

## COEFICIENTES DE TRANSMISSÃO E REFLEXÃO PELO MÉTODO DA AMPLITUDE VARIÁVEL

Éderson D.M. Costa<sup>a</sup>, Luciano Cordeiro<sup>b</sup>, Nelson H. T. Lemes<sup>a,\*</sup> e João P. Braga<sup>c</sup><sup>a</sup>Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, 37130-000 Alfenas – MG, Brasil<sup>b</sup>Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, 13560-970 São Carlos – SP, Brasil<sup>c</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, 31270-901 Belo Horizonte – MG, Brasil

Recebido em 22/10/2015; aceito em 28/01/2016; publicado na web em 12/04/2016

TRANSMISSION AND REFLECTION COEFFICIENTS BY THE VARIABLE AMPLITUDE METHOD. In this work, a simple derivation of the variable amplitude method using the variation of parameters to solve a differential equation is presented. The variable amplitude method was originally devised by Tikochinsky in 1977, using the quantum theory of scattering. The method is applied to two model potentials, the rectangular potential barrier and the Eckart potential, both with analytical solutions for the reflection coefficient. Numerical results will be compared with the exact values for several energies. The problem of calculating the reflection coefficient, usually involving extensive algebra as described in several textbooks, is reduced to solving a first order differential equation with initial condition. The method is very simple to apply, representing an attractive tool for teaching introductory quantum mechanics. A simple computer code is available from which reflection coefficients for the Eckart potential can be calculated.

Keywords: transmission coefficient; quantum tunneling; variation of parameters.

## INTRODUÇÃO

No estudo do movimento unidimensional de uma partícula de massa  $m$  e energia  $E$ , existem duas perspectivas: tratar o problema do ponto de vista da mecânica clássica ou de acordo com a mecânica quântica. No tratamento clássico, quando não ocorre perdas de energia de qualquer forma, a partícula fica presa a uma região do espaço  $x$ , tal que sua energia potencial  $V(x)$  é sempre menor ou igual a  $E$ . Em outras palavras, a energia total é conservada,  $V(x) + mv^2/2 = E$ . Este é um dos aspectos mais fascinantes que distingue a mecânica quântica da mecânica clássica. Na teoria quântica o estado da partícula é representado por uma função  $\psi(x)$  obtida pela solução da equação de Schrödinger, cujo módulo ao quadrado  $|\psi(x)|^2 dx$  é interpretado como a probabilidade de encontrar a partícula na região  $x+dx$ . Neste caso, como a função é espalhada além do limite  $x_0$ , em que  $x_0$  satisfaz a relação  $V(x_0) = E$ , existe uma probabilidade finita de que uma partícula com energia total  $E$  penetre em uma região do espaço onde a energia total é menor que a energia potencial  $V(x)$ .

O processo, conhecido como tunelamento quântico, é de extrema relevância para explicação de várias fenômenos físicos e químicos, como o decaimento alfa,<sup>1,2</sup> a emissão de elétrons por metais frios sob a influência de um campo forte,<sup>3</sup> reações de transferência de hidrogênio, fundamentais para a compreensão do efeito isotópico cinético H/D,<sup>4,5</sup> mecanismos de transferência de elétrons<sup>6,7</sup> e inversão espectral.<sup>8,9</sup> Além disso, o tunelamento quântico é de importância para a fabricação de novos semicondutores e dispositivos eletrônicos.<sup>10</sup>

A compreensão das propriedades físicas dos sistemas requer em muitos casos a avaliação da equação unidimensional de Schrödinger para um potencial específico. No entanto, soluções analíticas são limitadas a potenciais modelos, que embora sejam úteis para a análise da situação física em questão, nem sempre representam sistemas reais. Podemos destacar o potencial degrau e o potencial barreira retangular apresentado em diversos livros-textos para introdução do assunto.<sup>11,12</sup> Exemplos de potenciais para os quais se tem soluções analíticas podem ser encontrados na referência Razavy.<sup>13</sup>

Dentre os métodos numéricos destaca-se o método da matriz

de transferência que é amplamente utilizado para cálculos de coeficientes de transmissão/reflexão.<sup>14-17</sup> O trabalho de Rozman *et al.*<sup>18</sup> destaca algumas deficiências do método, como o aumento do esforço computacional decorrente do aumento de segmentos em que o potencial é dividido e erros numéricos de arredondamento ao lidar com barreiras opacas.

Outro método, originalmente apresentado por Tikochinsky em 1977,<sup>19</sup> consiste em estabelecer uma equação diferencial de primeira ordem para a amplitude de reflexão similar a equação de Calogero.<sup>20,21</sup> A equação de Calogero relaciona o deslocamento de fase ao potencial intermolecular e tem sido utilizada na identificação de estados ligados<sup>22</sup> e no estudo do problema inverso da obtenção do potencial intermolecular a partir de dados de deslocamento de fase.<sup>23</sup> O método de Tikochinsky, *método da amplitude variável*, se aplica de forma geral a potenciais localizados e consiste de uma ferramenta simples e de fácil implementação computacional.

Nesse trabalho busca-se enfatizar a simplicidade do método proposto por Tikochinsky para cálculos de coeficientes de transmissão/reflexão. Embora, na literatura, tenha sido aplicado na maioria dos casos para potenciais com limites assintóticos  $V(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ ,<sup>24</sup> o método também é aplicável a potenciais com condições de contorno diferentes, como será discutido. Uma derivação da equação diferencial será feita por um novo caminho utilizando o método da variação dos parâmetros, uma poderosa ferramenta matemática para resolver equações diferenciais lineares não homogêneas de ordem superior. Soluções numéricas serão obtidas para coeficientes de transmissão/reflexão e comparadas com resultados analíticos para potenciais modelos.

## EQUAÇÃO DIFERENCIAL PARA A AMPLITUDE DE REFLEXÃO

Uma derivação da equação diferencial para a amplitude de reflexão, com o enfoque principalmente voltado para a física de espalhamento,<sup>25</sup> pode ser encontrada no livro de Calogero e Degasperis.<sup>26</sup> Nesta seção, diferentemente da abordagem adotada no livro citado, a equação diferencial é obtida utilizando o método da variação dos parâmetros conforme método geral apresentado no trabalho de Ronveaux.<sup>27</sup>

\*e-mail: nelson.lemes@unifal-mg.edu.br

Considerando a equação unidimensional de Schrodinger

$$\psi'' + k^2\psi = U(x)\psi, \tag{1}$$

busca-se a solução em termos das soluções particulares para o problema homogêneo associado, isto é,  $\psi_1 = e^{ikx}$  e  $\psi_2 = e^{-ikx}$ . A quantidade  $U(x)$  se relaciona com o potencial  $V(x)$  por  $U(x) = 2mV(x)/\hbar^2$  e o número de onda  $k$  se relaciona com a energia  $E$  por  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , em que  $m$  é a massa da partícula e  $\hbar$  a constante reduzida de Planck.

A solução para o problema original, Equação 1, é colocada na forma

$$\psi = A(x)\psi_1 + B(x)\psi_2, \tag{2}$$

com a suposição de que

$$A'(x)\psi_1 + B'(x)\psi_2 = 0, \tag{3}$$

que é a idéia básica do método da variação dos parâmetros.<sup>28</sup> A substituição de  $\psi$  e sua segunda derivada na Equação 1 fornece

$$A'(x)\psi_1' + B'(x)\psi_2' = U(x)[A(x)\psi_1 + B(x)\psi_2]. \tag{4}$$

As Equações 3 e 4 compõem o sistema de equações

$$\begin{aligned} A'(x)\psi_1(x) + B'(x)\psi_2(x) &= 0 \\ A'(x)\psi_1'(x) + B'(x)\psi_2'(x) &= U(x)[A(x)\psi_1 + B(x)\psi_2], \end{aligned} \tag{5}$$

ou na forma matricial  $\mathbf{W}\mathbf{X}' = \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{X}$ , na qual

$$\mathbf{W}(x) = \begin{bmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi_1'(x) & \psi_2'(x) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}'(x) = \begin{bmatrix} A'(x) \\ B'(x) \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{U}(x) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ U(x) & 0 \end{bmatrix}.$$

O vetor  $\mathbf{X}'$  é encontrado por  $\mathbf{X}' = \mathbf{M}\mathbf{X}$  com  $\mathbf{M} = \mathbf{W}^{-1}\mathbf{U}\mathbf{W}$ , isto é,

$$\begin{aligned} A'(x) &= M_{11}(x)A(x) + M_{12}(x)B(x) \\ B'(x) &= M_{21}(x)A(x) + M_{22}(x)B(x). \end{aligned} \tag{6}$$

As funções  $A(x)$  e  $B(x)$  modulam as amplitudes das funções de onda incidente e refletida, portanto, segundo a interpretação de Born, o quadrado da razão destas amplitudes, em  $x \rightarrow -\infty$ , definem a probabilidade de reflexão ou coeficiente de reflexão desejado. Assim, assumindo  $r(x)$  como  $r(x) = B(x)/A(x)$ , obtém-se a equação diferencial

$$r'(x) = M_{21}(x) + [M_{22}(x) - M_{11}(x)]r(x) - M_{12}(x)r^2(x)$$

ou

$$r'(x) = \frac{U(x)}{\det(\mathbf{W})} [\psi_1 + r(x)\psi_2]^2, \tag{7}$$

que é uma equação de Riccati,<sup>27</sup> cuja solução em  $x \rightarrow -\infty$  fornece o coeficiente de reflexão  $R = |r(x \rightarrow -\infty)|^2$ . A probabilidade de transmissão ou coeficiente de transmissão pode ser facilmente obtida da relação  $R+T = 1$ , que reflete a conservação de partículas no processo.

Neste último caso, para avaliar os elementos da matriz  $\mathbf{M}$ , calcula-se a inversa de  $\mathbf{W}$  analiticamente. A Equação 7 aplica-se na condição em que o potencial para  $x \rightarrow -\infty$  tem o valor zero. Essa

condição pode ser sempre alcançada somando-se uma constante à energia e ao potencial.

A condição inicial para resolução numérica do problema, desde que as partículas incidam sobre a barreira da esquerda para a direita, é dada por  $r_0 = r(k, x_0) = \frac{k - k_0}{k + k_0} e^{2ix_0}$ , em que  $k_0 = \sqrt{2m[E - V(x_0)]}/\hbar$  e  $x_0$  é um valor grande da coordenada. Com a substituição de  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  e do determinante  $\det(\mathbf{W}) = -2ik$  na Equação 7, tem-se o problema de valor inicial a ser resolvido,

$$\begin{aligned} r'(k, x) &= -\frac{U(x)}{2ik} [e^{ikx} + r(k, x)e^{-ikx}]^2 \\ r(k, x_0) &= \frac{k - k_0}{k + k_0} e^{2ix_0} \end{aligned} \tag{8}$$

A quantidade  $r_0$  é a amplitude de reflexão para o potencial degrau  $V(x_0)H(x - x_0)$  com  $H$  sendo a função de Heaviside. O termo é de importância para potenciais com limites assintóticos  $V_D = V(x \rightarrow +\infty) \neq 0$  para levar em conta a contribuição do potencial a direita de  $x_0$  ao se iniciar a integração nesse ponto. Para o caso em que  $V(x \rightarrow +\infty) = 0$ , não existem partículas que se deslocam para a esquerda à direita da barreira, consequentemente, a condição inicial  $r(x \rightarrow \infty)$  deve ser nula, portanto,  $r_0$  se reduz a zero para valores grandes de  $x$ .

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Devido à importância pedagógica do potencial barreira retangular, esse potencial será considerado como um primeiro exemplo. O segundo potencial abordado será o potencial de Eckart.<sup>29</sup> O potencial apresenta o limite assintótico,  $V_D \neq 0$ , o que possibilita mostrar a eficiência do método para uma condição de contorno diferente. Para os dois casos, considerou-se que a partícula incide da esquerda para a direita. A integração numérica foi realizada para valores de coordenada de 20 a -20 utilizando o método de Runge-Kutta quarta e quinta ordem com passo adaptativo.<sup>30</sup> Os cálculos foram feitos em unidades atômicas.

### Potencial barreira retangular

Um potencial contínuo que representa uma barreira pode ser estabelecido com a função,

$$V(x) = \frac{V_{\max}}{(1 + e^{-\alpha x})(1 + e^{\alpha(x-L)})}. \tag{9}$$

No limite de  $\alpha$  grande, o potencial tende ao potencial barreira retangular (Figura 1), em que  $V_{\max}$  é o máximo do potencial e  $L$  a largura da barreira.

As soluções exatas do caso limite para  $E > V_{\max}$  e  $E < V_{\max}$ , são dadas, respectivamente, por

$$r = \frac{(k^2 - \kappa^2)\sin(\kappa L)}{(k^2 + \kappa^2)\sin(\kappa L) + 2ik\kappa \cos(\kappa L)} \tag{10}$$

e

$$r = \frac{(k^2 + \bar{\kappa}^2)\sinh(\bar{\kappa} L)}{(k^2 - \bar{\kappa}^2)\sinh(\bar{\kappa} L) + 2ik\bar{\kappa} \cosh(\bar{\kappa} L)}, \tag{11}$$

com  $\kappa = \sqrt{2m(E - V_{\max})}/\hbar$  e  $\bar{\kappa} = i\kappa$ .<sup>15</sup>

A solução numérica para o coeficiente de transmissão,  $T = 1 - R$ , em que  $R = |r|^2$ , com parâmetros  $\alpha = 100$ ,  $V_{\max} = 1$  e  $L = 5$ , é apresentada na Figura 2 em comparação com as soluções exatas.

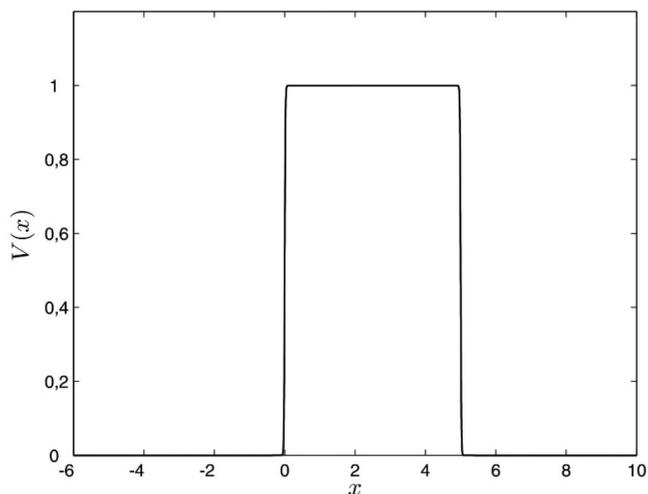


Figura 1. Aproximação para o potencial barreira retangular,  $\alpha = 100$ ,  $V_{\max} = 1$  e  $L = 5$

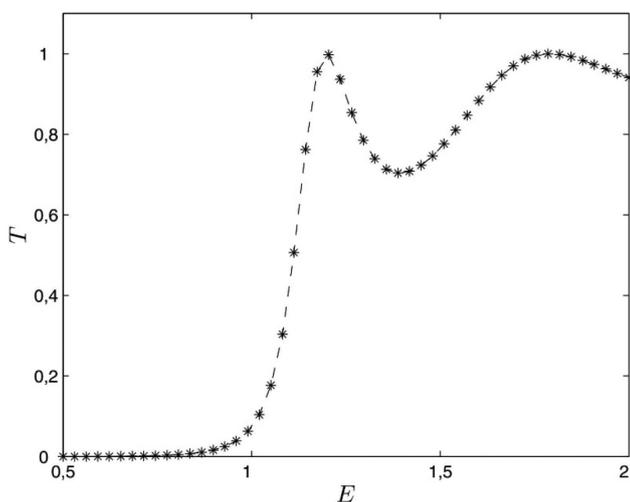


Figura 2. Coeficiente de transmissão para o potencial barreira retangular; (asteriscos) solução numérica da Eq. (8), (linha tracejada) solução analítica

O erro médio cometido é menor que 0,05%, neste caso, o erro além de ser função dos parâmetros ajustáveis do método de resolução da equação diferencial que controla a precisão, é também função do valor  $\alpha$  considerado para a aproximação. A solução correta é obtida tanto para  $E > V_{\max}$ , quanto para  $E < V_{\max}$ . Os valores de  $T > 0$  para  $E < V_{\max}$  indicam o tunelamento das partículas, isto é, mesmo que as partículas tenham energia menor que a da barreira, ainda há uma probabilidade finita de essas a atravessarem, o que classicamente não seria permitido. Também, mesmo que as partículas possuam energia maior que a da barreira,  $E > V_{\max}$ , ainda se observa  $T < 1$ , quando classicamente se esperaria  $T = 1$ .

O potencial considerado se anula assintoticamente, tanto para valores negativos, quanto para valores positivos de  $x$ , um caso com condições de contorno diferentes pode ser ilustrado com o potencial de Eckart.<sup>29</sup>

### Potencial de Eckart

O potencial de Eckart é dado pela função,<sup>13,29</sup>

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{ae^x}{1+e^x} + \frac{be^x}{(1+e^x)^2} \right], \quad (12)$$

em que  $a$  e  $b$  são parâmetros arbitrários. O potencial possui limites diferentes como função dos parâmetros e possui solução analítica para o tunelamento o que permite a comparação com os resultados numéricos. Na Figura 3 é apresentado o potencial de Eckart onde se verifica a modificação no limite  $V_D$  em função da modificação dos parâmetros.

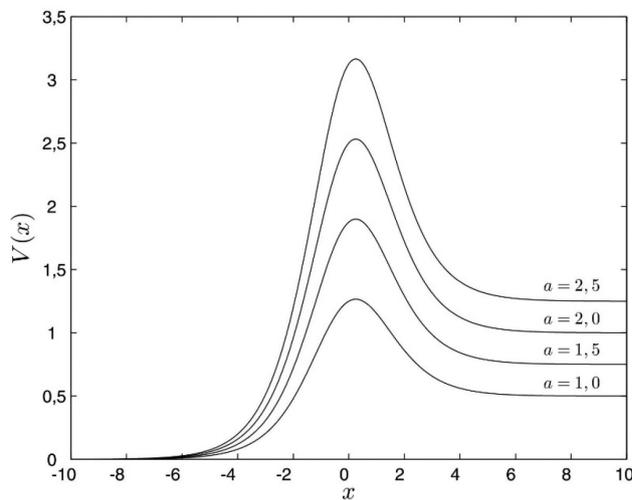


Figura 3. Potencial de Eckart para diferentes valores do parâmetro  $a$  com  $b = 8a$

A Figura 4 apresenta os coeficientes de reflexão,  $R$ , para valores de energia tomados no intervalo,  $\frac{a\hbar^2}{2m} \leq E \leq 4,5$ . Os resultados estão em comparação com a solução analítica,

$$R(k) = \frac{\cosh[2\pi(k - \beta)] + \cosh(2\pi\delta)}{\cosh[2\pi(k + \beta)] + \cosh(2\pi\delta)}, \quad (13)$$

em que  $\beta = \sqrt{k^2 - a}$  e  $\delta = \sqrt{b - 1/4}$ , apropriada para descrever o coeficiente de reflexão para  $b > 1/4$ .

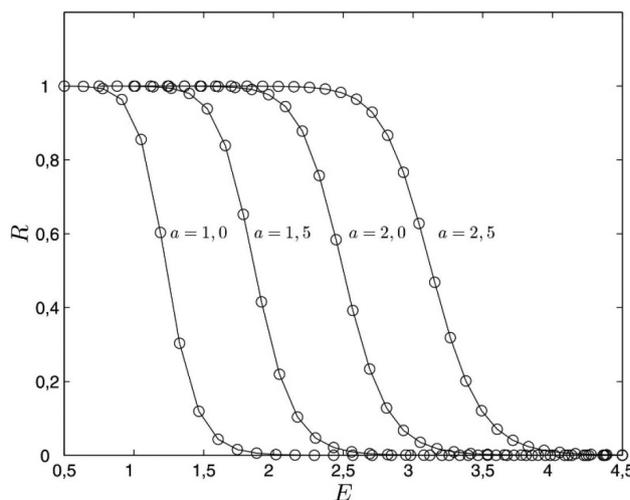


Figura 4. Coeficiente de reflexão  $R$  para o potencial de Eckart para diferentes valores de  $a$  com  $b = 8a$ , (linha contínua) exato, (círculos) solução numérica

Como se verifica, a resolução da Equação 8 leva a valores de coeficientes de reflexão corretos. O erro médio em relação à solução analítica foi de  $1,54 \times 10^{-6}\%$ . Uma das vantagens de se utilizar o método da amplitude variável é a possibilidade de utilizar técnicas de integração com passo adaptativo, o que contorna os problemas citados por Rozman et al.<sup>18</sup> no método da matriz de transferência.

## CONCLUSÃO

A abordagem pelo método da amplitude variável consiste em um caminho elementar para reduzir os cálculos dos coeficientes de transmissão ou reflexão a um problema de valor inicial, utilizando uma equação diferencial de primeira ordem. A equação diferencial pode ser resolvida pelas técnicas com passo adaptativo, o que leva a uma solução precisa com um mínimo esforço computacional. Utilizando uma condição inicial adequada o método torna-se aplicável de maneira geral a potenciais localizados com diferentes condições de contorno. O método aqui apresentado pode ser adaptado para o cálculo da matriz de espalhamento e versões em mais de uma dimensão devem ser investigadas.

De simples implementação computacional, o método representa uma ferramenta atrativa para compreender os processos de tunelamento para os mais diversos potenciais. A exemplo da equação de Calogero, a equação diferencial para a amplitude de reflexão pode ser utilizada para estudar o problema inverso de recuperação do potencial a partir de dados de coeficiente de transmissão ou reflexão.

## MATERIAL SUPLEMENTAR

Um exemplo de código para cálculos de coeficiente de reflexão desenvolvido em MATLAB está disponível como material suplementar em <http://quimicanova.s bq.org.br>, com acesso livre.

## AGRADECIMENTOS

Gostaríamos de agradecer à CAPES, ao CNPq e à Fapemig pelo suporte financeiro.

## REFERÊNCIAS

- Gamow, G.; *Z. Phys.* **1928**, *51*, 204.
- Gurney, R. W.; Condon, E. U.; *Phys. Rev.* **1929**, *33*, 127.
- Fowler, R. W.; Nordheim, L.; *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **1928**, *119*, 173.
- Bell, R. P.; *The Tunnel Effect in Chemistry*, Chapman and Hall: London, 1980.
- Johnston, H. S.; Rapp, D.; *J. Am. Chem. Soc.* **1961**, *83*, 1.
- Levich, V. G.; Dogonadze, R. R.; *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **1960**, *133*, 158.
- Marcus, R. A.; *J. Chem. Phys.* **1966**, *45*, 4493.
- Khairutdinov, R. F.; Zamaraev, K. I.; Zhdanov, V. P. Em *Comprehensive Chemical Kinetics*; Compton, R. G., eds.; Elsevier: Amsterdam, 1989, vol. 30.
- Tserkis, S. T.; Moustakidis, Ch. C.; Massen, S. E.; Panos, C. P.; *Phys. Lett. A* **2014**, *378*, 497.
- Johnson, E. A. Em *Low-Dimensional semiconductor structures*; Barnham, K., Vvedensky, D., eds.; Cambridge Univ. Press: Cambridge, 2001, cap. 2.
- Powell, J. L.; Crasemann, B.; *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley: Massachusetts, 1961.
- Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F.; *Quantum Mechanics*, Wiley: New York, 1977, vol. 1.
- Razavy, M.; *Quantum Theory of Tunneling*, World Scientific: New Jersey, 2003.
- Vatannia S.; Gildenblat, G.; *IEEE J. Quantum Electron.* **1996**, *32*, 1093.
- Sanchez-Soto, L. L.; Monzona, J. J.; Barriuso, A. G.; Carinena, J. F.; *Phys. Rep.* **2012**, *513*, 191.
- Mukherjee, S.; Karmakar, R.; Deyasi, A.; *International Journal of Soft Computing and Engineering* **2011**, *1*, 41.
- Das, S.; *Am. J. Phys.* **2015**, *83*, 590.
- Rozman, M. G.; Reineker, P.; Tehver, R.; *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.* **1994**, *49*, 3310.
- Tikochinsky, Y.; *Ann. Phys.* **1977**, *103*, 185.
- Viterbo, V. D.; Lemes, N. H. T.; Braga, J. P.; *Rev. Bras. Ensino Fis.* **2014**, *36*, 1310.
- Calogero, F.; *Variable phase approach to potential scattering*, Academic Press: New York, 1967.
- Braga, J. P.; Murrell, J. N.; *Mol. Phys.* **1984**, *53*, 295.
- Lemes, N. H. T.; Braga, J. P.; Alves, M. O.; Costa, É. D'M.; *J. Mol. Model.* **2014**, *20*, 2317.
- Kidun, O.; Fominykh, N.; Berakdar, J.; *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.* **2005**, *71*, 022703.
- Pliego Jr., J. R.; Braga, J. P.; Bosanac, S. D.; *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.* **1995**, *53*, 342.
- Calogero, F.; Degasperis, A. Em *Studies in Mathematics and its Applications*; Lions, J. L., Papanicolaou, G., Rockafeliar, R. T., Fujita, H., eds.; North-Holland: Amsterdam, 1982, vol. 13.
- Ronveaux, A.; *Am. J. Phys.* **1969**, *37*, 135.
- Zill, D. G.; Cullen, M. S.; *Equações Diferenciais*, Makron Books: São Paulo, 2007.
- Eckart, C.; *Phys. Rev.* **1930**, *35*, 1303.
- Forsythe, G. E.; Malcolm, M. A.; Moler, C. B.; *Computer Methods for Mathematical Computations*, Prentice Hall: New Jersey, 1977.