em uma dada região do espaço.

A equação de Schrödinger desempenha um papel logicamente análogo à segunda lei de Newton: dadas condições iniciais apropriadas (tipicamente, $\Psi(x, 0)$), a equação de Schrödinger determina $\Psi(x, t)$ para qualquer instante de tempo futuro, assim como a lei de Newton determina $x(t)$ para qualquer instante de tempo futuro na mecânica clássica [19].

2.1 A Equação Independente do Tempo

A teoria quântica de Schrödinger é baseada numa equação diferencial, cuja solução determina a dependência espacial e temporal da função de onda que controla o movimento da partícula microscópica. Na versão unidimensional, a função de onda tem x e t como variáveis independentes.

Sabe-se que o potencial V que atua num sistema microscópico é uma função tanto de x como de t . Entretanto, na maioria das vezes, o potencial pode ser considerado como uma função que depende somente da variável x e, sem perda de generalidade, podemos escrever a equação de Schrödinger como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) \quad (2.1.1)$$

Como x e t são variáveis independentes, podemos usar o método da separação de variáveis (técnica utilizada para reduzir uma equação diferencial parcial em um conjunto de equações diferenciais ordinárias) onde a dependência em x é separada da dependência em t na função de onda $\Psi(x, t)$, escrevendo-a como um produto de duas funções de cada uma dessas variáveis, isto é,

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) \quad (2.1.2)$$

em que ψ é uma função de x apenas e φ é uma função somente de t .

Substituindo (2.1.2) na Eq. (2.1.1),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi(t)\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar\psi(x)\frac{d}{dt}\varphi(t) \quad (2.1.3)$$

e dividindo pelo produto $\psi(x)\varphi(t)$, obtém-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) = i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d}{dt} \varphi(t) \quad (2.1.4)$$

Como o lado esquerdo da expressão anterior depende só da posição, enquanto o lado direito depende apenas do tempo, a equação só pode ser satisfeita se ambos os membros forem iguais a uma constante de separação E com dimensão de energia que, a princípio, pode ser complexa, resultando o seguinte sistema de equações diferenciais

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} \varphi(t) = E\varphi(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \end{cases} \quad (2.1.5)$$

A primeira equação diferencial (2.1.5) no domínio do tempo não depende da dinâmica de interação e pode ser imediatamente integrada,

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (2.1.6)$$

A segunda é a equação de *Schrödinger independente do tempo* (2.1.5), visto que ela não depende da variável temporal, t . Já as soluções $\psi(x)$ são denominadas autofunções, enquanto $\Psi(x,t)$ continua sendo a solução completa da equação de Schrödinger.

Schrödinger utilizou a equação independente do tempo em problemas de contorno para determinar, com sucesso, os espectros de energia do átomo de hidrogênio [20] e do oscilador harmônico [20], sem estabelecer, entretanto, uma interpretação convincente das soluções para as funções de onda. Essa interpretação da função de onda, como uma quantidade auxiliar a partir da qual pode-se determinar as distribuições de probabilidade para a ocorrência dos valores das grandezas físicas associadas a uma partícula, só foi estabelecida por Max Born (ver seção 2.2), em 1926, após o próprio Schrödinger determinar uma equação de onda dependente do tempo [20], válida para a descrição de uma partícula em campos não conservativos, mas ainda no domínio não-relativístico. Conforme declarou em sua Nobel Lecture [21], Max Born inspirou-se em uma interpretação sugerida por Einstein, segundo a qual o quadrado das amplitudes das ondas luminosas poderia ser visto como uma densidade de probabilidade da ocorrência de fótons.

2.2 Interpretação Probabilística $\Psi(x,t)$

A interpretação da função de onda baseia-se no comportamento do quadrado de seu módulo, $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$, pois, derivando $|\Psi|^2$ em relação ao tempo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} &= \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi^* - \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi \right] \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

e levando em conta a relação

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* = \vec{\nabla} \cdot (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)$$

obtém-se

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

Denotando-se

$$|\Psi|^2 = \rho$$

e

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi) \quad (2.2.2)$$

pode-se escrever

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (2.2.3)$$

A Eq. (2.2.3) constitui uma equação de continuidade, ou *lei de conservação*. Ela expressa o fato de uma variação de densidade (por exemplo, de pontos) numa região localizada no ponto x , é compensada por uma variação líquida no fluxo (dos pontos) que atravessa a superfície que envolve a região.

Schrödinger interpretou $e|\Psi|^2$ - onde e é a carga do elétron - como uma densidade de carga. Apesar de essa interpretação poder ser aplicada em alguns casos especiais, a interpretação aceita para a função de onda Ψ deve-se a Max Born. Born interpretou, assim, o quadrado do módulo da função de onda, $|\Psi|^2 = \rho$, como uma *densidade de probabilidade de presença*, representando a distribuição de probabilidade das posições ocupadas por uma partícula ao longo de seu movimento por uma dada região do espaço, e $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi)$ como uma *densidade de corrente de probabilidade*.

Nesse sentido, apesar de não haver uma denominação equivalente na teoria de probabilidades, a função de onda Ψ associada a uma partícula é chamada também de *amplitude de probabilidade de presença*.

É importante ressaltar que a amplitude de probabilidade associada a uma partícula não deve ser identificada como uma propriedade ou característica intrínseca da partícula, mas sim como uma medida da distribuição de probabilidades de ocorrências de eventos associados a ela, que depende da interação com a sua vizinhança.

2.3 Normalização da Função de Onda

De acordo com a interpretação de Born, para todo o espaço deve valer a chamada condição de normalização para a função de onda,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dt = 1 \quad (2.3.1)$$

A condição de normalização simplesmente expressa o fato de que a partícula deve ser encontrada em algum local do espaço. Sem isso, a interpretação probabilística não teria sentido. Para uma interpretação consistente, além da conservação local de probabilidade, é necessário que haja também a conservação global, expressa por

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0 \quad (2.3.2)$$

ou seja, a normalização da função não deve depender do tempo.

De acordo com a equação de continuidade da probabilidade, (Eq. 2.2.3), pode-se escrever

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (2.3.3)$$

e pela regra do produto,

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \quad (2.3.4)$$

Agora a equação de Schrödinger diz que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi \quad (2.3.5)$$

e também tomando o complexo conjugado da Eq. (2.3.4)

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \quad (2.3.6)$$

portanto,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

A integral na Eq. (2.3.3) pode agora ser calculada explicitamente:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} \quad (2.3.8)$$

Porém $\Psi(x, t)$ deve ir a zero quando x vai a (\pm) infinito. Caso contrário, a função de onda não seria normalizável. Segue que

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0 \quad (2.3.9)$$

e, portanto, que a integral é constante (independente do tempo); se Ψ é normalizada em $t = 0$, ela permanece normalizada em qualquer instante futuro.

2.4 Valor Esperado

De acordo com a interpretação de Born, a função de onda contém informações completas a respeito do movimento da partícula associada, uma vez que ela especifica a densidade de probabilidade para essa partícula. Assim sendo, é possível obter, por meio da função de onda, uma vasta gama de informações relativas à partícula, como: posição, momento, energia, dentre outras grandezas que caracterizam o seu movimento.

Do ponto de vista da teoria clássica, a posição $x(t)$ de uma partícula, num instante de tempo t , é uma grandeza física primitiva a partir da qual é possível determinar as grandeszas físicas derivadas momento, força e energia.

O momento linear $p(t)$ pode ser determinado a partir da posição $x(t)$ como

$$p(t) = m \frac{d}{dt} x(t)$$

Se a partícula é submetida a um potencial $V(x, t)$, a força $F(t)$ pode ser determinada a partir da segunda lei de Newton como

$$F(t) = \frac{d}{dt} p(t) = -\frac{\partial}{\partial x} V(x, t) \quad (2.4.1)$$

Como na teoria quântica a posição $x(t)$ de uma partícula está vinculada a uma densidade de probabilidade $|\Psi(x, t)|^2$, então o mesmo deve ocorrer com todas as grandezas físicas a ela associada. Em outras palavras, grandezas físicas tais como momento $p(t)$, força $F(t)$ e energia E , devem ter também aspectos probabilísticos.

É importante mencionar que os aspectos probabilísticos da posição x e momento p , bem como, energia E e tempo t da partícula, já tinham sido previstos pelo *princípio da incerteza de Heisenberg*.

Um conjunto de experimentos realizados para mediar a posição x da partícula, resultaria numa variedade de valores possíveis. A média e as flutuações de um número suficientemente grande de tais medidas é uma operação lógica para especificar, respectivamente, o valor esperado e a incerteza desse observável físico macroscópico.

Do mesmo modo, um observável físico microscópico pode ser determinado em termos de um valor esperado e uma incerteza associada. Nesse caso, tais componentes estatísticos devem depender da função de onda $\Psi(x, t)$ do sistema quântico em particular.

A definição do valor esperado, ou valor médio, pode ser obtida do método estatístico comumente utilizado no procedimento experimental. Se uma grandeza G é medida N vezes, onde um valor G_i ocorre n_i vezes, o valor esperado dessa grandeza é

$$\langle G \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N n_i G_i}{N} = \frac{\sum_{i=1}^N G_i n_i}{\sum_{i=1}^N n_i} \quad (2.4.2)$$

Do ponto de vista da teoria quântica, supõe-se que a grandeza G seja função da posição x da partícula microscópica. Nesse caso, o valor $G(x)$ ocorre com a mesma probabilidade $dP = |\Psi(x, t)|^2 dx$ de se encontrar a partícula entre x e $x + dx$. Assim, o valor esperado de $G(x)$ será calculado como na Eq. (2.4.2), simplesmente trocando n_i por dP e somatórios por integrais, isto é,

$$\langle G(x) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} G(x) dP}{\int_{-\infty}^{+\infty} dP} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} G(x) |\Psi(x, t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx}$$

ou

$$\langle G(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x) |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (2.4.3)$$

pois

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (2.4.4)$$

Uma forma adequada de escrever a Eq. (2.4.3) é

$$\langle G \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) G(x) \Psi(x, t) dx \quad (2.4.5)$$

Os termos no integrando são escritos com a inserção de $G(x)$ entre $\Psi^*(x, t)$ e $\Psi(x, t)$ com a finalidade de que o cálculo do valor esperado tenha sentido para todas as grandezas físicas com notação restrita à mecânica quântica. Isso ficará claro na sequência para os casos do operador momento p e energia E .

Ainda da analogia com a teoria clássica, é possível fazer várias medições da grandeza G e observar as flutuações em relação ao valor esperado $\langle G \rangle$ por meio do conceito de desvio padrão, ou incerteza ΔG , definido por

$$\Delta G = \sqrt{\langle (G - \langle G \rangle)^2 \rangle} \quad (2.4.6)$$

que também pode ser escrita numa forma apropriada observando que

$$\Delta G^2 = \langle (G - \langle G \rangle)^2 \rangle = \langle G^2 - 2G \langle G \rangle + \langle G \rangle^2 \rangle = \langle G^2 \rangle - 2 \langle G \rangle \langle G \rangle + \langle G \rangle^2$$

ou

$$\Delta G^2 = \langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2 \quad (2.4.7)$$

onde o valor esperado de G^2 é calculado como

$$\langle G^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) G^2 \Psi(x, t) dx \quad (2.4.8)$$

Neste formalismo, o valor esperado da posição x da partícula microscópica

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \quad (2.4.9)$$

tem um significado especial para a teoria quântica de Schrödinger. Assim como $x(t)$ é a grandeza fundamental na mecânica clássica, $\langle x(t) \rangle$ faz o mesmo papel na mecânica quântica. Do mesmo modo, pode-se calcular o valor esperado do momento p da partícula microscópica como

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) p \Psi(x, t) dx$$

Como no formalismo da teoria quântica de Schrödinger a grandeza física p é representada pelo operador diferencial $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, então

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx \quad (2.4.10)$$

Analogamente, para o caso da energia E , tem-se

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) dx \quad (2.4.11)$$

pois essa grandeza física é representada pelo operador diferencial $i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$ (Apêndice C).

No caso de uma partícula livre ($i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi$), a Eq. (2.4.11) torna-se

$$\langle E \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right] dx \quad (2.4.12)$$

As Eqs. (2.4.10) e (2.4.12), mostram o motivo pelo qual adotou-se a ordem dos termos que aparecem no integrando da Eq. (2.4.5). De fato, essa deve ser a única ordem possível para o operador

momento p , pois

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x, t) \Psi(x, t)] dx = \\ &= \frac{\hbar}{i} [\Psi^*(x, t) \Psi(x, t)]_{-\infty}^{+\infty} \equiv 0\end{aligned}$$

e

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} dx$$

não tem nenhum sentido.

Obtém-se, naturalmente, a mesma conclusão para o valor esperado da energia a partir da Eq. (2.4.12). Na sequência, propõe-se avaliar o comportamento do valor esperado das energias para o caso particular dos estados estacionários (Apêndice A)

$$\Psi(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (2.4.13)$$

cuja derivada parcial no tempo fornece

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n &= i\hbar \psi_n(x) \left(-i \frac{E_n}{\hbar} \right) e^{-iE_n t/\hbar} = \\ &= \psi_n(x) E_n e^{-iE_n t/\hbar} = E_n \Psi_n\end{aligned} \quad (2.4.14)$$

O valor esperado da energia $\langle E \rangle$, definido na Eq. (2.4.11), torna-se então

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n dx = E_n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx = E_n \quad (2.4.15)$$

pois Ψ_n é uma função de onda normalizável. Similarmente, aplicando a operação quadrática $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2$ na Eq. (2.4.13), obtém-se

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \Psi_n = E_n^2 \Psi_n$$

e então

$$\langle E^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \Psi_n dx = E_n^2 \quad (2.4.16)$$

As Eqs. (2.4.15) e (2.4.16) mostram que, para estados estacionários, a incerteza ΔE na determinação da energia E é

$$\Delta E = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = 0$$

De acordo com a equação $|\Psi_n(x, t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$, as diferentes localizações da partícula quântica com o estado estacionário $\Psi_n(x, t)$, independe do tempo. Assim, espera-se que as modificações do sistema, ou da distribuição de probabilidades, ocorra somente num intervalo de tempo $\Delta t \rightarrow \infty$. Atribui-se a este fato e ao princípio de incerteza de Heisenberg ($\Delta E \Delta t \sim \frac{\hbar}{2}$), a anulação da incerteza ($\Delta E \rightarrow 0$) na determinação da energia para estados estacionários.

Deve-se mencionar aqui a importante propriedade expressa na Eq. (2.4.14), como uma equação de autovalor. Uma equação de autovalor é uma equação da forma

$$\vartheta \Psi_n = \lambda_n \Psi_n$$

onde o operador ϑ determina um conjunto de autofunções Ψ_n , ou autovetores, fisicamente aceitáveis e autovalores λ_n correspondentes. Os autovetores Ψ_n formam um conjunto de soluções linearmente independentes da equação de Schrödinger e representam as configurações espaciais do sistema quântico. Por outro lado, os autovalores λ_n representam os valores possíveis de um observável físico associado ao movimento mecânico da partícula microscópica.

2.5 As Autofunções

Propõe-se aqui analisar o problema das soluções aceitáveis da equação de Schrödinger independente do tempo a partir de argumentos qualitativos, isto é, apenas analisando graficamente as curvaturas e inclinações das possíveis soluções [22]. Para começar nossa análise, vamos reescrever a equação de Schrödinger independente do tempo na seguinte forma:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi \quad (2.5.1)$$

As propriedades da autofunção $\psi(x)$ dependem da forma da energia potencial $V(x)$, já que ela determina a força que atua sobre a partícula cujo comportamento é descrito pela Eq. (2.5.1). Uma forma geral de energia potencial $V(x)$ é mostrada na Figura 2.5.1.

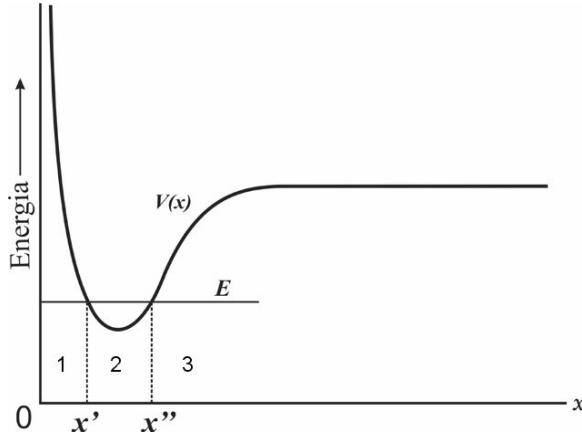


Figura 2.5.1: Energia potencial $V(x)$ e energia total E de um sistema quântico.

O gráfico inclui também um valor escolhido para a energia total E que passa ser assumida como um autovalor na equação de Schrödinger. Nota-se que a energia escolhida satisfaz a condição

$$E = V(x), \text{ para } x = x' \text{ e } x = x'' \quad (2.5.2)$$

Inicia-se a análise com uma observação clássica sobre a energia cinética da partícula,

$$K = E - V(x) = \frac{1}{2}mv^2 \rightarrow v^2 = \frac{2}{m} [E - V(x)] \quad (2.5.3)$$

Valores reais da velocidade v é possível, somente, para valores de x que satisfazem a condição $E \geq V(x)$. As regiões $x < x'$ e $x > x''$, onde $E < V(x)$, são conhecidas como *regiões classicamente proibidas*. Esta limitação não se estende a uma partícula quântica. Entretanto, os pontos x' e x'' , denominados de pontos de transição clássica, ajudam a determinar o comportamento geral das autofunções quânticas.

A Eq. (2.5.1) pode ser escrita como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\alpha^2\psi \quad (2.5.4)$$

onde

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \quad (2.5.5)$$

Esta equação mostra que a forma da função de onda $\psi(x)$ depende do sinal de α^2 . Sabe-se que a condição $\frac{d}{dx}\psi(x_0) = 0$ define x_0 como um ponto de máximo, ou ponto de mínimo, para a função $\psi(x)$ quando $x = x_0$, tal que: se $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x_0) > 0$, x_0 define um ponto de mínimo; se $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x_0) < 0$, x_0 define um ponto de máximo. A Figura 2.5.1 mostra que na 1^a e 3^a regiões, $\alpha^2 < 0$, pois $E < V(x)$. Por outro lado, na 2^a região, $\alpha^2 > 0$, pois $E > V(x)$. Vê-se então, da Eq. (2.5.4), que os sinais de ψ e $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ serão os mesmos na 1^a e 3^a regiões, e serão contrários na 2^a região. Isso significa que na 1^a e 3^a regiões a curva ψ contra x terá concavidade para cima se $\psi > 0$ (ponto de mínimo), e terá concavidade para baixo $\psi < 0$ (ponto de máximo). Ao contrário, na 2^a região, a curva terá concavidade para baixo se $\psi > 0$ e para cima se $\psi < 0$. Todas as possibilidades estão mostradas na Figura 2.5.2.

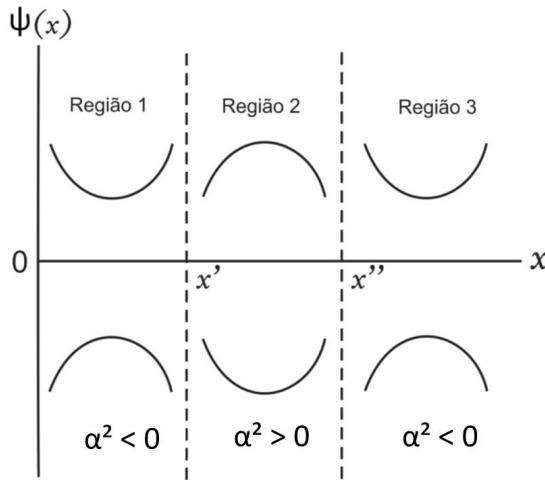


Figura 2.5.2: Comportamento da função de onda $\psi(x)$ para uma partícula sujeita a um potencial da Figura 2.5.1

Essa discussão mostra que seria possível utilizar a equação de Schrödinger independente do tempo, com os valores de $V(x)$ e E escolhidos, para determinar o comportamento de ψ como função da posição de x da partícula.

As considerações acima são asseguradas em função das condições impostas a $\psi(x)$ e sua derivada $\frac{d\psi(x)}{dx}$: finitas, unívocas e contínuas. Tais condições são essenciais para compreender o efeito de tunelamento.

2.6 A Partícula Livre

Para uma partícula livre ($V = 0$), de massa m e energia $E > 0$, que se desloca em uma direção x , as autofunções $\psi_E(x)$ de seu hamiltoniano H são dadas por

$$\psi_E^+(x) \sim e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar}$$

e

$$\psi_E^-(x) \sim e^{-i\sqrt{2mE}x/\hbar}$$

onde ψ_E^+ corresponde aos autoestados nos quais a partícula se desloca no sentido $+x$, com momento $p = \sqrt{2mE}$, e ψ_E^- corresponde àqueles nos quais ela se desloca no sentido $-x$, com $p = -\sqrt{2mE}$.

Essas funções satisfazem as equações de autovalores

$$\begin{aligned} H(e^{\pm i\sqrt{2mE}x/\hbar}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (e^{\pm i\sqrt{2mE}x/\hbar}) = \\ &= E(e^{\pm i\sqrt{2mE}x/\hbar}) \end{aligned}$$

Os autovalores associados ao operador hamiltoniano de uma partícula livre são, portanto, duplamente degenerados. A evolução da autofunção $\psi_E^+(x)$ da partícula livre é dada por

$$\Psi(x, t) = \psi_E^+(x)e^{-(E/\hbar)t} = Ae^{i(\sqrt{2mE}x-Et)/\hbar}$$

onde A é uma constante de normalização. Essa é a expressão de uma onda plana que se desloca no sentido $+x$, com momento $p = \sqrt{2mE}$.

A densidade de probabilidade de presença associada à autofunção da partícula livre é uniforme em todo o espaço e, portanto, a probabilidade de presença é a mesma em qualquer região do espaço. Assim, as autofunções da partícula livre não podem ser normalizadas no modo usual, pois não podem satisfazer a condição de que a função de onda e suas primeiras derivadas se anulem nos extremos do intervalo $(-\infty, \infty)$. Portanto, não podem representar estados físicos da partícula. No entanto, a superposição linear dessas autofunções pode resultar em pacotes de extensões finitas que praticamente se anulam a grandes distâncias da partícula, reforçando a hipótese de L. de Broglie: à partícula livre deve-se associar um pacote de ondas constituído de autofunções de seu hamiltoniano, que são do tipo ondas planas monocromáticas e não possuem energia e momento univocamente definidos.

Para contornar o problema da normalização de funções de onda do tipo plana, pode-se, ainda, normalizá-las em um intervalo finito de comprimento L e, ao final do processo que estiver sendo estudado, tomar o limite $L \rightarrow \infty$.

Assim, do mesmo modo que são utilizadas ondas planas em muitos problemas ópticos, em experimentos que envolvem a preparação de um feixe de partículas de mesma espécie e praticamente a mesma energia, como aqueles utilizados nos experimentos de difração de elétrons e nêutrons, podem-se utilizar as autofunções do tipo de ondas planas para representar o estado de qualquer partícula do feixe.

Essa representação também é extremamente útil no estudo de colisões e espalhamentos de partículas em Física de Altas Energias, por meio dos quais são investigados as estruturas das partículas e suas interações fundamentais. Nesses casos, o fluxo de probabilidade, associado a cada partícula ou ao feixe de partículas que se desloque no sentido $+x$, é dado por

$$J = \frac{p}{m} |A|^2$$

e no sentido $-x$, por

$$J = -\frac{p}{m} |A|^2$$

onde $A = 1\sqrt{L}$. No caso tridimensional, $A = 1\sqrt{V}$, onde V é o volume de um cubo de aresta L .

Capítulo 3

Barreira de Potencial

Suponhamos um potencial unidimensional retangular do tipo:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \rightarrow \text{Região 1} \\ V > 0 & (0 < x < L) \rightarrow \text{Região 2} \\ 0 & (x > L) \rightarrow \text{Região 3} \end{cases}$$

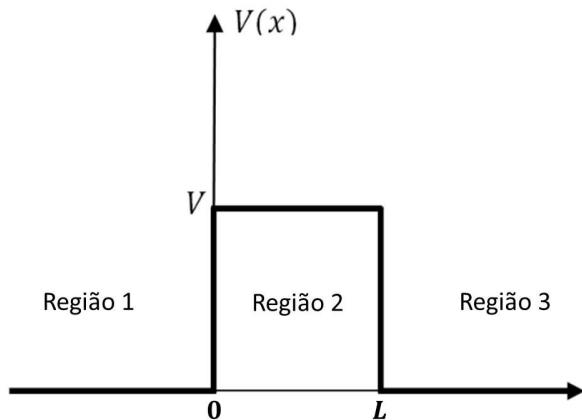


Figura 3: Representação de uma barreira de potencial unidimensional.

Nas regiões onde o potencial é nulo, a energia da partícula não é univocamente definida e seu estado deve ser representado por um pacote de ondas. Assim, se a partícula de massa m aproxima-se da barreira pela *Região 1*, o estado incidente deve ser representado pelo pacote de ondas

$$\Psi_1^{inc}(x, t) = \int_0^{\infty} c_1^{inc}(E) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dE$$

e o estado associado à reflexão da partícula pela barreira por

$$\Psi_1^{refl}(x, t) = \int_0^{\infty} c_1^{refl}(E) e^{-\frac{i}{\hbar}(px + Et)} dE$$

e o estado associado à transmissão na *Região 3* por um pacote que se propaga no sentido $+x$, pois a partícula não pode ser refletida em qualquer posição $x > L$,

$$\Psi_3^{trans}(x, t) = \int_0^\infty c_3^{trans}(E) e^{\frac{i}{\hbar}(px + Et)} dE$$

onde $E(p) = p^2/(2m)$, p e m , são o momento linear e a massa da partícula, respectivamente.

Se o problema serve de modelo para espalhamento de um feixe colimado e quase monoenergético de partículas, as dispersões desses pacotes serão bem pequenas, e os coeficientes de reflexão e transmissão podem ser determinados a partir das componentes de propagação planas monocromáticas, autofunções do hamiltoniano da partícula livre, com energia E ,

$$\psi_1^{inc}(x) = A e^{ik_1 x} \quad (3.1)$$

$$\psi_1^{refl}(x) = B e^{-ik_1 x} \quad (3.2)$$

$$\psi_3^{trans}(x) = F e^{ik_3 x} \quad (3.3)$$

sendo que os subíndices 1 e 3 das autofunções representam as regiões da Figura 3, e k é o número de ondas dado por $p = \hbar k$.

Se a energia da partícula incidente for maior que a altura da barreira, $E > V$, a autofunção na *Região 2* é dada por

$$\psi_2(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad (3.4)$$

onde C e D são constantes de integração, e $k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V)}$.

As densidades de corrente de probabilidades para as autofunções incidente, refletida e transmitida (calculadas a partir da Eq. (2.2.2)) são dadas, respectivamente, por

$$J_1^{inc} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi_1^{inc} \nabla \psi_1^{*inc} - \psi_1^{*inc} \nabla \psi_1^{inc})$$

$$J_1^{refl} = \frac{i\hbar}{2m} (-ik_1 |A|^2 - ik_1 |B|^2)$$

$$J_1^{trans} = \frac{\hbar k_1 |A|^2}{m}$$

$$J_1^{refl} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi_1^{refl} \nabla \psi_1^{*refl} - \psi_1^{*refl} \nabla \psi_1^{refl})$$

$$J_1^{refl} = \frac{i\hbar}{2m} (ik_1 |B|^2 + ik_1 |B|^2)$$

$$J_1^{refl} = \frac{-\hbar k_1 |B|^2}{m}$$

$$\begin{aligned}
J_3^{trans} &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi_3^{trans} \nabla \psi_3^{*trans} - \psi_3^{*trans} \nabla \psi_3^{trans}) \\
J_3^{trans} &= \frac{i\hbar}{2m} (-ik_3 |F|^2 - ik_3 |F|^2) \\
J_3^{trans} &= \frac{\hbar k_1 |F|^2}{m}
\end{aligned}$$

onde A , B e E são constantes de integração, $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ para a partícula livre, e $k_3 = k_1$ (Apêndice B), pois os índices de refração $n_1 = n_3 < n_2 = n$

Uma vez que na *Região 1* a autofunção é dada por

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \psi_1^{inc} + \psi_1^{refl} = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \rightarrow J_1^{total} = J_1^{inc} + J_1^{refl} = \\
&= \frac{\hbar k_1}{m} (|A|^2 - |B|^2)
\end{aligned}$$

a conservação da probabilidade implica que

$$J_1^{total} = J_3^{trans} = \frac{\hbar k_1}{m} |F|^2 \rightarrow |A|^2 = |B|^2 + |F|^2$$

Desse modo, as probabilidades de reflexão (R) e transmissão (T)

$$R = \left| \frac{J_1^{refl}}{J_1^{inc}} \right|^2 = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (3.5)$$

$$T = \left| \frac{J_3^{trans}}{J_1^{inc}} \right|^2 = \left| \frac{F}{A} \right|^2 \quad (3.6)$$

satisfazem a relação

$$R + T = \left| \frac{B}{A} \right|^2 + \left| \frac{F}{A} \right|^2 = 1$$

e, portanto, as probabilidades de transmissão (T) e reflexão (R) são conservadas e normalizadas.

A probabilidade de transmissão da partícula pela barreira [19] é dada por:

$$T = \left| \frac{4n}{(n+1)^2 \left[1 - \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 e^{2ink_1 L} \right]} e^{i(n-1)k_1 L} \right|^2 \quad (3.7)$$

onde $n = \frac{k_2}{k_1}$.

Na próxima seção deduziremos a equação da probabilidade de tunelamento de uma partícula de massa m e energia ($0 < E < V$) que incide sobre a face esquerda de uma barreira de potencial que se estende de $x = 0$ até $x = L$, com um ângulo de incidência $\theta = 0^\circ$ em relação à reta normal a superfície da barreira de potencial retangular.

3.1 O Efeito Túnel

A mecânica quântica possibilita a explicação de um fenômeno muito interessante e peculiar em conexão com barreiras de energia de potencial. Uma partícula que encontra uma barreira não retorna necessariamente; existe alguma probabilidade de que ela passe para o outro lado da barreira, mesmo que, de acordo com a mecânica clássica, ela não possua energia cinética suficiente para ultrapassar a barreira. A penetração de uma barreira é chamada de *tunelamento*. O tunelamento tem implicações muito importantes sobre as propriedades eletrônicas de materiais, não somente nanomateriais, sobre as velocidades de reações de transferências de elétrons, sobre as propriedades de ácidos e bases, e sobre as técnicas atualmente usadas para estudar superfícies.

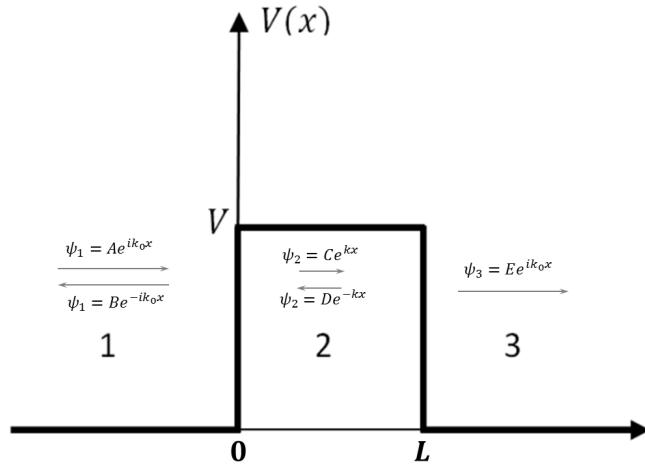


Figura 3.1: Tunelamento quântico

A Figura 3.1 ilustra de forma simplificada o fenômeno de tunelamento. Uma onda de amplitude A , representando a partícula vindo da esquerda *Região 1*, incide sobre a barreira. Outra onda, de amplitude B , representa a partícula sendo refletida de volta. A função de onda penetra a barreira, e devido à largura finita desta atinge a extremidade à direita; surge então uma onda de amplitude F que representa a partícula indo para a direita após tunelar pela barreira *Região 3*. Na verdade a onda Ce^{ik_2x} também é refletida na saída da barreira, dando origem a uma onda De^{-ik_2x} retornando dentro da barreira.

Se a energia da partícula incidente for positiva, mas menor que a altura da barreira, $0 < E < V$, a solução na *Região 2* é dada por

$$\psi_2 = Ce^{-kx} + De^{kx} \quad (3.1.1)$$

onde C e D são constantes de integração, e $k_2 = ik$ onde

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V - E)} \quad (3.1.2)$$

Nesse caso, a autofunção associada à partícula pode ser expressa por

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & (x < 0) \\ Ce^{-kx} + De^{kx} & (0 < x < L) \\ Fe^{ik_3x} & (x > L) \end{cases} \quad (3.1.3)$$

Como não há nenhuma fonte de partículas na *Região 3*, não deve existir qualquer onda que se propague nesta região ($x > L$), da direita para a esquerda, portanto temos apenas Fe^{ik_3x} . As regiões 1 e 3 possuem o mesmo índice de refração relativo, o que implica, $k_1 = k_3$.

Usando as definições de continuidade com as condições de contorno em $x = 0$ e $x = L$

$$\begin{cases} \psi_1^{inc}(0) = \psi_2(0) & \frac{d\psi_1^{inc}(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx} \\ \psi_2^{inc}(L) = \psi_3^{trans}(L) & \frac{d\psi_2^{inc}(L)}{dx} = \frac{d\psi_3^{trans}(L)}{dx} \end{cases} \quad (3.1.4)$$

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ ik_1(A - B) = k(-C + D) \end{cases} \rightarrow 2A = C + D + \frac{k}{ik_1}(D - C)$$

$$2ik_1A = (k + ik_1)D - (k - ik_1)C$$

e

$$\begin{cases} Ce^{-kL} + De^{kL} = Fe^{ik_1L} \\ k(-Ce^{-kL} + De^{kL}) = ik_1Fe^{ik_1L} \end{cases} \rightarrow F = \frac{2ke^{-kL-ik_1L}}{(k - ik_1)}C$$

Considerando que a barreira é suficiente larga, tal que $kL \gg 1$, a penetração na *Região 2* é fortemente atenuada, de modo que $|D| \ll |C|$, e

$$2ik_1A \asymp -(k - ik_1)C$$

$$C = \frac{2ik_1A}{-(k - ik_1)}$$

assim, a probabilidade de transmissão é dada por

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 e^{2kL}}{(k - ik_1)^2} \frac{-4i^2 k_1^2}{(k - ik_1)^2} = \frac{16k^2 k_1^2 e^{-2kL}}{(k^2 + k_1^2)^2}$$

Sendo os termos $k^2 + k_1^2 = \frac{1}{\hbar^2} (2mV)$ e $k^2 \times k_1^2 = \frac{4m^2(V-E)E}{\hbar^4}$, temos

$$T = 16 \frac{E}{V} \left(1 - \frac{E}{V} \right) e^{-2kL} \quad (3.1.5)$$

Classicamente, uma partícula com $E < V$ não poderia penetrar na *Região 2* (proibida): sofreria reflexão total. Quanticamente, a partícula pode tunelar através da barreira: a probabilidade de transmissão (Eq. 3.1.5) é pequena, mas $\neq 0$. A probabilidade de transmissão diminui exponencialmente com a espessura da barreira e com a massa da partícula. Assim, partículas de massa pequena são mais capazes de tunelar pelas barreiras do que as partículas pesadas. O tunelamento é muito importante para o elétron e mísions ($m_\mu \approx 207m_e$) e moderadamente importante para os prótons ($m_p \approx 1840m_e$); para partículas mais pesadas, ele é menos importante.

O tunelamento quântico se manifesta numa grande variedade de fenômenos. Uma das primeiras aplicações foi a teoria de G. Gamow da desintegração alfa, em que o núcleo de n° atômico X e n° de massa A emite uma partícula α (núcleo He). Outro exemplo, muito comum em nosso dia a dia, apesar de não ser reconhecido como tal, ocorre quando enrolamos dois fios de cobre ou fechamos os contatos de uma chave, a corrente passa de um condutor para o outro, apesar da existência de uma fina cama de óxido de cobre isolante que sempre se forma sobre a superfície de um condutor de cobre. Os elétrons tunelam através dessa fina camada de óxido. O chamado diodo túnel é um dispositivo semicondutor no qual os elétrons tunelam através de uma barreira de potencial. Podemos abrir ou fechar rapidamente (em um intervalo de poucos picossegundos) um circuito eletrônico acoplado ao diodo ao variar a altura da barreira. A junção Josephson de tunelamento consiste em dois supercondutores separados por uma camada de óxido com espessura de apenas alguns diâmetros atômicos (de 1 a 2 mm). Os pares de elétrons dos supercondutores podem tunelar através da barreira da camada de óxido, permitindo que essa junção seja usada em aplicações úteis, tais como medidas precisas de padrões de voltagem e medidas de campos magnéticos extremamente pequenos.

Um microscópio eletrônico de tunelamento com varredura usa o tunelamento de elétrons para obter imagens das superfícies de amostras revelando até átomos individuais. A ponta de uma agulha condutora extremamente fina é colocada próxima da superfície da amostra a uma distância aproximadamente igual a 1 nm. Quando a agulha está a um potencial positivo em relação à superfície, os elétrons podem tunelar através da barreira de energia potencial e atingir a ponta da agulha. A probabilidade do tunelamento depende da largura L da barreira (a distância entre a superfície e a ponta da agulha). Em um modo de operação, a agulha varre a superfície e ao mesmo tempo desloca-se perpendicularmente à superfície para manter permanentemente uma corrente de tunelamento. O movimento da agulha é registrado e, depois de diversas varreduras, a imagem da superfície pode ser reconstruída. É essencial controlar com elevada precisão o movimento da agulha, inclusive o isolamento das vibrações. A Figura 3.4 mostra uma imagem de átomos de sódio sobre a superfície de metal.

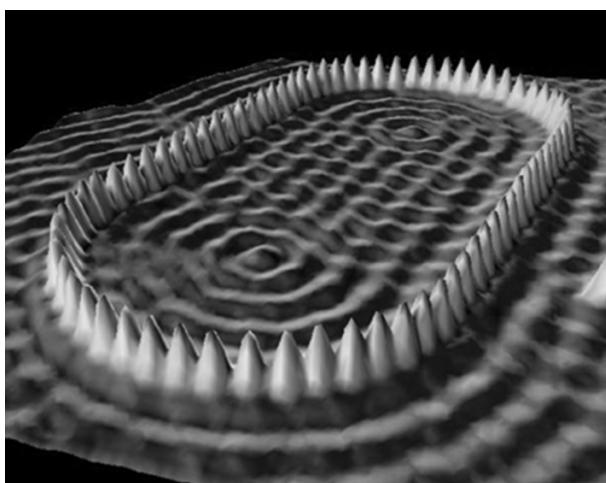


Figura 3.4: Esta imagem obtida com um microscópio eletrônico de tunelamento mostra átomos de sódio na superfície de um metal. (Fonte: IBM Corporation)

O tunelamento é muito importante na física nuclear. Uma reação de fusão pode ocorrer quando dois núcleos tunelam através da barreira de potencial formada pela repulsão elétrica mútua e se aproximam tanto que as forças nucleares de atração produzem a fusão dos dois núcleos. As reações de fusão ocorrem nos núcleos das estrelas, inclusive no Sol; se não existisse o tunelamento, o Sol não poderia brilhar. A emissão de partículas alfa de núcleos instáveis também envolve o tunelamento. Uma partícula alfa na superfície de um núcleo encontra uma barreira de potencial resultante da ação combinada da força de atração nuclear e da repulsão elétrica da parte restante do núcleo. A partícula alta tunela através dessa barreira. Visto que a probabilidade do tunelamento depende criticamente da altura e da largura da barreira, existe um grande intervalo de tempo para a vida média das partículas alfa emitidas por núcleos.

A partir de agora utilizaremos o termo "*tunelamento*" e "*tunelamento usual*" como sinônimos para diferenciar do termo "*tunelamento angular*" discutido no Capítulo 4.

3.2 O Efeito Túnel do Elétron

Usando a Eq. (3.1.5), obtemos a Figura 3.2.1, que mostra a probabilidade de tunelamento de um elétron com energia cinética variando de 0 a 12 eV, incidindo em uma barreira de potencial de 12 eV e espessura de 0,18 nm. O elétron incide com um ângulo $\theta = 0^\circ$ com a reta normal à superfície da barreira de potencial. Nos cálculos consideramos as seguintes constantes:

- $m = 9,11 \times 10^{-31} \text{kg}$ (massa do elétron)
- $\hbar = 1,055 \times 10^{-34} \text{J.s}$ (constante de Planck reduzida)

A unidade de energia em eV se cancela na Eq. (3.1.5), porém, é necessário usar a conversão de eV para $J = \text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2$ na exponencial para determinar o valor de k em m^{-1} , que se cancela com a unidade do comprimento da barreira.

Após os cálculos, plotamos a Figura 3.2.1, que mostra que quanto maior a energia do elétron, maior a probabilidade de tunelamento T . Porém, quando T atinge o seu valor máximo, a probabilidade de tunelamento começa a cair, chegando a zero quando a energia do elétron é igual à energia da barreira de potencial.

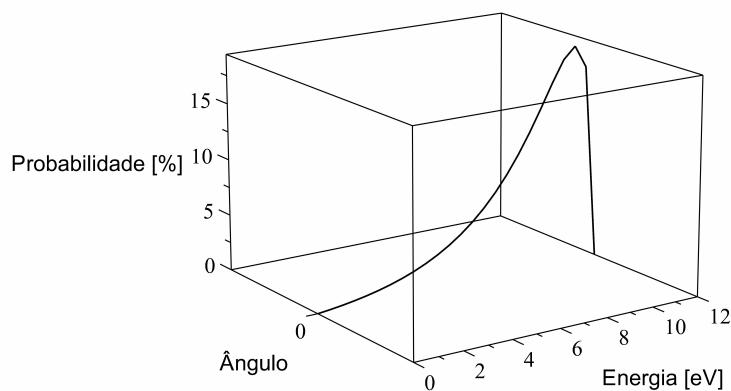


Figura 3.2.1: Probabilidade de tunelamento de um elétron.

Apenas observando o gráfico não podemos determinar o ponto de máximo da probabilidade de tunelamento do elétron. Para isso, derivando a Eq. (3.1.5) e igualando a zero

$$\frac{dT}{dE} = -\frac{4\sigma \left(\frac{E}{12} - 1\right)}{3} - \frac{E\sigma}{9} - \frac{6.63 \times 10^{-25} E\sigma \left(\frac{E}{12} - 1\right)}{\sqrt{3.49 \times 10^{-48} - 2.91 \times 10^{-49} E}} = 0 \quad (3.2.1)$$

onde

$$\sigma = e^{-3.41 \times 10^{24} \sqrt{3.49 \times 10^{-48} - 2.91 \times 10^{-49} E}}$$

Resolvendo a Eq. (3.2.1) encontramos os pontos extremos de T , que são $E_1 = -6.21$, $E_2 = 11.02$ e $E_3 = 12$. Como estamos interessados nos valores reais positivos, o ponto E_1 é desprezado, assim como E_3 , por se tratarem de ponto de mínimo. Aplicando o teste da derivada segunda, verificamos que $\frac{d^2T}{dE^2} < 0$ apenas para $E_2 = 11.02$. Portanto, o valor máximo de T em E_2 é 19.37%. Após o ponto de máximo (19.37%), a probabilidade de tunelamento tende a zero. Aqui vale salientar que a Eq. (3.1.5) é válida apenas para o caso $E \leq V$.

A Figura 3.2.2 mostra a relação entre a probabilidade de reflexão e transmissão do cenário descrito acima. A curva superior representa a reflexão (R), enquanto a curva inferior, a transmissão (T). A medida que a energia do elétron aumenta, sua probabilidade de reflexão diminui e sua probabilidade de transmissão (ou tunelamento) aumenta até o seu valor máximo, tendendo a zero a partir deste ponto. Observe que o gráfico representa a relação $R + T = 1$.

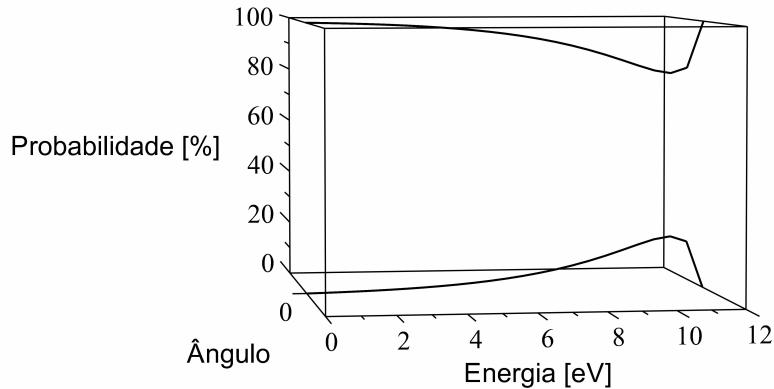


Figura 3.2.2: Relação entre a probabilidade de transmissão e reflexão.

No próximo capítulo analisaremos a probabilidade de transmissão usando coordenadas polares.

Capítulo 4

Transmissão Angular

Neste capítulo apresentamos um modelo de espalhamento de um feixe colimado e quase monoenergético de partículas [24]. As dispersões da onda serão desprezadas. Assim, uma partícula livre de massa m e energia E em movimento na *Região 1* que incide com um ângulo θ em relação a reta normal à superfície da barreira de potencial V , é descrito por uma autofunção $\psi_1(r)$, dada por:

$$\psi_1(r) = Ae^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} + Be^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \quad (4.1)$$

onde $\vec{k}_1 \cdot \vec{r} = k_1 r \cos \theta$, sendo o vetor \vec{r} qualquer posição no plano que separa as *Regiões 1* e *2*, e $\vec{k}_1 = \frac{\vec{p}_1}{\hbar}$. O primeiro termo da autofunção (4.1) refere-se a onda incidente, enquanto o segundo termo é o estado associado à reflexão da partícula pela barreira V (Figura 4.1).

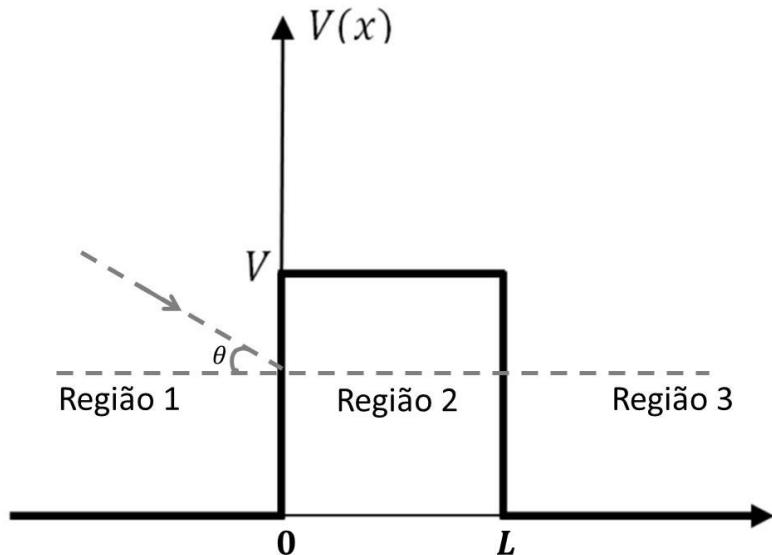


Figura 4.1: Barreira de potencial retangular

A autofunção ψ_2 que atravessa a barreira, *Região 2*, é dado por

$$\psi_2(r) = Ce^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} + De^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}}$$

onde

$$\vec{k}_2 \cdot \vec{r} = k_2 r \cos \theta_{ref}$$

e a autofunção transmitida, passando da *Região 2* para a *Região 3* é dada por

$$\psi_3(r) = E e^{i \vec{k}_3 \cdot \vec{r}}$$

onde

$$\vec{k}_3 \cdot \vec{r} = k_3 r \cos \theta_3$$

Assumindo que o índice de refração absoluto da *Região 1* é igual ao da *Região 3*

$$n_1 = n_3$$

pela equação da refração de Snell, temos

$$\theta_3 = \theta$$

Assim, para *Região 3* a autofunção $\psi_3(r)$ é função do ângulo θ de incidência. Pela analogia óptico-mecânico, é possível mostrar que $k_3 = k_1$ (Apêndice B).

4.1 Cálculo das Correntes

Nesta seção faremos um paralelo entre o tunelamento usual e o angular. No modelo angular, mostrado na Figura 4.2, temos uma onda incidente sob um ângulo θ na barreira de potencial, que sofre refração num ângulo θ_{ref} na *Região 2* e, posteriormente, é transmitida com um ângulo θ_3 para a *Região 3*. Pela lei de Snell, o ângulo de incidência $\theta = \theta_3$, pois o índice de refração $n_1 = n_3 < n_2$.

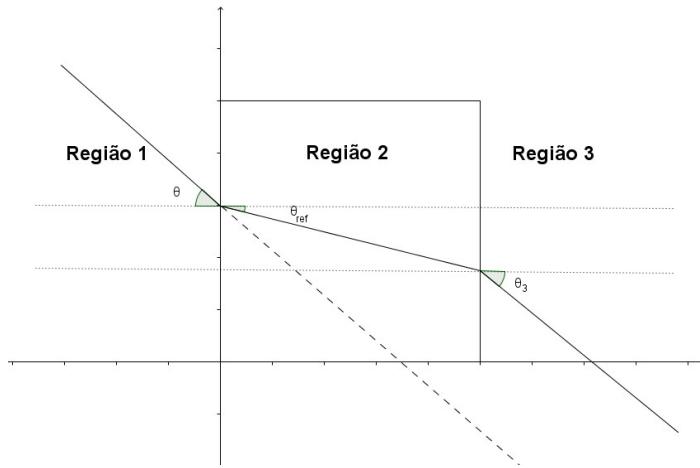


Figura 4.2: Tunelamento angular

4.1.1 Corrente Incidente

A autofunção ψ_1 depende do vetor posição $\vec{r} = (r, \theta)$, dessa forma o operador $\vec{\nabla}$ é dado por

$$\vec{\nabla} \equiv \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\theta} \quad (4.1.1)$$

A autofunção incidente na barreira de potencial sob um ângulo θ (ângulo de incidência), é dada por:

$$\psi_1^{inc}(r, \theta) = A e^{i \vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \quad (4.1.2)$$

onde $\vec{k}_1 \cdot \vec{r} = k_1 r \cos \theta$

Aplicando o operador $\vec{\nabla}$ da Eq. (4.1.1) na Eq. (2.2.2), obtemos:

$$\vec{\nabla} \psi_1^{inc} = i \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \psi_1^{inc} \quad (4.1.3)$$

e para o conjugado, temos:

$$\vec{\nabla} \psi_1^{*inc} = -i \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \psi_1^{*inc} \quad (4.1.4)$$

Usando as Eq. (4.1.3) e (4.1.4) na Eq. (2.2.2) resulta na corrente de probabilidade para a autofunção incidente

$$\vec{J}_1^{inc} = \frac{k_1 \hbar}{m} |A|^2 \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \quad (4.1.5)$$

cujo módulo

$$\left| \vec{J}_1^{inc} \right| = \left(\frac{k_1 \hbar}{m} \right) |A|^2 \left(\cos^2 \theta + \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.6)$$

4.1.2 Corrente Refletida

A corrente refletida é deduzida de forma análoga à corrente incidente

$$\psi_1^{refl}(r, \theta) = B e^{-i \vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \quad (4.1.7)$$

Aplicando o operador $\vec{\nabla}$ da Eq. (4.1.1) na Eq. (4.1.7), obtemos:

$$\vec{\nabla} \psi_1^{refl} = i \left(-\cos \theta \hat{r} + \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \psi_1^{refl} \quad (4.1.8)$$

e para o conjugado, temos:

$$\vec{\nabla} \psi_1^{*refl} = i \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \psi_1^{*refl} \quad (4.1.9)$$

Usando as Eq. (4.1.7) e (4.1.8) na Eq. (2.2.2) resulta na corrente de probabilidade para a autofunção refletida

$$\vec{J}_1^{refl} = -\frac{k_1 \hbar}{m} |B|^2 \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \quad (4.1.10)$$

cujo módulo

$$\left| \vec{J}_1^{refl} \right| = \left(\frac{k_1 \hbar}{m} \right) |B|^2 \left(\cos^2 \theta + \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.11)$$

4.1.3 Corrente Transmitida

A autofunção transmitida da barreira de potencial é dada por:

$$\psi_3^{trans}(r) = F e^{i \vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \quad (4.1.12)$$

onde $\vec{k}_1 \cdot \vec{r} = k_1 r \cos \theta$.

Aplicando o operador $\vec{\nabla}$ da Eq. (4.1.1) na Eq. (4.1.12), obtemos:

$$\vec{\nabla} \psi_3^{trans} = i \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \psi_3^{trans} \quad (4.1.13)$$

e para o conjugado, temos:

$$\vec{\nabla} \psi_3^{*trans} = -i \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \psi_3^{*trans} \quad (4.1.14)$$

Usando as Eq. (4.1.12) e (4.1.13) na Eq. (2.2.2) resulta na corrente de probabilidade para a autofunção transmitida

$$\vec{J}_3^{trans} = \frac{k_1 \hbar}{m} |F|^2 \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \quad (4.1.15)$$

cujo módulo

$$|\vec{J}_3^{trans}| = \left(\frac{k_1 \hbar}{m} \right) |F|^2 \left(\cos^2 \theta + \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.16)$$

Como há conservação de corrente, visto no Capítulo 2, podemos reafirmar que

$$\vec{J}_1^{total} = \vec{J}_1^{inc} + \vec{J}_1^{refl} = \frac{k_1 \hbar}{m} \left(|A|^2 - |B|^2 \right) \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) \quad (4.1.17)$$

$$\vec{J}_1^{total} = \vec{J}_3^{trans} \quad (4.1.18)$$

$$\frac{k_1 \hbar}{m} \left(|A|^2 - |B|^2 \right) \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right) = \frac{k_1 \hbar}{m} |E|^2 \left(\cos \theta \hat{r} - \frac{\operatorname{sen} \theta}{r} \hat{\theta} \right)$$

resultando em

$$|A|^2 = |B|^2 + |F|^2 \quad (4.1.19)$$

dividindo pela amplitude da autofunção incidente A ,

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 + \left| \frac{F}{A} \right|^2 = 1 \quad (4.1.20)$$

e pela definição (3.5) e (3.6), temos

$$R + T = 1 \quad (4.1.21)$$

Portanto, a probabilidade de transmissão angular agora é dada por:

$$T_{angular} = \frac{|\vec{J}_3^{trans}|}{|\vec{J}_1^{inc}|} = \left| \frac{F}{A} \right|^2 \quad (4.1.22)$$

e a probabilidade de reflexão

$$R_{angular} = \frac{\left| \vec{J}_1^{ref} \right|}{\left| \vec{J}_1^{inc} \right|} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (4.1.23)$$

Esse resultado nos leva a crer que a probabilidade de transmissão angular é igual a equação do tunelamento usual (Eq. (3.1.5)). Na próxima seção mostraremos que o uso das condições de contorno e continuidade influenciam no resultado do tunelamento angular.

4.1.4 Condições de Contorno

Usando os dados do modelo angular nas condições de contorno e continuidade já conhecidas, temos:

$$\begin{cases} \psi_1^{inc}(0) = \psi_2^{trans}(0) & \frac{\partial \psi_1^{inc}}{\partial r} = \frac{\partial \psi_2^{trans}}{\partial r} \\ \psi_2^{inc}(L) = \psi_3^{trans}(L) & \frac{\partial \psi_2^{inc}}{\partial r} = \frac{\partial \psi_3^{trans}}{\partial r} \end{cases} \quad (4.1.24)$$

Observamos que no lugar da derivada ordinária $\frac{d}{dx}$ da Eq. (3.1.4) temos uma derivada parcial em relação a posição r na Eq.(4.1.24).

Não vamos considerar a derivada parcial em relação ao ângulo θ à reta normal a barreira de potencial, pois a partícula incide sob um ângulo fixo. No caso do tunelamento $0 < r < L$, a autofunção de onda dentro da barreira é

$$\psi_2(r) = Ce^{\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} + De^{-\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} \quad (4.1.25)$$

Aplicando as condições de contorno em $r = 0$ e $r = L$ nós temos as seguintes condições de continuidade:

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial r} = ik_1 r \cos \theta \left(Ae^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} + Be^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \right) \quad (4.1.26)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial r} = ik_2 r \cos \theta_{ref} \left(Ce^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} - De^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} \right)$$

$$\frac{\partial \psi_3}{\partial r} = ik_1 r \cos \theta \left(Fe^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \right)$$

Para simplificar os cálculos, vamos introduzir as notações $Z_1 = e^{ik_1 L \cos \theta}$ e $Z = e^{ik_2 L \cos \theta_{ref}}$

No ponto $r = 0$, obtemos

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \rightarrow A + B = C + D. \quad (4.1.27)$$

Usando a relação 4.1.26 no ponto $r = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_1(0)}{\partial r} &= \frac{\partial \psi_2(0)}{\partial r} \rightarrow ik_1 \cos \theta (A - B) = ik_2 \cos \theta_{ref} (C - D) \\ A - B &= n \frac{\cos \theta_{ref}}{\cos \theta} (C - D) \end{aligned} \quad (4.1.28)$$

onde $n = \frac{k_2}{k_1}$.

No ponto $r = L$, resulta

$$\psi_2(L) = \psi_3(L) \rightarrow Ce^{ik_2 L \cos \theta_{ref}} + De^{-ik_2 L \cos \theta_2} = Fe^{ik_1 L \cos \theta}$$

$$ZC + \frac{1}{Z}D = Z_1E \quad (4.1.29)$$

Usando a condição de continuidade para a derivada no ponto $r = L$, nós temos:

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial r} = \frac{\partial \psi_3}{\partial r}$$

resultando

$$\cos \theta_{ref} CZ - \frac{\cos \theta_{ref}}{Z} D = \frac{Z_1}{n} \cos \theta E$$

ou

$$CZ - \frac{1}{Z}D = \frac{Z_1}{n} \frac{\cos \theta}{\cos \theta_{ref}} E \quad (4.1.30)$$

Somando as equações Eq. (4.1.29) e 4.1.30, nós temos:

$$C = \frac{Z_1}{2Z} \left(1 + \frac{\cos \theta}{\cos \theta_{ref}} \right) E \quad (4.1.31)$$

e

$$D = \frac{Z_1 Z}{2} \left(1 - \frac{\cos \theta}{n \cos \theta_{ref}} \right) E \quad (4.1.32)$$

Reescrevendo a Eq. (4.1.28) em função da Eq. (4.1.31) e (4.1.32):

$$A + B = C + D \quad (4.1.33)$$

$$A - B = n \frac{\cos \theta_{ref}}{\cos \theta} (C - D) = n\alpha^{-1} (C - D)$$

onde $\alpha = \frac{\cos \theta}{\cos \theta_{ref}}$

Somando o sistema (4.1.33), obtemos

$$A = \frac{1}{2} [(1 + n\alpha^{-1}) C - (n\alpha^{-1} - 1) D] \quad (4.1.34)$$

Por simplicidade, assumiremos

$$N = n\alpha^{-1} \quad (4.1.35)$$

Portanto, a amplitude da autofunção incidente é dada por

$$A = \frac{1}{4} \frac{Z_1 \alpha}{NZ} (N + 1)^2 \left[1 - \left(\frac{N - 1}{N + 1} \right)^2 Z^2 \right] E \quad (4.1.36)$$

Usando a definição da probabilidade transmissão angular (4.1.22), podemos escrever

$$T_{angular} = \left| \frac{4NZ}{Z_1} \frac{1}{(N+1)^2} \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{N-1}{N+1} \right)^2 Z^2 \right]} \right|^2 \quad (4.1.37)$$

4.1.5 Analisando o Fator N

Dado o fator N

$$N = n\alpha^{-1} = n \frac{\cos \theta_{ref}}{\cos \theta}$$

A lei de Snell diz que a razão entre o seno do ângulo de incidência e o seno do ângulo de refração é constante:

$$\operatorname{sen}\theta_{ref} = \frac{\operatorname{sen}\theta}{n} \quad (4.1.38)$$

e pela relação trigonométrica

$$\cos \theta_{ref} = \sqrt{1 - \operatorname{sen}^2 \theta_{ref}} \quad (4.1.39)$$

temos

$$\cos \theta_{ref} = \sqrt{1 - \frac{\operatorname{sen}^2 \theta}{n^2}}$$

Portanto, nós temos:

$$\begin{aligned} \alpha^{-1} &= \frac{1}{n} \sqrt{\frac{n^2 - \operatorname{sen}^2 \theta}{1 - \operatorname{sen}^2 \theta}} \\ N &= \sqrt{\frac{n^2 - \operatorname{sen}^2 \theta}{1 - \operatorname{sen}^2 \theta}} \end{aligned} \quad (4.1.40)$$

No limite de $\theta = 0^\circ$, encontramos

$$N = n$$

o que reproduz os cálculos conhecidos na literatura para probabilidade de transmissão (ver Eq. 3.7).

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} T_{angular} = T = \left| \frac{4n}{(n+1)^2 \left[1 - \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 e^{2ink_1 L} \right]} e^{i(n-1)k_1 L} \right|^2 \quad (4.1.41)$$

Capítulo 5

O Efeito Túnel Angular

Se a energia da partícula incidente for positiva, mas menor que a altura da barreira, $0 < E < V$, a solução anterior permanece válida, bastando tomar

$$k_2 = i|k_2| = \frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(V-E)} \equiv ik, \quad k > 0 \quad (5.1)$$

onde

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V-E)} \quad (5.2)$$

A autofunção para a *Região 2* é

$$\psi_2(r) = Ce^{\vec{k} \cdot \vec{r}} + De^{-\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (0 \leq r \leq L) \quad (5.3)$$

mas aqui, ao contrário do degrau, não se pode excluir a exponencial crescente, porque r não se estende até $+\infty$ (região limite $r = L$).

O índice de refração n se torna imaginário.

$$n = \frac{k_2}{k_1} = i\frac{k}{k_1} = i\eta \quad (\eta > 0) \quad (5.4)$$

O N dado na Eq. (4.1.40) ficará

$$N = i\sqrt{\left(\frac{\eta^2 + \operatorname{sen}^2\theta}{1 - \operatorname{sen}^2\theta}\right)} \quad (5.5)$$

Definindo $N = i\beta$, onde

$$\beta = \sqrt{\left(\frac{\eta^2 + \operatorname{sen}^2\theta}{1 - \operatorname{sen}^2\theta}\right)} \quad (5.6)$$

Substituindo

$$T_{angular} = \left| \left[\frac{\frac{4i\beta}{(i\beta+1)^2}}{1 - \left(\frac{i\beta-1}{i\beta+1}\right)^2 e^{-2kL}} \right] e^{-kL - ik_1 L} \right|^2 \quad (5.7)$$

Para uma barreira espessa $kL \gg 1$ implica em desprezar e^{-2kL} no denominador da Eq. (5.7), o que nos leva a

$$T_{angular} = \frac{16\beta^2}{(\beta^2 + 1)^2} e^{-2kL} \quad (5.8)$$

Fazendo algumas manipulações algébricas para η e β , encontramos

$$\eta = \frac{k}{k_1} = \frac{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(V-E)}}{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}} \quad (5.9)$$

$$\eta^2 = \frac{(V-E)}{E} \quad (5.10)$$

e

$$\beta^2 = \frac{V}{E \cos^2 \theta} - 1 \quad (5.11)$$

$$\beta^2 + 1 = \frac{V}{E \cos^2 \theta} \quad (5.12)$$

Usando os resultados (5.9)-(5.12) em (5.8) obtemos

$$T_{angular} = 16 \frac{E_\theta}{V} \left(1 - \frac{E_\theta}{V} \right) e^{-2k_\theta L} \quad (5.13)$$

onde

$$\begin{aligned} E_\theta &= E \cos^2 \theta \\ k_\theta &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V - E_\theta)} \end{aligned}$$

que é a equação da probabilidade de tunelamento de uma partícula em função do seu ângulo de incidência θ com a reta normal à superfície da barreira de potencial. Para $\theta = 0$, a Eq. (5.13) é igual a equação do tunelamento usual (Eq. 3.1.5).

Capítulo 6

O Efeito Túnel Angular do Elétron

No Capítulo 4 nós deduzimos a equação do tunelamento angular. Neste capítulo, utilizaremos a Eq.(5.13) para estudar a probabilidade de tunelamento de um elétron com energia cinética variando de 0 a 12 eV, incidindo em uma barreira de potencial de 12 eV com espessura de 0,18 nm, em ângulos variando de $-\frac{\pi}{2}$ a $\frac{\pi}{2}$. Nós estamos interessados em descobrir a probabilidade de tunelamento do elétron em função do seu ângulo de incidência e compará-la com o tunelamento usual. Será que há um ângulo crítico ou uma faixa de ângulos em que o tunelamento angular é mais eficiente do que o tunelamento usual? Nos cálculos nós consideramos as seguintes constantes:

- $m = 9,11 \times 10^{-31} \text{kg}$ (massa do elétron)
- $\hbar = 1,055 \times 10^{-34} \text{J.s}$ (constante de Planck reduzida)

A unidade de energia em eV se cancela na Eq. (5.13), porém, é necessário usar a conversão de eV para $J = \text{kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2$ na exponencial para determinar o valor de k em m^{-1} , que se cancela com a unidade do comprimento da barreira.

Na Figura 6.1 comparamos o tunelamento angular e o tunelamento usual quando o elétron incide na barreira de potencial de 0,18 nm com um ângulo de incidência de 0° . Como podemos observar no gráfico, ambas as curvas têm o mesmo comportamento, o que mostra a consistência entre as Eqs. (3.1.5) e (5.13). A probabilidade de tunelamento é máxima, para ambos os casos, quando a energia do elétron atinge 11,02 eV, em 19,37%. O cálculo dos pontos extremos foi feito na seção 3.3.

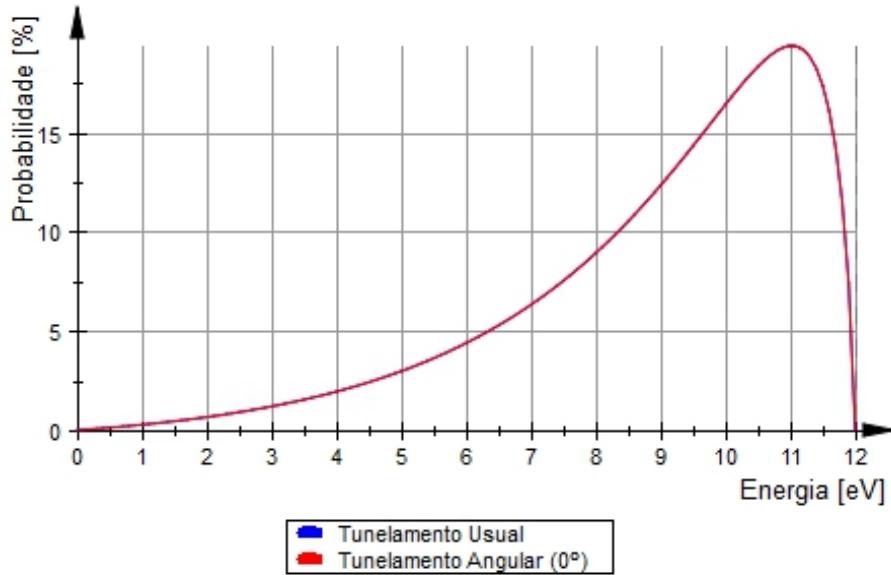


Figura 6.1: Comparação entre a probabilidade de tunelamento angular e usual de um elétron com energia variando de 0 a 12 eV, e ângulo de incidência de 0° .

Quando a partícula incide com um ângulo de 90° em relação a reta normal à superfície da barreira de potencial, não há probabilidade de tunelamento angular para nenhuma faixa de energia (ver Figura 6.2). Grosso modo, podemos dizer que a partícula "passa direto", sem incidir na barreira de potencial.

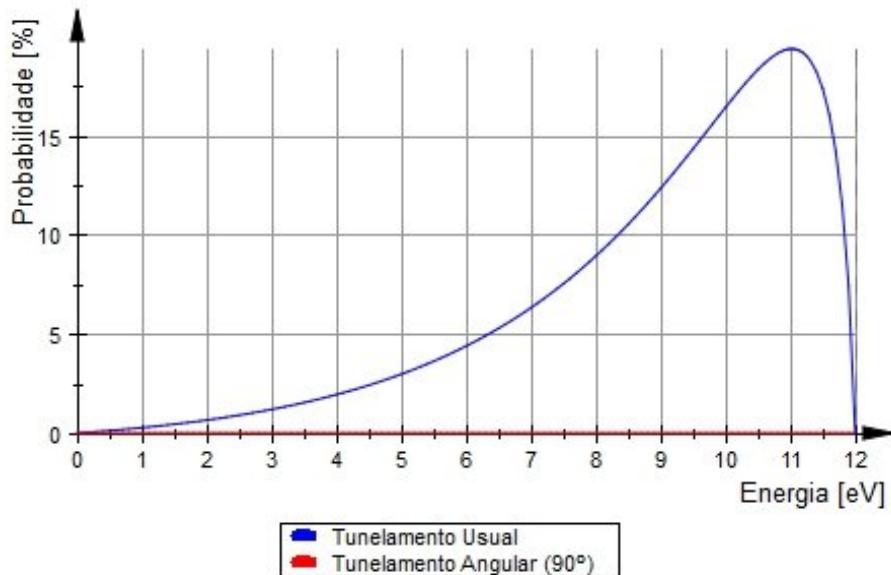


Figura 6.2: Probabilidade de tunelamento quando a partícula incide com um ângulo de 90° em relação à superfície da barreira de potencial.

Vamos analisar a probabilidade de tunelamento do elétron incidindo na barreira de potencial em ângulos variando de $-\frac{\pi}{2}$ a $\frac{\pi}{2}$. Usando a Eq. (5.13) obtemos o gráfico mostrado na Figura 6.3. A primeira coisa que nos chama atenção é que a probabilidade de tunelamento angular não é igual a zero quando a energia do elétron é igual à da barreira de potencial, diferentemente do tunelamento usual.

Mesmo para ângulos pequenos, há probabilidade de tunelamento angular quando $E = V$, como mostra a Figura 6.4.

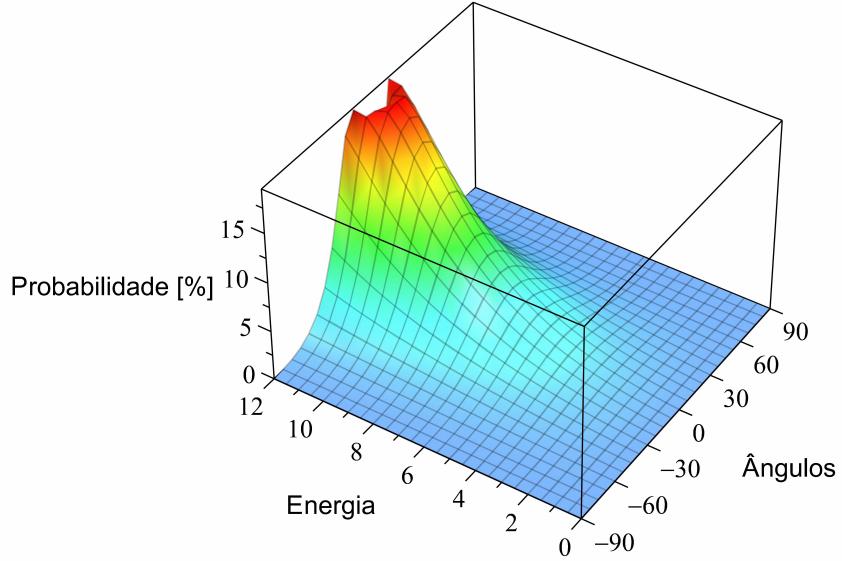


Figura 6.3: Probabilidade de tunelamento em função do ângulo de incidência do elétron.

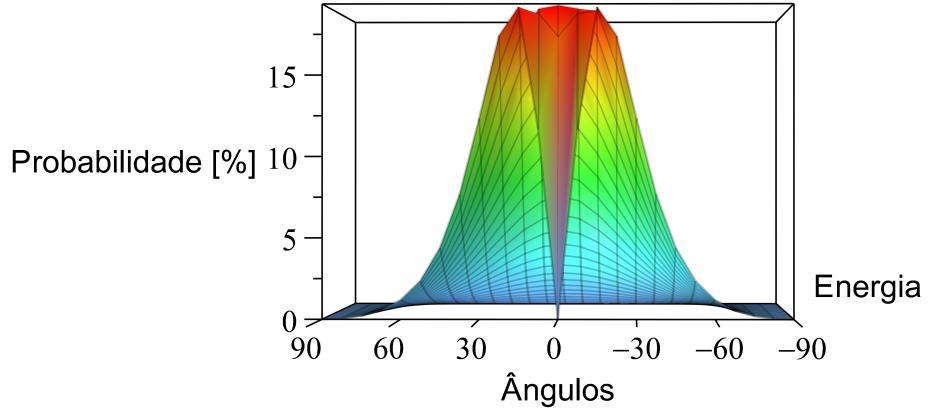


Figura 6.4: Probabilidade de tunelamento em função do ângulo de incidência do elétron.

A Tabela 6.1 nos ajuda a interpretar os gráficos anteriores. Veja que enquanto a probabilidade do tunelamento usual ($\theta = 0^\circ$) para $E = V = 12$ eV é zero, se o elétron incidir com a mesma energia da barreira de potencial com ângulo de 1° , a probabilidade de tunelamento é de 0,44%. A medida que o ângulo de incidência do elétron aumenta com a energia da partícula igual à da barreira, a probabilidade de tunelamento também aumenta até determinado ponto e depois começa a decair até 0% a partir de $\theta = 88^\circ$. Ainda na Tabela 6.1 podemos ver em destaque a faixa de ângulos (entre 14° e 19°) em que o tunelamento angular é mais favorecido.

Ângulos	Energia												
	0 eV	1 eV	2 eV	3 eV	4 eV	5 eV	6 eV	7 eV	8 eV	9 eV	10 eV	11 eV	12 eV
0° 0,00	0,27	0,66	1,19	1,94	2,97	4,39	6,32	8,93	12,34	16,42	19,37	0,00	
1° 0,00	0,27	0,66	1,19	1,94	2,97	4,38	6,32	8,92	12,33	16,40	19,36	0,44	
2° 0,00	0,27	0,65	1,19	1,94	2,96	4,38	6,30	8,90	12,30	16,37	19,36	1,56	
3° 0,00	0,27	0,65	1,19	1,93	2,95	4,36	6,28	8,86	12,24	16,30	19,35	3,13	
4° 0,00	0,27	0,65	1,18	1,92	2,94	4,34	6,24	8,81	12,17	16,21	19,34	4,96	
5° 0,00	0,27	0,65	1,18	1,91	2,93	4,31	6,20	8,75	12,08	16,10	19,31	6,92	
6° 0,00	0,27	0,65	1,17	1,90	2,91	4,28	6,15	8,67	11,97	15,96	19,27	8,87	
7° 0,00	0,27	0,64	1,17	1,89	2,88	4,24	6,09	8,58	11,84	15,80	19,20	10,76	
8° 0,00	0,27	0,64	1,16	1,87	2,86	4,20	6,02	8,47	11,68	15,61	19,11	12,50	
9° 0,00	0,26	0,63	1,15	1,86	2,83	4,15	5,95	8,36	11,52	15,40	18,99	14,07	
10° 0,00	0,26	0,63	1,14	1,84	2,79	4,10	5,86	8,23	11,33	15,16	18,83	15,45	
11° 0,00	0,26	0,62	1,13	1,82	2,76	4,04	5,77	8,09	11,13	14,90	18,64	16,61	
12° 0,00	0,26	0,62	1,11	1,79	2,72	3,98	5,67	7,94	10,91	14,61	18,41	17,56	
13° 0,00	0,26	0,61	1,10	1,77	2,68	3,91	5,57	7,78	10,68	14,31	18,13	18,29	
14° 0,00	0,25	0,60	1,09	1,74	2,63	3,84	5,46	7,61	10,44	13,98	17,82	18,83	
15° 0,00	0,25	0,60	1,07	1,72	2,59	3,76	5,34	7,44	10,18	13,64	17,47	19,17	
16° 0,00	0,25	0,59	1,05	1,69	2,54	3,69	5,22	7,25	9,92	13,28	17,08	19,34	
17° 0,00	0,24	0,58	1,04	1,66	2,49	3,61	5,09	7,06	9,64	12,90	16,66	19,36	
18° 0,00	0,24	0,57	1,02	1,63	2,44	3,52	4,96	6,87	9,36	12,51	16,21	19,23	
19° 0,00	0,24	0,56	1,00	1,59	2,38	3,44	4,83	6,67	9,07	12,11	15,73	18,98	
20° 0,00	0,23	0,55	0,98	1,56	2,33	3,35	4,69	6,47	8,77	11,70	15,22	18,63	
21° 0,00	0,23	0,54	0,96	1,53	2,27	3,26	4,56	6,26	8,47	11,28	14,69	18,19	
22° 0,00	0,23	0,53	0,95	1,49	2,21	3,17	4,42	6,05	8,17	10,86	14,15	17,67	
23° 0,00	0,22	0,52	0,92	1,46	2,16	3,07	4,27	5,84	7,86	10,44	13,60	17,10	
24° 0,00	0,22	0,51	0,90	1,42	2,10	2,98	4,13	5,63	7,56	10,01	13,04	16,48	
25° 0,00	0,22	0,50	0,88	1,38	2,04	2,89	3,99	5,42	7,25	9,59	12,47	15,82	
26° 0,00	0,21	0,49	0,86	1,35	1,97	2,79	3,85	5,21	6,95	9,16	11,91	15,14	
27° 0,00	0,21	0,48	0,84	1,31	1,91	2,70	3,70	5,00	6,65	8,74	11,35	14,44	
28° 0,00	0,20	0,47	0,82	1,27	1,85	2,60	3,56	4,79	6,36	8,33	10,79	13,74	
29° 0,00	0,20	0,46	0,80	1,23	1,79	2,51	3,42	4,59	6,07	7,93	10,24	13,04	
30° 0,00	0,19	0,45	0,77	1,19	1,73	2,41	3,28	4,39	5,78	7,53	9,70	12,34	
31° 0,00	0,19	0,44	0,75	1,16	1,67	2,32	3,15	4,19	5,50	7,14	9,18	11,65	
32° 0,00	0,19	0,42	0,73	1,12	1,61	2,23	3,01	4,00	5,23	6,76	8,66	10,98	
33° 0,00	0,18	0,41	0,71	1,08	1,55	2,14	2,88	3,81	4,96	6,40	8,17	10,33	
34° 0,00	0,18	0,40	0,68	1,04	1,49	2,05	2,75	3,62	4,70	6,04	7,69	9,69	
35° 0,00	0,17	0,39	0,66	1,00	1,43	1,96	2,62	3,44	4,45	5,70	7,22	9,08	
36° 0,00	0,17	0,38	0,64	0,97	1,37	1,88	2,50	3,27	4,21	5,37	6,78	8,50	
37° 0,00	0,16	0,36	0,62	0,93	1,32	1,79	2,38	3,10	3,98	5,05	6,36	7,94	
38° 0,00	0,16	0,35	0,59	0,89	1,26	1,71	2,26	2,93	3,75	4,74	5,95	7,40	
39° 0,00	0,15	0,34	0,57	0,86	1,21	1,63	2,15	2,77	3,53	4,45	5,56	6,90	
40° 0,00	0,15	0,33	0,55	0,82	1,15	1,55	2,04	2,62	3,33	4,17	5,19	6,41	
41° 0,00	0,14	0,32	0,53	0,79	1,10	1,48	1,93	2,47	3,13	3,91	4,84	5,96	
42° 0,00	0,14	0,31	0,51	0,75	1,05	1,40	1,83	2,33	2,94	3,66	4,51	5,53	
43° 0,00	0,13	0,29	0,49	0,72	1,00	1,33	1,73	2,20	2,75	3,42	4,20	5,12	
44° 0,00	0,13	0,28	0,47	0,69	0,95	1,26	1,63	2,06	2,58	3,19	3,90	4,74	
45° 0,00	0,12	0,27	0,45	0,66	0,90	1,19	1,54	1,94	2,41	2,97	3,62	4,39	
46° 0,00	0,12	0,26	0,43	0,62	0,86	1,13	1,45	1,82	2,26	2,77	3,36	4,05	
47° 0,00	0,11	0,25	0,41	0,59	0,81	1,07	1,36	1,71	2,11	2,57	3,11	3,74	
48° 0,00	0,11	0,24	0,39	0,56	0,77	1,01	1,28	1,60	1,97	2,39	2,88	3,45	
49° 0,00	0,11	0,23	0,37	0,54	0,73	0,95	1,20	1,49	1,83	2,22	2,66	3,18	
50° 0,00	0,10	0,22	0,35	0,51	0,69	0,89	1,13	1,40	1,70	2,06	2,46	2,92	
51° 0,00	0,10	0,21	0,33	0,48	0,65	0,84	1,05	1,30	1,58	1,91	2,27	2,68	
52° 0,00	0,09	0,20	0,32	0,45	0,61	0,79	0,99	1,21	1,47	1,76	2,09	2,46	
53° 0,00	0,09	0,19	0,30	0,43	0,57	0,74	0,92	1,13	1,36	1,63	1,93	2,26	
54° 0,00	0,08	0,18	0,28	0,40	0,54	0,69	0,86	1,05	1,26	1,50	1,77	2,07	
55° 0,00	0,08	0,17	0,27	0,38	0,50	0,64	0,80	0,97	1,17	1,39	1,63	1,89	
56° 0,00	0,07	0,16	0,25	0,36	0,47	0,60	0,74	0,90	1,08	1,28	1,49	1,73	
57° 0,00	0,07	0,15	0,24	0,33	0,44	0,56	0,69	0,84	1,00	1,17	1,37	1,58	
58° 0,00	0,07	0,14	0,22	0,31	0,41	0,52	0,64	0,77	0,92	1,08	1,25	1,44	
59° 0,00	0,06	0,13	0,21	0,29	0,38	0,48	0,59	0,71	0,84	0,99	1,14	1,31	
60° 0,00	0,06	0,12	0,19	0,27	0,36	0,45	0,55	0,66	0,77	0,90	1,04	1,19	
61° 0,00	0,06	0,12	0,18	0,25	0,33	0,41	0,50	0,60	0,71	0,82	0,95	1,08	
62° 0,00	0,05	0,11	0,17	0,23	0,30	0,38	0,46	0,55	0,65	0,75	0,86	0,98	
63° 0,00	0,05	0,10	0,16	0,22	0,28	0,35	0,43	0,51	0,59	0,68	0,78	0,89	
64° 0,00	0,04	0,09	0,14	0,20	0,26	0,32	0,39	0,46	0,54	0,62	0,71	0,80	
65° 0,00	0,04	0,09	0,13	0,18	0,24	0,29	0,36	0,42	0,49	0,56	0,64	0,72	
66° 0,00	0,04	0,08	0,12	0,17	0,22	0,27	0,32	0,38	0,44	0,51	0,58	0,65	
67° 0,00	0,04	0,07	0,11	0,15	0,20	0,24	0,29	0,35	0,40	0,46	0,52	0,58	
68° 0,00	0,03	0,07	0,10	0,14	0,18	0,22	0,27	0,31	0,36	0,41	0,46	0,52	
69° 0,00	0,03	0,06	0,09	0,13	0,16	0,20	0,24	0,28	0,32	0,37	0,41	0,46	
70° 0,00	0,03	0,06	0,08	0,12	0,15	0,18	0,21	0,25	0,29	0,33	0,37	0,41	
71° 0,00	0,02	0,05	0,08	0,10	0,13	0,16	0,19	0,22	0,26	0,29	0,33	0,36	
72° 0,00	0,02	0,04	0,07	0,09	0,12	0,14	0,17	0,20	0,23	0,26	0,29	0,32	
73° 0,00	0,02	0,04	0,06	0,08	0,10	0,13	0,15	0,17	0,20	0,23	0,25	0,28	
74° 0,00	0,02	0,04	0,05	0,07	0,09	0,11	0,13	0,15	0,17	0,20	0,22	0,24	
75° 0,00	0,02	0,03	0,05	0,06	0,08	0,10	0,12	0,13	0,15	0,17	0,19	0,21	
76° 0,00	0,01	0,03	0,04	0,06	0,07	0,08	0,10	0,12	0,13	0,15	0,16	0,18	
77° 0,00	0,01	0,02	0,04	0,05	0,06	0,07	0,09	0,10	0,11	0,13	0,14	0,15	
78° 0,00	0,01	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09	0,11	0,12	0,13	
79° 0,00	0,01	0,02	0,03	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09	0,10	0,11	
80° 0,00	0,01	0,01	0,02	0,03	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09	0,10	</

Nas Figura 6.5 e 6.6 comparamos o tunelamento usual com o tunelamento angular para ângulos entre 14° e 19° . Podemos ver claramente que enquanto a curva de probabilidade do tunelamento usual tende a zero a medida que a energia do elétron se aproxima da energia da barreira de potencial, a curva de probabilidade do tunelamento angular permanece acima de 18% para a faixa de ângulos mencionada quando $E = V$.

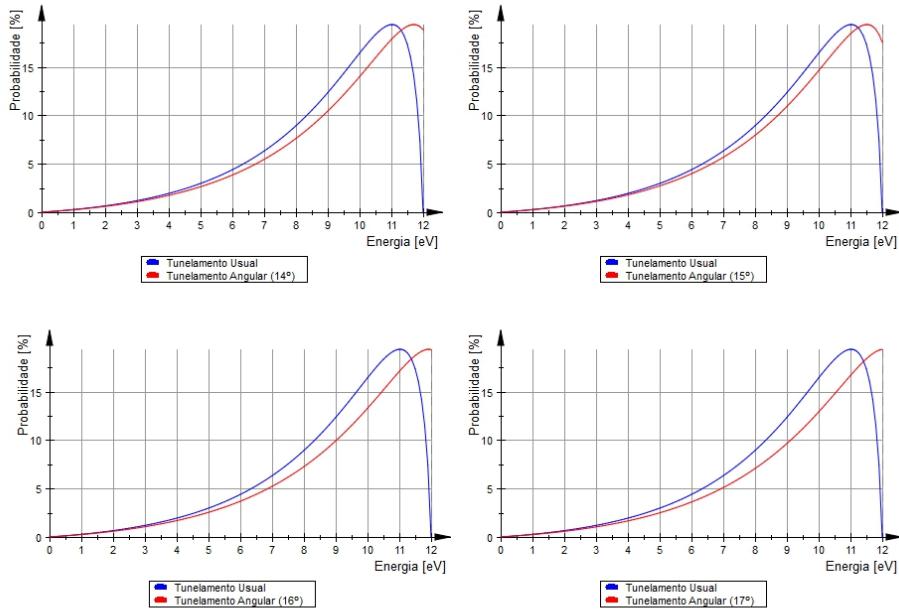


Figura 6.5: Comparaçāo entre o tunelamento angular e o tunelamento usual.

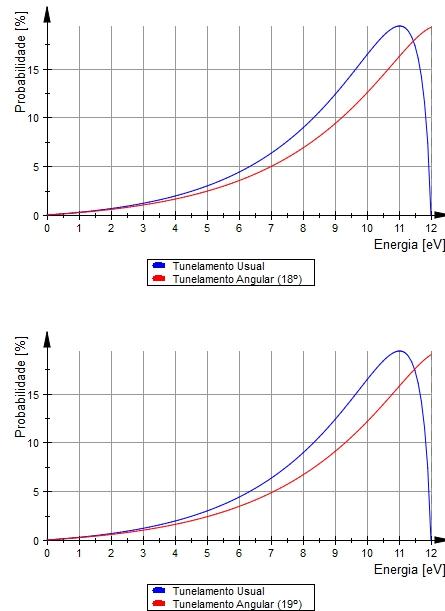


Figura 6.6: Comparaçāo entre o tunelamento angular e o tunelamento usual.

As Figuras 6.7 e 6.8 mostram a relação entre a probabilidade de reflexão e transmissão do cenário descrito acima. A superfície superior representa a reflexão (R), enquanto a superfície inferior, a transmissão (T). A medida que a energia do elétron aumenta, sua probabilidade de reflexão diminui e sua probabilidade de transmissão (ou tunelamento) aumenta. Observe que os gráficos representam a relação $R + T = 1$.

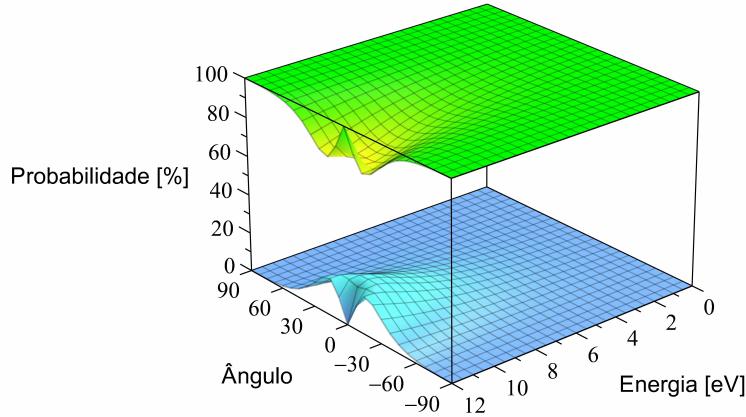


Figura 6.7: Relação entre a probabilidade de reflexão e transmissão.

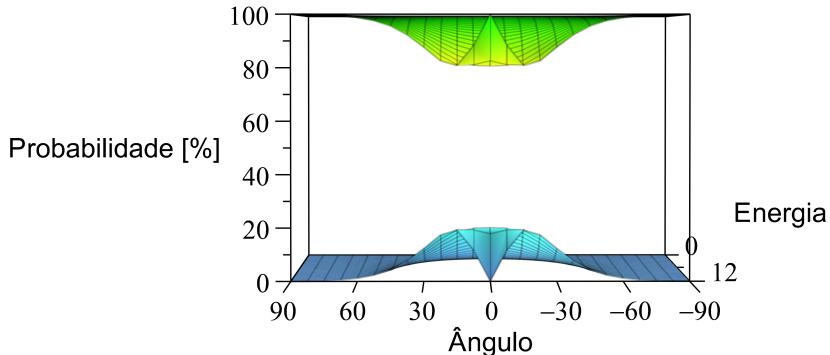


Figura 6.8: Relação entre a probabilidade de reflexão e transmissão.

6.1 Pontos Críticos

Nesta seção estamos interessados em descobrir os pontos críticos da Eq. (5.13) e determinar se ela tem ponto de máximo ou ponto de mínimo. Os pontos críticos são determinados pelo *Teorema 2* do Apêndice D, que trata da condição suficiente para uma função ter pontos críticos. Suponhamos que (E, θ) seja um ponto crítico da função $T_{angular}$, portanto o determinante $H(E, \theta)$ é dado por

$$H(E, \theta) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 T_{angular}}{\partial E^2} & \frac{\partial^2 T_{angular}}{\partial \theta \partial E} \\ \frac{\partial^2 T_{angular}}{\partial E \partial \theta} & \frac{\partial^2 T_{angular}}{\partial \theta^2} \end{vmatrix} \quad (6.1)$$

Para encontrar os pontos críticos primeiro precisamos resolver o sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial T_{angular}}{\partial E} = 0 \\ \frac{\partial T_{angular}}{\partial \theta} = 0 \end{cases} \quad (6.2)$$

que pode ser reescrito na forma de suas derivadas parciais, como

$$\begin{cases} -\frac{4 \sigma_1 \cos(\theta)^2 \left(\frac{E \cos(\theta)^2}{12} - 1 \right)}{3} - \frac{E \sigma_1 \cos(\theta)^4}{9} - \frac{6.63 \times 10^{-25} E \sigma_1 \cos(\theta)^4 \left(\frac{E \cos(\theta)^2}{12} - 1 \right)}{\sigma_2} = 0 \\ \frac{2 E^2 \sigma_1 \cos(\theta)^3 \sin(\theta)}{9} + \frac{8 E \sigma_1 \cos(\theta) \sin(\theta) \left(\frac{E \cos(\theta)^2}{12} - 1 \right)}{3} + \frac{1.33 \times 10^{-24} E^2 \cos(\theta)^3 \sin(\theta) \left(\frac{E \cos(\theta)^2}{12} - 1 \right)}{\sigma_2} = 0 \end{cases}$$

onde

$$\sigma_1 = e^{-3.41 \times 10^{24}} \sigma_2$$

e

$$\sigma_2 = \sqrt{3.49 \times 10^{-48} - 2.91 \times 10^{-49} E \cos(\theta)^2}$$

Por se tratar de um sistema de equações transcendentais, não podemos resolvê-lo de modo usual, por isso recorremos à análise da Figura 6.3 e da Tabela 6.1 para determinar os pontos críticos. As condições que devem ser satisfeitas são (Apêndice D):

- 1) Se $H(E_i, \theta_i) > 0$ e $\frac{\partial^2 T_{angular}}{\partial E^2} > 0$, então (E_i, θ_i) é um ponto de mínimo local de $T_{angular}$.
- 2) Se $H(E_i, \theta_i) > 0$ e $\frac{\partial^2 T_{angular}}{\partial E^2} < 0$, então (E_i, θ_i) é um ponto de máximo local de $T_{angular}$.
- 3) Se $H(E_i, \theta_i) < 0$, então (E_i, θ_i) não é extremamente local. Nesse caso, (E_i, θ_i) é um ponto de sela.
- 4) Se $H(E_i, \theta_i) = 0$, nada se pode afirmar (pode ser um ponto de máximo, mínimo ou sela).

O subíndice i são os pontos críticos da Tabela 6.1.

O resultado do determinante H , também chamado determinante hessiano da função, é mostrado na Figuras 6.9, 6.10 e 6.11. Observe que entre os ângulos -30° e 30° há pontos onde o determinante H é positivo, o que indica a existência de pontos críticos. Mas não podemos afirmar se tais pontos são de máximo ou mínimo apenas observando o sinal do determinante hessiano da função. Para isso precisamos verificar também o sinal da segunda derivada de $T_{angular}$ para energia E e ângulo θ . Calculadas as derivadas, observamos que as condições 2 e 3 para a existência de pontos críticos foram satisfeitas.

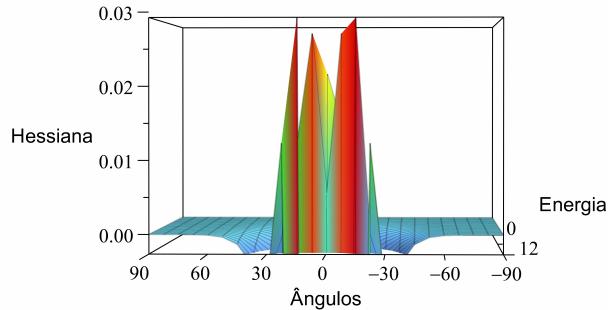


Figura 6.9: Gráfico do determinante hessiano da função $T_{angular}$.

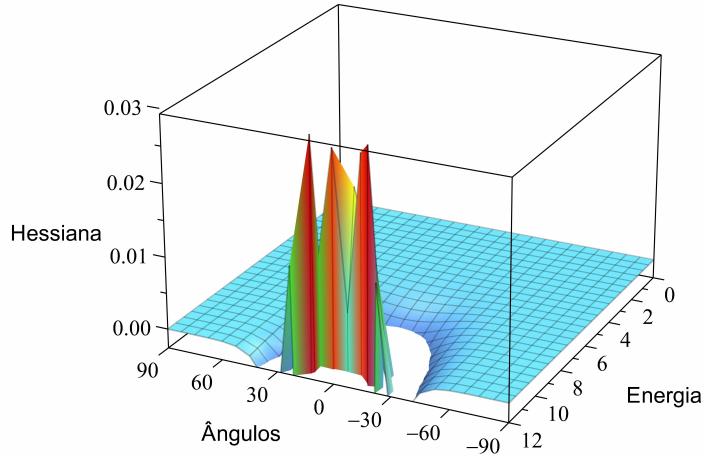


Figura 6.10: Gráfico do determinante hessiano da função $T_{angular}$.

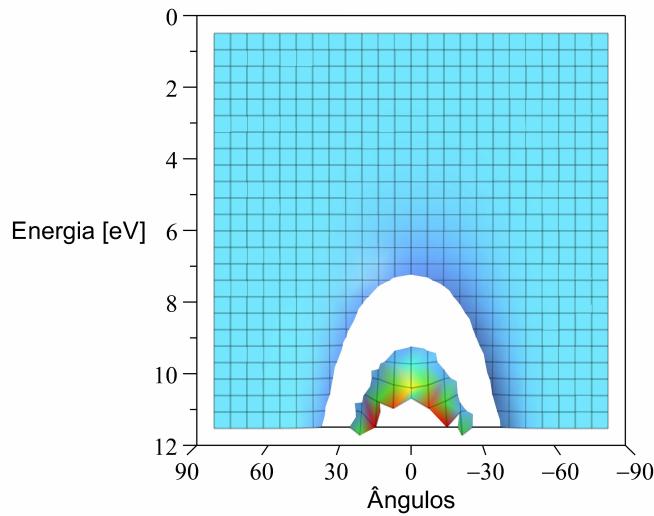


Figura 6.11: Gráfico do determinante hessiano da função $T_{angular}$.

Uma observação oportuna é que, diferentemente do que é mostrado nas Figuras 6.9, 6.10 e 6.11, o determinante hessiano da função $T_{angular}$ não é zero para nenhum valor de *energia* \times *ângulo* (com exceção de $E = 0$ e $\theta = 0^\circ$), como podemos ver nas Tabelas 6.2, 6.3 e 6.4. Por se tratarem de números muito pequenos, o software utilizado para gerar os gráficos do determinante hessiano aproximou os valores na ordem de 10^{-13} .

Ângulos	0 eV			1 eV			2 eV			3 eV		
	Hessiano	2ª Derivada	Ponto	Hessiano	2ª Derivada	Ponto	Hessiano	2ª Derivada	Ponto	Hessiano	2ª Derivada	Ponto
0º	0,00000000000	0,00000000000	S	-0,00000721477	-0,00643991904	S	-0,0002762238	-0,01812674178	S	-0,00007857189	-0,03789694864	S
1º	-0,0000000619	0,00000000000	S	-0,00000722594	-0,00643395565	S	-0,00002763653	-0,01810458876	S	-0,00007857477	-0,03783984159	S
2º	-0,00000002473	0,00000000000	S	-0,00000725934	-0,00641608460	S	-0,00002767866	-0,01803823157	S	-0,00007858275	-0,03766885111	S
3º	-0,0000005533	0,00000000000	S	-0,00000731464	-0,00638636313	S	-0,00002774791	-0,01792797508	S	-0,00007859396	-0,03738496619	S
4º	-0,00000009844	0,00000000000	S	-0,00000739125	-0,00634488630	S	-0,00002784279	-0,01777432487	S	-0,00007860531	-0,03698982489	S
5º	-0,00000015325	0,00000000000	S	-0,00000748842	-0,00629178650	S	-0,00002796131	-0,01757798338	S	-0,00007861258	-0,03648569907	S
6º	-0,00000021970	0,00000000000	S	-0,00000760514	-0,00622723265	S	-0,00002810092	-0,01733984464	S	-0,00007861051	-0,03587547330	S
7º	-0,00000029745	0,00000000000	S	-0,00000774024	-0,00615142937	S	-0,00002825683	-0,01706098763	S	-0,00007859295	-0,03516261831	S
8º	-0,00000038614	0,00000000000	S	-0,00000789235	-0,00606461584	S	-0,00002843102	-0,01674266818	S	-0,00007855298	-0,03435115916	S
9º	-0,00000048533	0,00000000000	S	-0,00000805994	-0,00596706451	S	-0,00002861429	-0,01638630977	S	-0,00007848309	-0,0344563868	S
10º	-0,00000059545	0,00000000000	S	-0,00000824132	-0,00585907967	S	-0,00002880435	-0,01599349305	S	-0,00007837534	-0,03245107661	S
11º	-0,00000071324	0,00000000000	S	-0,00000843467	-0,00574099581	S	-0,00002896867	-0,015566594437	S	-0,00007822157	-0,03137292502	S
12º	-0,00000084084	0,00000000000	S	-0,00000863806	-0,00561317590	S	-0,00002918736	-0,01510552344	S	-0,00007801356	-0,03021702040	S
13º	-0,00000097673	0,00000000000	S	-0,00000884948	-0,00547609045	S	-0,00002937123	-0,01461421007	S	-0,00007774323	-0,02898953330	S
14º	-0,00000112028	0,00000000000	S	-0,000009006683	-0,00532991056	S	-0,00002954385	-0,01409409035	S	-0,00007740284	-0,02769691581	S
15º	-0,00000127069	0,00000000000	S	-0,00000928796	-0,00517531575	S	-0,00002970067	-0,01354734229	S	-0,00007698507	-0,02634584784	S
16º	-0,00000142734	0,00000000000	S	-0,00000951072	-0,00501268182	S	-0,00002983722	-0,01297622102	S	-0,00007648335	-0,02494318254	S
17º	-0,00000158941	0,00000000000	S	-0,00000973292	-0,00484248351	S	-0,00002994925	-0,01238034078	S	-0,00007589185	-0,02349589163	S
18º	-0,00000175613	0,00000000000	S	-0,00000995242	-0,00466521122	S	-0,00003003271	-0,01177017484	S	-0,00007520565	-0,02201101130	S
19º	-0,00000192668	0,00000000000	S	-0,00001016708	-0,00448136865	S	-0,00003008387	-0,01114001043	S	-0,00007442086	-0,02049558909	S
20º	-0,00000210024	0,00000000000	S	-0,00001034785	-0,00429147035	S	-0,00003009934	-0,01049496376	S	-0,00007353466	-0,01895663242	S
21º	-0,00000227595	0,00000000000	S	-0,00001057374	-0,004090603939	S	-0,00003007611	-0,00983745049	S	-0,00007254540	-0,01740105923	S
22º	-0,00000245297	0,00000000000	S	-0,00001071686	-0,00389560491	S	-0,00003001159	-0,00916974484	S	-0,00007145258	-0,01583565118	S
23º	-0,00000263043	0,00000000000	S	-0,00001093741	-0,00369069980	S	-0,00003009365	-0,00849641411	S	-0,00007025690	-0,01426700990	S
24º	-0,00000280747	0,00000000000	S	-0,0000109874	-0,00348185835	S	-0,00002975062	-0,00781400925	S	-0,00006896022	-0,01270151641	S
25º	-0,00000298322	0,00000000000	S	-0,00001124431	-0,00326961398	S	-0,00002955128	-0,007103034891	S	-0,00006756549	-0,0114529434	S
26º	-0,00000315684	0,00000000000	S	-0,00001137275	-0,00305449702	S	-0,00002930494	-0,00644585972	S	-0,00006607675	-0,00960417684	S
27º	-0,00000332747	0,00000000000	S	-0,00001148282	-0,00283703260	S	-0,00002901134	-0,00576269524	S	-0,00006449904	-0,008080367760	S
28º	-0,00000349429	0,00000000000	S	-0,00001157346	-0,00261773858	S	-0,00002867073	-0,00508292625	S	-0,00006283826	-0,00658896594	S
29º	-0,00000365648	0,00000000000	S	-0,00001164376	-0,00239712363	S	-0,00002828377	-0,00440853195	S	-0,00006110112	-0,00512484610	S
30º	-0,00000381325	0,00000000000	S	-0,00001169300	-0,0027568540	S	-0,00002875157	-0,00374139128	S	-0,00005925051	-0,00369574066	S
31º	-0,00000396385	0,00000000000	S	-0,00001172061	-0,00195390876	S	-0,00002737564	-0,00308382070	S	-0,00005742788	-0,00230567819	S
32º	-0,00000410753	0,00000000000	S	-0,00001172621	-0,00173226426	S	-0,00002685784	-0,00243585944	S	-0,00005550811	-0,0095828474	S
33º	-0,00000424360	0,00000000000	S	-0,00001170956	-0,00151120663	S	-0,00002630040	-0,00180067385	S	-0,00005354443	-0,0003422065	S
34º	-0,00000437140	0,00000000000	S	-0,00001167061	-0,00129171348	S	-0,00002570579	-0,001171941919	S	-0,00005154571	-0,00159602685	S
35º	-0,00000449031	0,00000000000	S	-0,00001160945	-0,00107258408	S	-0,00002507679	-0,00957258788	S	-0,00004952094	-0,00279772805	S
36º	-0,00000459974	0,00000000000	S	-0,00001152633	-0,0085583831	S	-0,00002441635	-0,0001783219	S	-0,00004747905	-0,00394631793	S
37º	-0,00000465916	0,00000000000	S	-0,00001142164	-0,0064131576	S	-0,00002372762	-0,00059105845	S	-0,00004542884	-0,005004018092	S
38º	-0,00000478810	0,00000000000	S	-0,00001129590	-0,00230473498	S	-0,00002301387	-0,00114616352	S	-0,00004337888	-0,00607808081	S
39º	-0,00000486611	0,00000000000	S	-0,00001114978	-0,0022035278	S	-0,00002272846	-0,00168234425	S	-0,00004133739	-0,00705914691	S
40º	-0,00000493281	0,00000000000	S	-0,00001098403	-0,00001456381	S	-0,00002152479	-0,00219898201	S	-0,00003931222	-0,00798285824	S
41º	-0,00000498789	0,00000000000	S	-0,00001079952	-0,00018769982	S	-0,00002075629	-0,00269533024	S	-0,00003731074	-0,00884902590	S
42º	-0,00000503108	0,00000000000	S	-0,00001059772	-0,00308616879	S	-0,00001997637	-0,00317112139	S	-0,00003533982	-0,00965777402	S
43º	-0,00000506216	0,00000000000	S	-0,00001037816	-0,00058059665	S	-0,00001918836	-0,00362599277	S	-0,00003340574	-0,01040951950	S
44º	-0,00000508098	0,00000000000	S	-0,00001014346	-0,00070775979	S	-0,00001839553	-0,00405969332	S	-0,00003151424	-0,01110495090	S
45º	-0,00000508745	0,00000000000	S	-0,00000989429	-0,0095654729	S	-0,00001760104	-0,00447211585	S	-0,00002967040	-0,01174500672	S
46º	-0,00000508154	0,00000000000	S	-0,00000963186	-0,00113751070	S	-0,00001680790	-0,00486324254	S	-0,00002787872	-0,01233085334	S
47º	-0,00000506328	0,00000000000	S	-0,00000935741	-0,00131376367	S	-0,00001601898	-0,0052314397	S	-0,00002614306	-0,01286386277	S
48º	-0,00000503276	0,00000000000	S	-0,00000907223	-0,00148508148	S	-0,00001523698	-0,00558200406	S	-0,00002446668	-0,01334559060	S
49º	-0,00000499013	0,00000000000	S	-0,00000877761	-0,00165153051	S	-0,00001446441	-0,00591004215	S	-0,00002285223	-0,0137775417	S
50º	-0,00000499358	0,00000000000	S	-0,00000847483	-0,00181247762	S	-0,00001370360	-0,00621759701	S	-0,00002130178	-0,01416221128	S
51º	-0,000004686940	0,00000000000	S	-0,000008816519	-0,00196838495	S	-0,00000129566	-0,00650506769	S	-0,00001981687	-0,01450093948	S
52º	-0,00000479190	0,00000000000	S	-0,00000784995	-0,00211903161	S	-0,00001225522	-0,00677288075	S	-0,00001839849	-0,01479601612	S
53º	-0,00000470345	0,00000000000	S	-0,00000753038	-0,00226436793	S	-0,00001151189	-0,00702158047	S	-0,00001704716	-0,01504959933	S
54º	-0,00000460450	0,00000000000	S	-0,00000720771	-0,00240437948	S	-0,00001081727	-0,00725172281	S	-0,00001576296	-0,015263090955	S
55º	-0,00000449551	0,00000000000	S	-0,00000688312	-0,00253963673	S	-0,00001042749	-0,00746391932	S	-0,00001454554	-0,01544121442	S
56º	-0,00000437703	0,00000000000	S	-0,00000655776	-0,002668434354	S	-0,00000949010	-0,00765882125	S	-0,00001339418	-0,01558380891	S
57º	-0,00000424962	0,00000000000	S	-0,00000623276	-0,00279251615	S	-0,00000885959	-0,00873711385	S	-0,00001230786	-0,01569400445	S
58º	-0,00000411391	0,00000000000	S	-0,00000590917	-0,00291135221	S	-0,00000825216	-0,00799951079	S	-0,00001128522	-0,01577411329	S
59º	-0,00000397056	0,00000000000	S	-0,00000558801	-0,00302499469	S	-					

Ângulos	5 eV			6 eV			7 eV			8 eV		
	Hessiano	2ª Derivada	Ponto	Hessiano	2ª Derivada	Ponto	Hessiano	2ª Derivada	Ponto	Hessiano	2ª Derivada	Ponto
0º	-0,00046060298	-0,12042123990	S	-0,00101804202	-0,19798184240	S	-0,00211661664	-0,3193538780	S	-0,00393878427	-0,47928570920	S
1º	-0,00046034517	-0,12017351830	S	-0,00101725948	-0,19752368510	S	-0,00211475664	-0,31314170840	S	-0,00393606014	-0,47803445070	S
2º	-0,00045957021	-0,11942330320	S	-0,00101491039	-0,19615318280	S	-0,00210917297	-0,31076774270	S	-0,00392784215	-0,47428977070	S
3º	-0,00045827361	-0,11820342070	S	-0,00101090961	-0,19388219430	S	-0,00209985528	-0,30683463620	S	-0,0039139679	-0,46807903620	S
4º	-0,00045644817	-0,11649650160	S	-0,00100549393	-0,19073031780	S	-0,00208678839	-0,30137739030	S	-0,00389431209	-0,45944811010	S
5º	-0,00045408446	-0,11432486460	S	-0,00099841305	-0,18672464330	S	-0,00206995524	-0,29444449790	S	-0,00386851270	-0,44846166560	S
6º	-0,00045171135	-0,11170535510	S	-0,00098974090	-0,18189941080	S	-0,00204934084	-0,28609743050	S	-0,00383627994	-0,43520350850	S
7º	-0,00044769672	-0,10865814230	S	-0,00097947225	-0,17629557950	S	-0,00202493693	-0,27640979190	S	-0,00379727528	-0,41977680590	S
8º	-0,00044364831	-0,10520647820	S	-0,00096760544	-0,169696033150	S	-0,00199674706	-0,26546739970	S	-0,00375116625	-0,40230411230	S
9º	-0,00043901452	-0,10137642220	S	-0,000995414425	-0,162946393200	S	-0,00196479189	-0,25336551490	S	-0,00369765301	-0,38292708620	S
10º	-0,00043378536	-0,09719653584	S	-0,00093909973	-0,15531155300	S	-0,00192911431	-0,24020952930	S	-0,00363649427	-0,36180580750	S
11º	-0,00042795327	-0,09269755211	S	-0,00092249196	-0,14711778070	S	-0,00188897840	-0,22611278330	S	-0,00356753099	-0,33911762880	S
12º	-0,00042151402	-0,08791205261	S	-0,00090435167	-0,1384054640	S	-0,00184690239	-0,21195149190	S	-0,00349070665	-0,31505552730	S
13º	-0,00041464742	-0,08287396774	S	-0,00088472145	-0,12931801830	S	-0,00180060376	-0,19558284450	S	-0,00340608300	-0,28982595650	S
14º	-0,00040681802	-0,07761847342	S	-0,00086365685	-0,11985024880	S	-0,00175105922	-0,17940419050	S	-0,00331385054	-0,26364623530	S
15º	-0,00039857560	-0,07218134476	S	-0,00084122866	-0,11009835660	S	-0,00169847633	-0,23674096040	S	-0,00321433333	-0,23674153890	S
16º	-0,00038975557	-0,066559871714	S	-0,00081754121	-0,10013371380	S	-0,00164309882	-0,14587403810	S	-0,00310798791	-0,20934158780	S
17º	-0,00038037921	-0,06090669327	S	-0,00079261505	-0,09002715345	S	-0,00158520457	-0,12878475790	S	-0,00299539677	-0,18167714560	S
18º	-0,00037047368	-0,05514090919	S	-0,00076663830	-0,07984820864	S	-0,00152510258	-0,11650630310	S	-0,00287725660	-0,15397644870	S
19º	-0,00036007194	-0,04933660397	S	-0,00073970463	-0,06966439386	S	-0,00146312870	-0,09459516882	S	-0,00275436234	-0,12646169280	S
20º	-0,00034921249	-0,04352749640	S	-0,00071194498	-0,05954055278	S	-0,00139964046	-0,07773624522	S	-0,00262758782	-0,09934569372	S
21º	-0,00033793889	-0,03774630717	S	-0,00068349884	-0,04953823990	S	-0,00133501124	-0,06118482026	S	-0,00249786404	-0,0728883029	S
22º	-0,00032629927	-0,03202409489	S	-0,00065451229	-0,03971521348	S	-0,00126962389	-0,04504384865	S	-0,00236615625	-0,04709635634	S
23º	-0,00031434563	-0,02639010915	S	-0,00062513580	-0,03021497560	S	-0,00120386418	-0,02940735820	S	-0,00223340477	-0,02231615023	S
24º	-0,00030213310	-0,02087159549	S	-0,00059552200	-0,02081640535	S	-0,00113811421	-0,01435971877	S	-0,00210068269	-0,00136305321	S
25º	-0,00028971913	-0,01549363450	S	-0,00056582336	-0,01183347310	S	-0,00107274609	0,00002489321	S	-0,00196881506	-0,0238129556	S
26º	-0,00027716261	-0,01027901527	S	-0,00053618997	-0,0321503809	S	-0,00100816105	0,01368283425	S	-0,00183872047	0,04492630134	S
27º	-0,00026452303	-0,00524814323	S	-0,00050676736	-0,00500527223	S	-0,00094455917	0,02656114221	S	-0,00171121540	0,0461744527	S
28º	-0,00025185962	-0,00041898154	S	-0,00047769456	-0,01279910438	S	-0,00088238483	0,0816750345	S	-0,00158707366	-0,08282186368	S
29º	-0,00023923050	-0,00419297532	S	-0,00044910231	-0,02014334691	S	-0,00082187304	0,04982005236	S	-0,00146683717	0,09949570566	S
30º	-0,00022669196	-0,00857469744	S	-0,00042111157	-0,02702003093	S	-0,00076327159	0,06014702040	S	-0,00135116985	0,11461480820	S
31º	-0,00021429772	-0,01271587047	S	-0,00039383225	-0,03341616590	S	-0,00070679424	0,06958625390	S	-0,00124049478	0,12817344550	S
32º	-0,00020209834	-0,01660742018	S	-0,00036736229	-0,03932352950	S	-0,00065216919	0,07813462163	S	-0,00113517402	0,14018284400	S
33º	-0,00019014068	-0,02024426542	S	-0,00034178699	-0,04473840063	S	-0,00060089101	0,08579733361	S	-0,00103547503	0,15066952530	S
34º	-0,00017846747	-0,02362238224	S	-0,00031717864	-0,04966126261	S	-0,00055171716	0,0258719287	S	-0,00094157518	0,15967353610	S
35º	-0,00016711702	-0,02674010236	S	-0,00029359643	-0,05409647322	S	-0,00050517328	0,09852380904	S	-0,00085356789	0,16724661830	S
36º	-0,00015612295	-0,02959769679	S	-0,00027108662	-0,05805191360	S	-0,00046130296	0,10363273690	S	-0,00077147011	0,17345037040	S
37º	-0,00014551409	-0,03219723196	S	-0,00024968288	-0,06153862282	S	-0,00042012049	0,07974472780	S	-0,00069523060	0,17835443980	S
38º	-0,00013531444	-0,03454241744	S	-0,00022940690	-0,06457042535	S	-0,00038161340	0,1149487200	S	-0,00062473877	0,18203478420	S
39º	-0,00012554320	-0,03663848483	S	-0,0002106910	-0,06716355794	S	-0,00034574538	0,11432161520	S	-0,00055983362	0,18457202830	S
40º	-0,00011621494	-0,03849185430	S	-0,00019226950	-0,06933630168	S	-0,00031245921	-0,16466431910	S	-0,00050031262	-0,18604993890	S
41º	-0,00010733974	-0,040411029280	S	-0,00017539868	-0,07110862442	S	-0,00028167988	-0,11797265470	S	-0,00044594021	-0,18655403410	S
42º	-0,00009892345	-0,04150248101	S	-0,00015963879	-0,07250183766	S	-0,00025331752	0,11888502600	S	-0,000393645585	-0,18617033500	S
43º	-0,00009096799	-0,04267794996	S	-0,00014496461	-0,07353827184	S	-0,00022720733	0,11924903680	S	-0,00035158128	-0,18498426690	S
44º	-0,00008347165	-0,04364693958	S	-0,0001314457	-0,07424097243	S	-0,00020342733	0,11911037060	S	-0,00031102720	-0,18307970880	S
45º	-0,00007642946	-0,04442024641	S	-0,0001187184	-0,07463341928	S	-0,00018167094	0,11851440780	S	-0,00027449906	0,18053818900	S
46º	-0,00006983355	-0,04500908815	S	-0,00010711531	-0,07473927045	S	-0,00016187925	0,11750579340	S	-0,00024170208	0,17743822040	S
47º	-0,00006367348	-0,04542497706	S	-0,00009642055	-0,07458213155	S	-0,00014392817	0,11782064010	S	-0,00021234548	0,17385476880	S
48º	-0,00005793665	-0,04567960274	S	-0,00008661606	-0,07418535072	S	-0,000012769321	0,114422333570	S	-0,00018614596	0,16985884190	S
49º	-0,00005260861	-0,04578472489	S	-0,00007763714	-0,07357183921	S	-0,00011305109	0,11243204550	S	-0,00016283050	0,16551719160	S
50º	-0,00004767345	-0,04575206720	S	-0,00006950650	-0,07276391696	S	-0,000099888105	0,11019274860	S	-0,00014213844	-0,16089211470	S
51º	-0,00004311408	-0,04559327546	S	-0,00006200139	-0,07178318228	S	-0,00008860595	0,10774196180	S	-0,00012382306	0,15604134400	S
52º	-0,00003891257	-0,04531975087	S	-0,00005552402	-0,07065040438	S	-0,00007749317	0,10511405310	S	-0,00010765260	0,15101801470	S
53º	-0,00003505038	-0,04494267326	S	-0,00004911855	-0,06938543748	S	-0,00006085523	0,10234117040	S	-0,00009341090	0,14587069870	S
54º	-0,00003150866	-0,04447289893	S	-0,00004358918	-0,06800715486	S	-0,000059565032	0,09945320656	S	-0,00008089758	0,14064349310	S
55º	-0,00002826843	-0,04392092171	S	-0,00003866039	-0,06655340127	S	-0,000050218593	0,09647779514	S	-0,00006992802	0,13537615460	S
56º	-0,00002531084	-0,04329683364	S	-0,00003412631	-0,06498096194	S	-0,00004556239	0,09344033361	S	-0,00006033302	0,13010427110	S
57º	-0,00002261724	-0,04261029386	S	-0,00003010709	-0,06363554650	S	-0,00003970626	0,0936042910	S	-0,00005195827	0,12485946090	S
58º	-0,00002016945	-0,04187050496	S	-0,00002650908	-0,06710718615	S	-0,00003436595	0,08726969336	S	-0,00004466370	0,11966959330	S
59º	-0,00001794976	-0,04108619629	S	-0,00002394898	-0,06000324225	S	-0,00002998329	0,08417717321	S</td			

Ângulos	9 eV			10 eV			11 eV			12 eV		
	Hessiano	2º Derivada	Ponto	Hessiano	2º Derivada	Ponto	Hessiano	2º Derivada	Ponto	Hessiano	2º Derivada	Ponto
0°	-0,00517957378	-0,68765677860	S	0,00460242072	-0,82524972160	Máx	0,00545645735	-0,05145968718	Máx	-714,4843110000	22,36842536000	S
1°	-0,00518541329	-0,68612366700	S	0,00452687749	-0,82575139080	Máx	0,00623023920	-0,07468459741	Máx	-259,7919013000	14,63864347000	S
2°	-0,00520251391	-0,68151707770	S	0,00430241278	-0,82708641890	Máx	0,00845387943	-0,14235896650	Máx	-22,24455607000	-2,55438477300	S
3°	-0,00522964321	-0,67381692840	S	0,00393549314	-0,82876100540	Máx	0,0174876110	-0,24873264410	Máx	-124,9862070000	8,52144440080	S
4°	-0,00526481704	-0,66299517420	S	0,00343678767	-0,83000402690	Máx	0,01569681848	-0,38501023950	Máx	-67,0761027500	3,76144344000	S
5°	-0,00530540015	-0,64902335250	S	0,00282096175	-0,82983844690	Máx	0,01974504234	-0,54037813290	Máx	-38,0346034100	0,13459255750	S
6°	-0,00534823911	-0,63188202930	S	0,00210631796	-0,82716952410	Máx	0,02338273602	-0,70317541850	Máx	-22,24455607000	-2,55438477300	S
7°	-0,00538981977	-0,61157119560	S	0,00131424659	-0,82080825540	Máx	0,02619523988	-0,86202704510	Máx	-13,1918933100	-4,47456877200	S
8°	-0,00542644058	-0,58812058520	S	0,00046847243	-0,80992440260	Máx	0,02790852328	-1,00679236600	Máx	-7,7693270900	-5,77137496400	S
9°	-0,00545439159	-0,56159893290	S	-0,00040588243	-0,79340858860	S	0,02840275107	-1,12923945600	Máx	-4,69416316900	-6,56900065700	S
10°	-0,00547012943	-0,53212132160	S	-0,00128336557	-0,77065700740	S	0,02770502219	-1,22341655700	Máx	-7,7092488800	-6,97275513700	S
11°	-0,00547043853	-0,49985398640	S	-0,00213931128	-0,74125484720	S	0,02594996349	-1,28574259400	Máx	-1,06260938000	-7,07125134900	S
12°	-0,00545257018	-0,46501619330	S	-0,00295091485	-0,70506195340	S	0,02335126830	-1,31487145600	Máx	-0,90390558330	-6,93844451800	S
13°	-0,00541435284	-0,42787908380	S	-0,00369817461	-0,66242819770	S	0,02015820481	-1,31139904400	Máx	-0,48494300110	-6,63550944600	S
14°	-0,00535426914	-0,38876162660	S	-0,00436462828	-0,61320223060	S	0,016622351533	-1,27748151800	Máx	-0,23977783940	-6,21255346600	S
15°	-0,00527149727	-0,34802402950	S	-0,00493783658	-0,55856966220	S	0,01297870524	-1,21642315350	Máx	-0,10668208850	-5,71016615000	S
16°	-0,00516591733	-0,30605912480	S	-0,00540959588	-0,49917324600	S	0,00941839146	-1,13227763500	Máx	-0,02562631956	-5,16081012900	S
17°	-0,00503808443	-0,26328233430	S	-0,00575789050	-0,43597082010	S	0,00609282175	-1,02949220200	Máx	0,01146597433	-4,59005980900	Máx
18°	-0,00488917362	-0,22012085890	S	-0,00603661765	-0,37000470480	S	0,00310685008	-0,91260877570	Máx	0,02669751950	-4,01769651600	Máx
19°	-0,00472090140	-0,17700271520	S	-0,00619513392	-0,30235318150	S	0,00052340900	-0,78660360590	Máx	0,02991452368	-3,45866980500	Máx
20°	-0,00453543061	-0,13434618400	S	-0,00625767945	-0,23408659930	S	-0,001630344366	-0,65386757010	S	0,02703969600	-2,92393532800	Máx
21°	-0,00433526527	-0,09255013994	S	-0,00623273646	-0,16622984110	S	-0,00335568985	-0,51977788880	S	0,02154546620	-2,4211799000	Máx
22°	-0,00412314165	-0,05198562392	S	-0,00613037374	-0,397320169	S	-0,00467491401	-0,38695176450	S	0,01538705283	-1,95544512500	Máx
23°	-0,00390192139	-0,01298890385	S	-0,00596161953	-0,03544411569	S	-0,00562446976	-0,25805557610	S	0,00959336435	-1,52965814400	Máx
24°	-0,00367449149	0,0241438402	S	-0,00573879497	-0,2589698855	S	-0,00624914711	-0,13524160000	S	0,00463994880	-1,14508273500	Máx
25°	-0,00344367499	0,05916019275	S	-0,00547052897	-0,08367652543	S	-0,00659735715	-0,020171201029	S	0,00068271261	-0,80169709580	Máx
26°	-0,00321215482	0,09185353446	S	-0,00517036547	0,13740493480	S	-0,00671764098	0,08594715151	S	-0,00229732608	-0,49850907230	S
27°	-0,00298241251	0,12206365450	S	-0,00484745655	0,18671571150	S	-0,00665619718	0,18230820980	S	-0,0040598643	-0,23381636070	S
28°	-0,00275668199	0,14967559156	S	-0,00451090067	0,23135945600	S	-0,00645483915	0,26845956270	S	-0,00578380722	-0,00541923354	S
29°	-0,00253691841	0,17461966240	S	-0,00416862654	0,27119504650	S	-0,00615096488	0,34427436840	S	-0,00657648366	0,18920746680	S
30°	-0,00232478070	0,1968650030	S	-0,00382742924	0,30617882930	S	-0,005776251524	0,40976467150	S	-0,00691925520	0,35277707090	S
31°	-0,00212162641	0,21641976800	S	-0,0034922974	0,33635261970	S	-0,005353734024	0,465303270060	S	-0,00692973594	0,48808312870	S
32°	-0,00192851709	0,23332534000	S	-0,00316961918	0,36183117660	S	-0,00491559993	0,51130642520	S	-0,00670568806	0,59791610060	S
33°	-0,00174623210	0,24765247590	S	-0,00280622133	0,38278969350	S	-0,00446801818	0,54833497060	S	-0,00632554041	0,68500051090	S
34°	-0,00157528892	0,25949613900	S	-0,00256947392	0,39945172480	S	-0,00402752564	0,57702712080	S	-0,00585029590	0,75194898370	S
35°	-0,00141596803	0,26897500770	S	-0,00229968444	0,41207785680	S	-0,00360361255	0,59807187090	S	-0,005326011193	0,80123005690	S
36°	-0,00126834075	0,27621950150	S	-0,00204405408	0,42095533810	S	-0,00320289210	0,61218380030	S	-0,00478638184	0,83514711830	S
37°	-0,00113229832	0,28137555110	S	-0,001811148910	0,42638879810	S	-0,00282962802	0,62008291970	S	-0,00425516158	0,85582620710	S
38°	-0,00100758119	0,28459681070	S	-0,00159905203	0,42869211830	S	-0,00248621101	0,62247856820	S	-0,00374831853	0,86521077640	S
39°	-0,00089380732	0,28604245550	S	-0,00140626312	0,42818146520	S	-0,00217357653	0,62005690570	S	-0,0032554041	0,68500051090	S
40°	-0,00079049892	0,28587377480	S	-0,00123235143	0,42516945640	S	-0,00189156203	0,61347153820	S	-0,0024333607	0,85696205610	S
41°	-0,00069710687	0,28425174660	S	-0,00107633450	0,41996038420	S	-0,00163920569	0,60333682590	S	-0,00245036383	0,84223203303	S
42°	-0,00061303265	0,28133475550	S	-0,00093708652	0,41284645480	S	-0,0014499095	0,59022345160	S	-0,00210507413	0,82239434980	S
43°	-0,00053764755	0,27727762707	S	-0,00081339529	0,40410488520	S	-0,00121704214	0,547465585890	S	-0,00179785598	0,7982719300	S
44°	-0,00047030908	0,27222557560	S	-0,00070400748	0,39399581930	S	-0,00104329757	0,557111211140	S	-0,00152891556	0,77092067970	S
45°	-0,00041037471	0,26632207540	S	-0,00060767201	0,38276092550	S	-0,00089153443	0,53801956230	S	-0,00129519164	0,74116353400	S
46°	-0,00035721035	0,25969890190	S	-0,00052315604	0,37062258720	S	-0,00075963098	0,5177646350	S	-0,00109335656	0,70971765000	S
47°	-0,00030121264	0,25248003650	S	-0,00044972898	0,35778358980	S	-0,00064548867	0,49668728420	S	-0,00092028811	0,67718508340	S
48°	-0,00026878872	0,24478036790	S	-0,00038492129	0,34442721770	S	-0,00054708460	0,47508454030	S	-0,00077191327	0,6440847230	S
49°	-0,00023238806	0,23670550480	S	-0,00032905382	0,33071767950	S	-0,00046256221	0,45332157410	S	-0,00064599072	0,61084457810	S
50°	-0,000200049221	0,22835176090	S	-0,00028065369	0,31680079160	S	-0,00039020636	0,43103294740	S	-0,00053911556	0,57781943670	S
51°	-0,00017261939	0,21980628550	S	-0,0002888676	0,30280485560	S	-0,00032845801	0,40953593990	S	-0,00044894664	0,54529948600	S
52°	-0,00014832531	0,21114731150	S	-0,00020292764	0,28884167600	S	-0,00027591416	0,38807356810	S	-0,00037305477	0,51351784040	S
53°	-0,00012720301	0,20244449700	S	-0,00017204768	0,27500767470	S	-0,00023123202	0,36704755570	S	-0,00030936785	0,48265823060	S
54°	-0,0001088205	0,19375933900	S	-0,00014559360	0,26138505110	S	-0,00019357608	0,34656520630	S	-0,00025606746	0,45286182210	S
55°	-0,00009302715	0,18514563910	S	-0,00012298315	0,24804297710	S	-0,00016169815	0,32671214150	S	-0,00022157054	0,42423334280	S
56°	-0,00007933641	0,17665005050	S	-0,00010700140	0,23503877850	S	-0,00014386333	0,30755487800	S	-0,00017450825	0,39684655380	S
57°	-0,00006753933	0,16831237560	S	-0,00008728920	0,22241909670	S	-0,00011224856	0,28914322890	S	-0,00014370405	0,37074910730	S
58°	-0,00005739461	0,16016654880	S	-0,00007303509	0,21022100910	S	-0,00019329266	0,27152152920	S	-0,00011815191	0,34596683480	S
59°</												

Com o auxílio das Tabela 6.4 (região em destaque) e 6.5, observamos que para ângulos entre 0° e 25° , há pontos de máximo para energia de 10 eV a 12 eV. Na Figura 6.11 vemos uma região aparentemente descontínua ("branca") que indica hessiana mais negativa em relação as demais, ou seja, é uma região "fortemente"de *pontos de sela* em relação as outras.

Ângulos	Hessiana	10 eV			11 eV			12 eV		
		$\frac{\partial^2}{\partial E^2} T_{Angular}$	$\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} T_{Angular}$	%	Hessiana	$\frac{\partial^2}{\partial E^2} T_{Angular}$	%	Hessiana	$\frac{\partial^2}{\partial E^2} T_{Angular}$	%
0°	0.0046	-0.0055	-0.8252	16.42	0.0054	-0.1060	-0.0514	19.37	-	-
1°	0.0045	-0.0054	-0.8257	16.40	0.0062	-0.1051	-0.0746	19.36	-	-
2°	0.0043	-0.0052	-0.8270	16.37	0.0084	-0.1024	-0.1423	19.36	-	-
3°	0.0039	-0.0047	-0.8287	16.30	0.0117	-0.0980	-0.2487	19.35	-	-
4°	0.0034	-0.0041	-0.8300	16.21	0.0157	-0.0922	-0.3850	19.34	-	-
5°	0.0028	-0.0034	-0.8298	16.10	0.0197	-0.0853	-0.5403	19.31	-	-
6°	0.0021	-0.0025	-0.8271	15.96	0.0233	-0.0776	-0.7031	19.27	-	-
7°	0.0013	-0.0016	-0.8208	15.80	0.0261	-0.0695	-0.8620	19.20	-	-
8°	0.0004	-0.0007	-0.8099	15.61	0.0279	-0.0611	-1.0068	19.11	-	-
9°	-	-	-	-	0.0284	-0.0528	-1.1292	18.99	-	-
10°	-	-	-	-	0.0277	-0.0448	-1.2234	18.83	-	-
11°	-	-	-	-	0.0259	-0.0373	-1.2857	18.64	-	-
12°	-	-	-	-	0.0233	-0.0304	-1.3148	18.41	-	-
13°	-	-	-	-	0.0201	-0.0242	-1.3113	18.13	-	-
14°	-	-	-	-	0.0166	-0.0187	-1.2774	17.82	-	-
15°	-	-	-	-	0.0129	-0.0138	-1.2164	17.47	-	-
16°	-	-	-	-	0.0094	-0.0097	-1.1322	17.08	-	-
17°	-	-	-	-	0.0061	-0.0063	-1.0294	16.66	0.0114	-0.0835
18°	-	-	-	-	0.0031	-0.0034	-0.9126	16.21	0.0267	-0.0612
19°	-	-	-	-	0.0005	-0.0011	-0.7860	15.73	0.0299	-0.0442
20°	-	-	-	-	-	-	0.0270	-0.0312	-2.9239	18.63
21°	-	-	-	-	-	-	0.0215	-0.0213	-2.4211	18.19
22°	-	-	-	-	-	-	0.0154	-0.0139	-1.9554	17.67
23°	-	-	-	-	-	-	0.0095	-0.0083	-1.5296	17.10
24°	-	-	-	-	-	-	0.0046	-0.0042	-1.1451	16.48
25°	-	-	-	-	-	-	0.0006	-0.0012	-0.8016	15.82

Tabela 6.5: Pontos Críticos

A Tabela 6.5 mostra os pontos de máximo $\hat{\text{ângulo}} \times \text{energia}$ de forma mais detalhada. O que nos chama atenção é que para $\theta = 0^\circ$ não há ponto de máximo quando a energia do elétron é igual à da barreira de potencial, diferentemente do que acontece para ângulos entre 17° e 25° .

Sem o uso de técnicas computacionais não poderíamos calcular os pontos de máximo da função T_{angular} , pois o sistema (6.2) é formado por equações transcendentais, não sendo possível soluções analíticas.

Capítulo 7

Conclusões e Trabalhos Futuros

Nesta dissertação nós obtivemos a equação para o tunelamento quântico de uma partícula em função do seu ângulo de incidência com a reta normal à superfície da barreira de potencial. Os resultados mostraram que o tunelamento angular, para o caso do elétron incidindo em uma barreira de potencial de 12 eV e espessura de 0,18 nm, é mais favorável do que o tunelamento usual para ângulos entre 0º e 25º e energia de 10 eV a 12 eV. Nós utilizamos o software MATLAB para a realização dos cálculos e geração dos gráficos que serviram para análise. Todos os cálculos também foram reproduzidos no software Mathematica para efeito de comparação e teste de validade.

Durante a dedução da equação do tunelamento angular vimos que as Eqs. (3.1.5) e (4.1.22) para definição de probabilidade na barreira são iguais. A diferença entre elas surge quando aplicamos as condições de contorno em coordenadas polares na equação do tunelamento angular. Isso deve-se ao fato de que no tunelamento usual o sistema é unidimensional, enquanto que no tunelamento angular o sistema é bidimensional. Outro fato importante para a dedução da equação do tunelamento angular foi a analogia ótico-mecânica (Apêndice B), que relaciona o ângulo de incidência com o ângulo de refração, bem como a relação entre os momentos lineares.

Para encontrar os pontos críticos da Eq. (4.1.22) nós tivemos que resolver um sistema formado por equações transcendentais. Tal sistema não pôde ser resolvido com as funções predefinidas do MATLAB, nos obrigando a escrever um algoritmo específico que associou a energia E e o ângulo θ para determinar os pontos de máximo da Eq. (4.1.22). No entanto, o MATLAB gerou um gráfico (Figura 6.3) que indica a existência de uma região de pontos de máximo, mas sem detalhar quais são eles. Na Tabela 6.5, gerada por nosso algoritmo, é possível ver os pontos de máximo da Eq. (4.1.22).

Como trabalhos futuros podemos citar estudos de tempo de tunelamento angular. Como o tunelamento é utilizado em diversos dispositivos eletrônicos, como os transistores e semicondutores, o estudo do tempo que os elétrons levam para tunelar, por exemplo, as barreiras de um heteroestrutura metalisolante-metal-isolante ou uma junção P-N, pode fornecer informação a respeito do tempo que a corrente elétrica leva para atravessar essas barreiras. Dessa forma, podemos saber em quanto tempo o sinal elétrico atravessará o dispositivo, ou seja, conhecemos a velocidade com a qual a informação é transmitida pelo aparelho em questão. Além disso, como podemos ver em [25] e [26], quando consideramos

a propagação de ondas eletromagnéticas em guias de onda em regiões espaciais nas quais as frequências das ondas são inferiores à frequência de corte do guia, temos um efeito análogo ao tunelamento quântico na teoria eletromagnética clássica. Um outro efeito semelhante surge, também, no problema da reflexão interna total frustrada, como podemos ver em [25]. Como sabemos, a transmissão de sinais via fibras ópticas é baseada na reflexão interna total, apresenta muitas similaridades com a propagação em guias de onda [27] e vem sendo cada vez mais utilizada nas telecomunicações. Por conseguinte, o estudo do tempo de tunelamento pode também, fornecer informações a respeito da velocidade de transmissão de informação através de fibras ópticas.

Apêndice A

Estado Estacionário

Um estado estacionário de energia E é descrito por uma função de onda

$$\Psi_E(x, t) = \psi_E(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{A.1})$$

onde

$$\hat{H}\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad (\text{A.2})$$

ou seja, ψ_E é uma autofunção de energia E . O conjunto dos autovalores de \hat{H} dá o *espectro de energia* do sistema.

Para o movimento num potencial unidimensional, a A.2 fica (omitindo o índice E)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \equiv \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 \psi \quad (\text{A.3})$$

onde k_0 seria o número de onda na ausência do potencial ($V = 0$). A Eq. (A.3) equivale a

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + n^2(x)k_0^2\psi = 0 \quad (\text{A.4})$$

onde

$$n^2(x) = 1 - \frac{V(x)}{E} \quad (\text{A.5})$$

é o quadrado do *índice de refração* na analogia ótico-mecânica.

Na mecânica clássica, para uma partícula de energia total E dada,

$$E - V(x) = \frac{1}{2m} p^2(x) \quad (\text{A.6})$$

é a *energia cinética da partícula na posição x* , contanto que seja $E > V(x)$, caso em que a posição x é acessível ao movimento da partícula (região *classicamente permitida*). Num potencial $V(x)$ como o da Figura A.1, as regiões permitidas variam com a energia E da partícula.

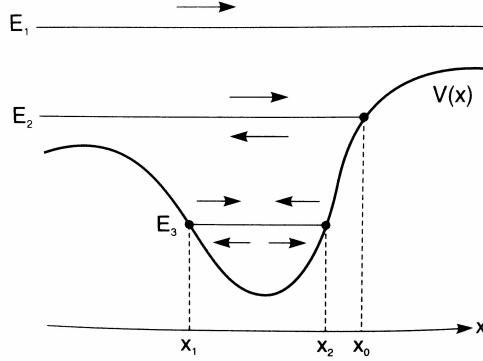


Figura A.1: Pontos de inversão

Para uma energia $E_1 > V(x)$ para $\forall(x)$, a reta toda é permitida e o movimento é *ilimitado*. Já para $E = E_2$, há um ponto x_0 onde

$$E_2 = V(x_0) \quad (\text{A.7})$$

que se chama ponto de inversão ou de retorno, onde $p(x)$ se anula e troca de sinal: o movimento da partícula pode ser *ilimitado à esquerda* mas ela não pode ultrapassar x_0 : se vier de $-\infty$, ela inverte o sentido do movimento ao atingir x_0 e retorna a $-\infty$. Para uma energia $E = E_3$, o movimento é *confinado* à região entre os pontos de retorno x_1 e x_2 : a partícula *oscila* indefinidamente entre esses pontos. Já se pensarmos do ponto de vista da ótica ondulatória, numa região onde $n(x)$ é constante, com $E > V$ (região permitida), a solução da Eq. (A.4) é da forma

$$\psi_E(x) = A^{ink_0x} + B^{-ink_0x} \quad (\text{A.8})$$

representando ondas que podem propagar-se nos dois sentidos.

Entretanto, se $E < V$ (região classicamente *proibida*), com $n^2 < 0$ na Eq. (A.5), podemos tomar

$$n = i\eta, \eta \in \Re \quad (\text{A.9})$$

e ainda existem soluções do tipo

$$\psi_E(x) = A^{-\eta k_0 x} + B^{\eta k_0 x} \quad (\text{A.10})$$

que são *exponencialmente atenuadas* para a direita ou para a esquerda. Encontramos soluções desse tipo, chamadas de *ondas evanescentes*, no estudo da reflexão total.

Apêndice B

A Analogia Ótico-mecânica

Para um meio estratificado, em que n (*índice de refração*) varia apenas de camada para camada, no limite em que a espessura das camadas tende a zero, reproduzimos a variação contínua. Nesse caso, aplicando a lei da refração a cada interface, temos:

$$\dots = n_3 \operatorname{sen} \theta_3 = n_2 \operatorname{sen} \theta_2 = n_1 \operatorname{sen} \theta_1 \quad (\text{B.1})$$

podemos assumir que

$$n \operatorname{sen} \theta = \text{constante} \quad (\text{B.2})$$

que leva a uma variação contínua de θ com n : num meio inhomogêneo, os raios luminosos são curvos.

Dado n como função da posição, podemos generalizar a (B.2) estratificando o meio através de superfícies $n = \text{constante}$, com valores próximos umas das outras. O ângulo θ é então o ângulo entre a direção \hat{u} do raio ($\hat{u} \equiv$ vetor unitário da tangente ao raio) e a direção de \hat{N} , vetor unitário da normal à superfície $n = \text{constante}$

$$\operatorname{sen} \theta = \hat{u} \cdot \hat{T} \quad (\text{B.3})$$

onde \hat{T} é um vetor unitário tangente à superfície $n = \text{constante}$. A generalização de (B.2) é então

$$\Delta(n \hat{u}) \cdot \hat{T} = 0 \quad (\text{B.4})$$

onde Δ é a variação ao longo do raio.

Sabemos que

$$\hat{u} = \frac{d\vec{x}}{ds} \quad (\text{B.5})$$

onde $|d\vec{x}| = ds$ e a identidade

$$(n \hat{u})^2 = n^2 \quad (\text{B.6})$$

e diferenciamos ambos os membros, obtemos

$$\hat{u} \cdot d(n \hat{u}) = dn \quad (\text{B.7})$$

Se dn é a variação de n para um deslocamento de dx ao longo do raio, temos, pela definição de gradiente,

$$dn = \nabla n \cdot d\vec{x} = \nabla n \frac{d\vec{x}}{ds} ds = \hat{u} \cdot \nabla n ds \quad (\text{B.8})$$

e, substituindo na Eq. (B.7), vem

$$\hat{u} \cdot \frac{d(n\hat{u})}{ds} = \hat{u} \cdot \nabla n \quad (\text{B.9})$$

O vetor ∇n é, como sabemos, perpendicular às superfícies $n = \text{constante}$, ou seja, é paralelo a \hat{N} . Mas o mesmo vale para $\frac{d(n\hat{u})}{ds}$, pois, pela Eq. (B.4), $n\hat{u}$ só pode mudar ao longo de \hat{N} (não muda na direção tangencial \hat{T}). Logo, decompondo \hat{u} nas direções \hat{N} e \hat{T} , vemos que a Eq. (B.9) equivale a

$$\frac{d}{ds}(n\hat{u}) = \frac{d}{ds} \left(n \frac{d\vec{x}}{ds} \right) = \nabla n \quad (\text{B.10})$$

que se chama de equação diferencial dos raios.

Então, num meio inhomogêneo, a trajetória de um raio luminoso fica determinada quando damos sua posição inicial \vec{x}_0 e sua direção inicial, definida pelo vetor unitário \hat{u}_0 , tangente ao raio em \vec{x}_0 . Na mecânica clássica, para uma partícula de massa m num campo de forças conservativo em que a energia potencial é $V(x)$, não basta dar \vec{x}_0 e a direção inicial \hat{u}_0 do movimento: é preciso dar a velocidade inicial $v_0 = \nu_0 \hat{u}_0$, que contém, como informação adicional, a magnitude v_0 da velocidade.

Entretanto, se a energia total E da partícula for fixada, v_0 fica totalmente determinada pela posição inicial \vec{x}_0 . Pela conservação da energia, temos

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) = \frac{1}{2}m\vec{v}_0^2(\vec{x}_0) + V(\vec{x}_0) \quad (\text{B.11})$$

onde $\vec{p} = m\vec{v}$ é o momento linear da partícula. A Eq. (B.11) dá então

$$v_0 = |\vec{v}_0| = \sqrt{\frac{2}{m}[E - V(\vec{x}_0)]} = v_0(\vec{x}_0) \quad (\text{B.12})$$

ou seja, a magnitude v_0 da velocidade em cada ponto \vec{x}_0 fica inteiramente determinada para E dado; só resta arbitrar a direção inicial \hat{u}_0 da trajetória, como no caso dos raios luminosos.

Temos então, em cada ponto \vec{x} , um valor bem definido da magnitude $\vec{p}(x)$ do momento linear de uma partícula que passe por esse ponto:

$$\vec{p}(x) = mv(\vec{x}) = \sqrt{2m[E - V(\vec{x})]} \quad (\text{B.13})$$

Se a posição \vec{x} for parametrizada em função do arco da curva s ao longo da trajetória, ou seja, $\vec{x} = \vec{x}(s)$, então podemos escrever para $s = s(t)$

$$\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{d\vec{x}}{ds} \frac{ds}{dt} = |\vec{v}| \frac{d\vec{x}}{ds} = v\hat{u} \quad (\text{B.14})$$

onde \hat{u} , vetor unitário na direção da velocidade, é tangente à trajetória.

Para determinar a trajetória, aplicamos a 2^a lei de Newton:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} = -\nabla V(\vec{x}) \quad (\text{B.15})$$

onde

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d\vec{p}}{ds} \frac{ds}{dt} = v \frac{d\vec{p}}{ds} = mv \frac{d\vec{v}}{dt} = v \frac{d}{ds} \left(p \frac{d\vec{x}}{ds} \right) \quad (\text{B.16})$$

em que foi usada na Eq. (B.14).

Usando a regra da cadeia para a relação

$$\nabla p = \frac{dp}{dV} \nabla V = -\frac{1}{2} \sqrt{2m} [E - V(\vec{x})]^{-\frac{1}{2}} \nabla V = -\frac{m}{p} \nabla V \quad (\text{B.17})$$

obtemos

$$-\nabla V = \frac{p}{m} \nabla p$$

ou

$$-\nabla V = v \nabla p \quad (\text{B.18})$$

Substituindo as Eq. (B.16) e (B.18) na Eq. (B.15), obtemos finalmente a equação diferencial das trajetórias:

$$\frac{d}{ds} \left[p(\vec{x}) \frac{d\vec{x}}{ds} \right] = \nabla p(\vec{x}) \quad (\text{B.19})$$

que tem exatamente a mesma forma que a equação diferencial dos raios na ótica geométrica, com $n(\vec{x})$ substituído por $p(\vec{x})$. Como $n(\vec{x})$ é um número (adimensional), podemos definir

$$n(\vec{x}) = \frac{p(\vec{x})}{p_0(\vec{x})} = \sqrt{1 - \frac{V(\vec{x})}{E}} \quad (\text{B.20})$$

onde $p_0 = \sqrt{2mE}$ é o momento de uma partícula livre.

Para $E > V(\vec{x})$, $n(\vec{x})$ é real, ou seja, região acessível ao movimento. A Eq.(B.19) dá então

$$\frac{d}{ds} \left[n(\vec{x}) \frac{d\vec{x}}{ds} \right] = \nabla n(\vec{x}) \quad (\text{B.21})$$

que é exatamente a equação diferencial dos raios.

Logo, a trajetória clássica de uma partícula de energia E num campo de forças de energia potencial $V(\vec{x})$ é idêntica à trajetória de um raio luminoso num meio inhomogêneo de índice de refração dado pela Eq. (B.20), de acordo com as leis da ótica geométrica.

A analogia ótico-mecânica também teve um papel fundamental na formulação da mecânica quântica.

Apêndice C

O Operador Momento

Escrevendo-se o operador hamiltoniano (H), que, para uma partícula de massa m em um campo conservativo, $V(x)$, representa a energia da partícula, em uma forma análoga à relação clássica,

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

pode-se identificar o operador momento por

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

uma vez que $p^2 = -\hbar^2\nabla^2$.

O operador momento é um operador vetorial e, portanto, pode ser expresso como a soma de operadores escalares, que são os operadores que representam as componentes do momento segundo os eixos cartesianos x , y e z ,

$$\vec{p} = p_x \vec{i} + p_y \vec{j} + p_z \vec{k}$$

onde $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ e $p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$.

Para uma partícula livre que se desloca em uma direção x , resulta que

$$\begin{aligned} p_x \left(e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar} \right) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar} \right) = \\ &= \sqrt{2mE} \left(e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar} \right) = p \left(e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar} \right) \end{aligned}$$

Assim, $e^{i\sqrt{2mE}x/\hbar}$ é uma autofunção do operador p_x associada ao autovalor $p = \sqrt{2mE}$. Apesar de ψ_E^+ e ψ_E^- serem autofunções que correspondem a um mesmo autovalor de H , ou energia da partícula,

$$H\psi_E^+(x) = E\psi_E^+(x)$$

$$H\psi_E^-(x) = E\psi_E^-(x)$$

com respeito ao operador p_x , elas são autofunções que correspondem a autovalores distintos,

$$p_x \psi_E^+(x) = p \psi_E^+(x) \rightarrow \psi_E^+(x) = \psi_p(x)$$

$$p_x \psi_E^-(x) = -p \psi_E^-(x) \rightarrow \psi_E^-(x) = \psi_{-p}(x)$$

Para o operador hamiltoniano H , ψ_E^+ e ψ_E^- são autofunções de um mesmo autovalor degenerado E e, para o operador momento, $\psi_E^+ = \psi_p$ e $\psi_E^- = \psi_{-p}$ são autofunções associadas, respectivamente, a autovalores distintos p e $-p$.

Usualmente, representa-se por $\Psi(x, t) = \psi_p(x)e^{iEt/\hbar}$ o autoestado simultâneo de energia e momento de uma partícula livre de massa m , que se desloca no sentido $+x$ com energia E e momento $p = \sqrt{2mE}$, pela expressão do tipo de onda plana proposta por de Broglie

$$\Psi(x, t) = A e^{i(px - Et)/\hbar}$$

onde a constante de normalização A é, usualmente, expressa como $1/\sqrt{2\pi\hbar}$.

Como o momento p pode ter qualquer valor no intervalo $(-\infty, \infty)$, o pacote de L. de Broglie, dado pela superposição linear

$$\Psi(x, t) = \int A c(p) e^{i[px - E(p)t]/\hbar} dp = \int c(p, t) \psi_p(x) dp$$

representa a solução geral não-estacionária da equação de Schrödinger para a partícula livre, onde o peso de cada componente, o coeficiente $c(p, t)$, é determinado pelas condições iniciais.

Analogamente ao caso de uma onda plana, se a partícula de massa m desloca-se em uma direção arbitrária definida por um vetor unitário \hat{p} , com energia E e momento $\hat{p}\hat{p} = \hat{p}\sqrt{2mE}$, a autofunção simultânea dessas grandezas associada à partícula livre é expressa por

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{\{i[\hat{p}\hat{p} \cdot \vec{r} - E(p)t]\}/\hbar}$$

onde $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ é a constante de normalização, e $\psi_p(\vec{r}) = e^{i(\hat{p}\hat{p} \cdot \vec{r})/\hbar}$ é autofunção do operador momento $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, corresponde ao autovalor $\hat{p}\hat{p}$,

$$\vec{p} \psi_p(\vec{r}) = -i\hbar \vec{\nabla} \psi_p(\vec{r}) = p \hat{p} \psi_p(\vec{r})$$

A solução geral para o estado da partícula livre, nesse caso, é dada pela superposição linear $\Psi(\vec{r}, t) = \int c(\vec{p}, t) \psi_p(\vec{r}) d^3 \vec{p}$ onde $d^3 \vec{p} = dp_x dp_y dp_z$, e o coeficiente $c(\vec{p}, t)$ é determinado por condições iniciais.

Apêndice D

Máximos e Mínimos de Funções de Várias Variáveis

Definição 1: Seja $z = f(x, y)$ uma função de duas variáveis. Dizemos que (x_0, y_0) é ponto de máximo de f se, para todo $(x, y) \in D(f)$, $f(x, y) \leq f(x_0, y_0)$. Dizemos que $f(x_0, y_0)$ é o valor máximo de f .

A figura a seguir, gerada a partir do software MATLAB, mostra o gráfico da função $f(x, y) = 4 - x^2 - y^2$. O ponto $(0, 0)$ é um ponto de máximo de f , pois, para todo $(x, y) \in D(f)$, $4 - x^2 - y^2 \leq f(0, 0)$ ou $4 - x^2 - y^2 \leq 4$ para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2$.

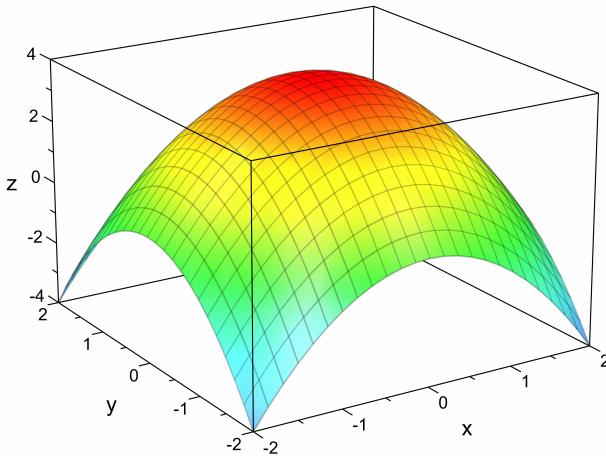


Figura D.1: Ponto de máximo

O valor máximo de $f(x, y) = 4 - x^2 - y^2$ é $f(0, 0) = 4$

Definição 2: Seja $z = f(x, y)$ uma função de duas variáveis. Dizemos que (x_0, y_0) é ponto de mínimo de f se, para todo $(x, y) \in D(f)$, $f(x, y) \geq f(x_0, y_0)$. Dizemos que $f(x_0, y_0)$ é o valor mínimo de f .

A figura a seguir, gerada a partir do software MATLAB, mostra o gráfico da função $f(x, y) = 1 + x^2 + y^2$. O ponto $(0, 0)$ é um ponto de mínimo de f , pois, para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, $1 + x^2 + y^2 \geq f(0, 0)$ ou $1 + x^2 + y^2 \geq 1$. $f(0, 0) = 1$ é o valor mínimo dessa função.

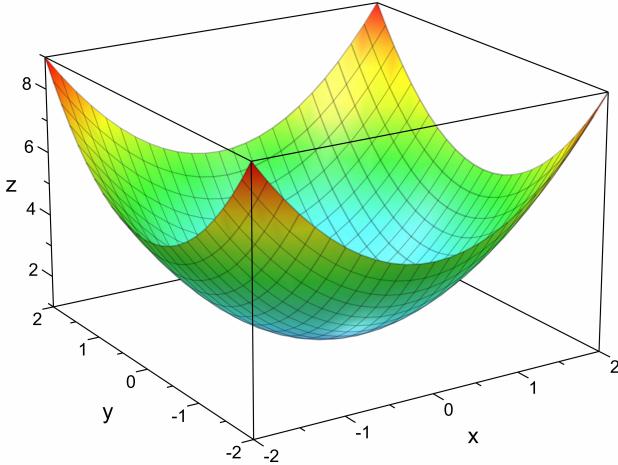


Figura D.2: Ponto de mínimo

Os pontos máximos e mínimos de uma função chamam-se extremos dessa função, ou em outras palavras, dizemos que uma função admite um extremo num dado ponto, se ela tem nesse ponto um máximo ou um mínimo. Mas como determinar se uma função admite um extremo num dado ponto?

A definição de máximo e mínimo de uma função pode ser escrita da seguinte forma: dados $x = x_0 + \Delta x$ e $y = y_0 + \Delta y$, então $f(x, y) - f(x_0, y_0) = f(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) - f(x_0, y_0) = \Delta f$.

1. Se $\Delta f < 0$ para todo os incrementos suficientemente pequenos das variáveis independentes, a função $f(x, y)$ admite um máximo no ponto $M(x_0, y_0)$.
2. Se $\Delta f > 0$ para todo os incrementos suficientemente pequenos das variáveis independentes, a função $f(x, y)$ admite um mínimo no ponto $M(x_0, y_0)$.

Essas definições são igualmente válidas para uma função de qualquer número de variáveis.

Condições Necessárias para Existência de um Extremo

Teorema 1: Se a função $z = f(x, y)$ admite um extremo para os valores $x = x_0$ e $y = y_0$, então cada derivada parcial de primeira ordem de z anula-se para esses valores das variáveis independentes ou não existem. Assim, nos pontos extremos, temos:

$$\frac{\partial z}{\partial x} = 0 \text{ e } \frac{\partial z}{\partial y} = 0$$

Este teorema fornece uma condição necessária, mas não uma condição suficiente. Em outras palavras, se o ponto for um ponto extremo as derivadas se anulam, porém quando as derivadas se anulam não podemos garantir que este ponto seja um ponto extremo. Por exemplo, dada a função $f(x, y) = x^2 - y^2$, temos: $\frac{\partial f}{\partial x} = 2x$ e $\frac{\partial f}{\partial y} = 2y$ e estas derivadas anulam-se para $x = 0$ e $y = 0$. Mas esta função não tem nem máximo nem mínimo para estes valores. Com efeito, ela anula-se na origem, mas toma, na vizinhança deste ponto, tanto valores positivos como valores negativos, portanto o valor zero não é um extremo, como mostra a figura a seguir gerada pelo MATLAB. Tal ponto é conhecido como *ponto de sela*.

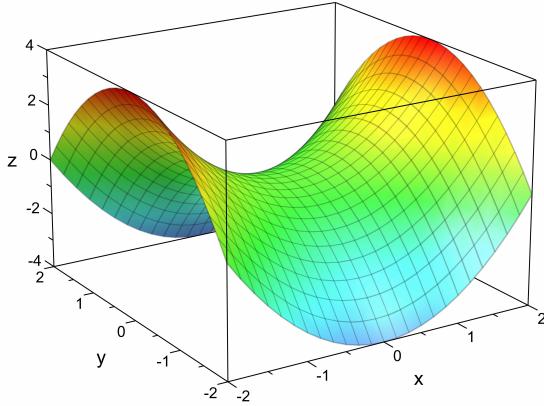


Figura D.3: Ponto de Sela

Condição Suficiente para um Ponto Crítico ser Extremante Local

Teorema 2: Seja $z = f(x, y)$ função cujas derivadas parciais de primeira e segunda ordem são contínuas num conjunto aberto que contém (x_0, y_0) e suponhamos que (x_0, y_0) seja um ponto crítico de f . Seja $H(x, y)$ o determinante

$$H(x, y) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y \partial x} \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \end{vmatrix}$$

Temos:

- 1) Se $H(x_0, y_0) > 0$ e $\frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} > 0$, então (x_0, y_0) é um ponto de mínimo local de f .
 - 2) Se $H(x_0, y_0) > 0$ e $\frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} < 0$, então (x_0, y_0) é um ponto de máximo local de f .
 - 3) Se $H(x_0, y_0) < 0$, então (x_0, y_0) não é extremamente local. Nesse caso, (x_0, y_0) é um ponto de sela.
 - 4) Se $H(x_0, y_0) = 0$, nada se pode afirmar (pode ser um ponto de máximo, mínimo ou sela).
- A matriz $H(x, y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y \partial x} \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} \end{bmatrix}$ é conhecida como matriz hessiana. O seu determinante, $H(x, y)$ é chamado determinante hessiano da função $z = f(x, y)$, ou hessiano da função.

Referências Bibliográficas

- [1] A. M. Starfield , Karl A. Smith , A. L. Bleloch. How to Model It: Problem Solving for the Computer Age. New York: McGraw-Hill, (1990).
- [2] JAYARAMAN, S. Computer-Aided Problem Solving for Scientists and Engineers. New York: McGraw-Hill, (1991).
- [3] OpenMP Architecture Review Board. (2005). OpenMP Application Program Interface. (<http://www.openmp.org/mp-documents/spec25.pdf>). SUTTER, H. & Larus,J. (2005). Software and the concurrency revolution.
- [4] LOPES, José Leite. A Estrutura Quântica da Matéria, do átomo pré-socrático às partículas elementares. 3. ed. Rio de Janeiro: Editora UFRJ, 2005.
- [5] HALLIDAY, David; RESNICK, Robert; MERRILL, John. Fundamentos de Física. vol. 4. 3. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora, 1991.
- [6] RING, P., RASMUSSEN, J.O. and MASSMAN, H., Barrier penetration theory in more than one dimension, Sov. J. Part. Nucl., 7, 366(1977).
- [7] BOWCOCK, P. and GREGORY, R. , Multidimensional tunneling and complex momentum, Phys. Rev. D44, 1774 (1991).
- [8] HUANG, Z.H., FEUCHTWANG, T.E., CUTLER P.H. and KAZES, E. , Wentzel-Kramers-Brillouin method in multi-dimensional tunneling, Phys. Rev. A 41, 32 (1990).
- [9] TAKADA, S. and NAKAMURA, H., Wentzel-Kramers-Brillouin theory of multidimensional tunneling: General theory for energy splitting, J. Chem Phys. 100, 98 (1994).
- [10] SCHIMID, A., quasiclassical wavefunction in multidimensional quantum decay problem, Ann. Phys. (NY), 170, 333(1986).
- [11] BACHER, C., BECKER, V. Becker, GURVITZ, S.A., KLEBER, M. and MIRANOV, M.S., Three-dimensional tunneling in quantum ballistic motion, Am. J. Phys. 66, 38 (1998).
- [12] BENDESKII, V.A., GOLDANSKII, V.I. and MARAKOV, D.E., Two-dimensional tunneling in a potential with two transition states, Chem Phys. Lett. 517, 186 (1991).

- [13] WANG, X.W. and LIN, D.L., Multi-dimensional WKB treatment of first passage time, *J. Phys. A* 19, 1597 (1986).
- [14] ZAMASTIL, J., SPIRKO, V., CIZEK, J., SKALA, L. and BLUDSKY, O. , Multidimensional WKB approximation and the lifetime calculation, *Phys. Rev. A*64, 042101 (2001).
- [15] CONDON, E. U.; MORSE P. M. Quantum Mechanics of Collision Processes I. Scattering of particles in a definite force field, *Rev. Mod. Phys.* 3 43-88 (1931).
- [16] MacCOLL, L. A. Note on the Transmission and Reflection of Wave Packets by Potential Barriers, *Phys. Rev.* 40 621-625 (1932).
- [17] KITTEL, C. Introdução à Física do Estado Sólido, Oitava Edição, LTC Editora, Rio de Janeiro (2006).
- [18] RAZAVY, M. Quantum Theory of Tunneling, World Scientific, New Jersey (2003).
- [19] GRIFFITHS, D. J. Mecânica quântica, 2.ed. São Paulo: Editora Pearson Hall, 2011.
- [20] SCHRÖDINGER, E., *Annalen der Physik* (4), volume 79, 1926.
- [21] BORN, Max., Nobel Lecture: The Statistical Interpretations of Quantum Mechanics. [Nobelprize.org](http://nobelprize.org/nobel_media/1404/2014/30_jul_2014.html). Nobel Media AB 2014. Web. 30 Jul 2014.
- [22] SAKURAI, J. J. Modern Quantum Mechanics, Revised Edition, Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [23] DIMARCO, A. J.; DUARTE, S. J. B.; TAVARES, O. A. P.; GONCALVES, M.; GARCIA, F.; RODRIGUEZ, O.; GUZMAN, F. . Effect Of Nuclear Deformation On The Alpha -Decay Half-Life Of Even-Even Alpha Emitters. *International Journal of Modern Physics E*, v. 9, n.3, p. 205-219, 2000.
- [24] LIMA, C; SALES, J.H, SUZUKI, A.T; Angular Tunneling Effect arXiv:1404.6129 24 Apr 2014.
- [25] OLKHOVSKY, V. S.; RECAMI, E; JACKIEL, J. Unified Time Analysis of Photon and (Nonrelativistic) Particle Tunneling, and the Superluminal group-velocity problem, arXiv:quantph/0102007v1 1 Feb 2001.
- [26] WINFUL, H. G. Tunneling time, the Hartman effect, and superluminality: A proposed resolution of an old paradox, *Phys. Rep.* 436 1-69 (2006).
- [27] JACKSON, J. D. Classical Electrodynamics. 3rd edn., Wiley, New York, 1999.