



Ministério da Educação – Brasil
Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri – UFVJM
Minas Gerais – Brasil
Revista Vozes dos Vales: Publicações Acadêmicas
Reg.: 120.2.095 – 2011 – UFVJM
ISSN: 2238-6424
QUALIS/CAPEs – LATINDEX
Nº. 14 – Ano VII – 10/2018
<http://www.ufvjm.edu.br/vozes>

O poço de potencial quântico infinito: um estudo usando o método de fatorização

Prof. Dr. Geraldo Moreira da Rocha Filho
Doutor em Física pela Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG – Brasil.
Docente do Instituto, Ciência Engenharia e Tecnologia
Teófilo Otoni – ICET - MG - Brasil
<http://lattes.cnpq.br/2334418891428281>
E-mail: geraldo.rocha@ufvjm.edu.br

Prof. Dr. Carlos Henrique Alexandrino
Doutor em Geofísica pelo Observatório Nacional – ON – Rio de Janeiro/RJ – Brasil.
Docente do Instituto, Ciência Engenharia e Tecnologia
Teófilo Otoni – ICET - MG - Brasil
<http://lattes.cnpq.br/2606412388376202>
E-mail: carlos.alexandrino@ufvjm.edu.br

Prof. Dr. Stênio Cavalier Cabral
Doutor em Engenharia e Ciência dos Materiais – Universidade Estadual do Norte
Fluminense Darcy Ribeiro - RJ – Brasil
Docente do Curso de Engenharia Civil da UFVJM
<http://lattes.cnpq.br/2452889693767673>
E-mail: stenio.cavalier@ufvjm.edu.br

Resumo: O artigo demonstra uma maneira alternativa, através do método de fatorização, para determinar as auto-funções e os autovalores de energia para o sistema constituído de uma partícula sujeita a um poço de potencial quântico infinito. O poço de potencial infinito é muito explorado em estudos iniciais de mecânica quântica e se mostra bastante útil para descrever sistemas confinados.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger, Método de Fatorização, Potencial Quadrado Infinito, Equação de Ricatti, Auto-funções.

Introdução

Uma partícula sujeita ao poço de potencial quântico infinito unidimensional é um problema bastante explorado em livros textos de mecânica quântica. Segundo Freitas, Veigas e Drigo Filho (FREITAS *et all*, 2010), nesse sistema é possível observar várias propriedades importantes para sistemas quânticos, por exemplo, a discretização e a quantização da energia. Ele também é útil para descrever partículas confinadas. Ando e Fowler (ANDO e FOWLER, 1982) salientam que em termos experimentais, a melhoria das técnicas de crescimento de cristais tais como a Epitaxia por Feixe Molecular (BEM), torna possível fabricar estruturas semicondutoras geralmente constituídas de GaAs (arsenato de gálio) através do confinamento de elétrons em poços de potencial quadrados. Outra aplicação para esse potencial consiste em descrever um elétron numa molécula linear de acetileno ($\text{H-C}\equiv\text{C-H}$).

Segundo Santos e Tomazelli (SANTOS e TOMAZELLI, 2010), na Física, quando elaboramos modelos que visam descrever o comportamento de sistemas, frequentemente recaímos em equações cuja incógnita é uma função que aparece sob a forma de derivadas de ordem 1; 2; ...N. Tais tipos de equações são as chamadas equações diferenciais (ED'S). Recebem a denominação de equação diferencial parcial (EDP) quando a solução da equação for uma função de várias variáveis ou equação diferencial ordinária (EDO) quando a solução da equação depender explicitamente de apenas uma variável.

Além disso, conhecendo as condições iniciais e/ou as condições de contorno do problema físico em questão (SANTOS e TOMAZELLI, 2010), podemos determinar a variação das propriedades estudadas e consequentemente fazer previsões que possam ser verificadas experimentalmente. Entretanto, para esse fim, necessitamos, antes de tudo, resolver a equação diferencial correspondente. Neste ponto começam surgir dificuldades, pois existem muitas ED'S que não possuem solução analítica e algumas de difícil solução, por não satisfazerem ao Teorema de Existência e Unicidade, restrito a classe das ED'S lineares (BOYCE e DI PRIMA, 1994).

De modo geral (FREITAS *et all*, 2010), o problema do poço de potencial quântico infinito é tratado em livros de mecânica quântica (GASIOROWICZ, 1996);

(SCHIFT, 1955), resolvendo diretamente a equação de Schrödinger. Ou seja, determinando as autofunções através da resolução direta dessa equação diferencial de segunda ordem. Os autovalores de energia também são determinados analiticamente pela condição de normalização dessas mesmas autofunções. No presente artigo é proposto o uso do método de fatorização para a solução desse problema. Como esperado, os resultados são análogos àqueles obtidos por outros métodos.

De acordo com Schrödinger (1940), o método de fatorização consiste em fatorizar o operador hamiltoniano, passando a analisar uma equação diferencial de primeira ordem ao invés de uma de segunda ordem. Alguns sistemas já foram estudados através dessa abordagem, por exemplo, o oscilador harmônico (SCHRÖEDINGER, 1940), e o poço de potencial quadrado finito (FREITAS *et al*, 2010). No entanto, apesar da simplicidade matemática, o poço de potencial quântico infinito não tem sido tratado dessa maneira.

Desta forma, o objetivo do trabalho é apresentar uma maneira alternativa de resolver a equação de Schrödinger (uma equação diferencial de segunda ordem). Em que passamos a resolver uma equação diferencial de primeira ordem depois de aplicarmos o método de fatorização.

O presente artigo está dividido nas seguintes seções. Na seção 2, o método de fatorização é apresentado. Na seção 3, o problema específico da partícula confinada em um poço de potencial infinito é analisado e a solução geral da equação de Schrödinger é apresentada. Alguns resultados numéricos são também exibidos nessa seção. Na seção 4 temos uma breve discussão dos resultados do nosso método. . Finalmente, na seção 5, as considerações finais do nosso trabalho são indicadas.

2. O método de fatorização

Segundo Freitas, Veigas e Drigo Filho (FREITAS *et al*, 2010), o método de fatorização foi introduzido por Schrödinger (SCHRODINGER, 1940). Uma revisão recente sobre o tema pode ser encontrada em Rosas-Ortiz (ROSAS-ORTIZ, 1998). Esse método consiste em fatorizar operadores diferenciais de segunda ordem.

Também, de acordo com Freitas, Veigas e Drigo Filho (FREITAS *et al*, 2010), este método pode ser utilizado para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo e determinar os autovalores de energias para sistemas quânticos. Essa equação em uma dimensão (FREITAS *et al*, 2010) é escrita da seguinte forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = \varepsilon \psi(x) \quad (1)$$

Sendo que $V(x)$ representa o potencial, $\psi(x)$ a autofunção e ε o autovalor de energia. Por simplicidade, adota-se $\hbar = 2m = 1$. O lado esquerdo da equação compreende o produto do operador hamiltoniano H pela função $\psi(x)$. Outra maneira de se escrever a equação (1) é:

$$H \psi(x) = \varepsilon \psi(x). \quad (2)$$

Quando o método de fatorização é utilizado para obter soluções da equação de Schroedinger, o hamiltoniano é substituído pela combinação de dois operadores diferenciais de primeira ordem. Assim, dado um operador diferencial de segunda ordem, o objetivo do método é encontrar dois operadores

$$A = \frac{d}{dx} + \beta(x) \quad e \quad A^\tau = -\frac{d}{dx} + \beta(x), \quad (3)$$

tal que o hamiltoniano possa ser escrito como

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = A^\tau A + \varepsilon. \quad (4)$$

Onde ε é a energia de fatorização. Substituindo a equação (3) na equação (4), tem-se a seguinte equação de Ricatti

$$\beta^2(x) - \beta'(x) + \varepsilon = V(x), \quad (5)$$

onde $\beta'(x)$ é a derivada de primeira ordem da função $\beta(x)$. Uma vez encontrada a solução da equação (5), a função $\beta(x)$ leva às autofunções (ROSAS-ORTIZ, 1998); (BOROWITZ, 1967) através de

$$\psi(x) \propto e^{-\int_x \beta(y) dy}, \quad (6)$$

3. O poço de potencial quântico infinito

O poço de largura a , representado graficamente através da Figura 1, possui o potencial a ser analisado descrito da seguinte forma,

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & \text{se } x < -a/2 \\ 0, & \text{se } -a/2 < x < a/2, \\ +\infty, & \text{se } x > a/2 \end{cases} \quad (7)$$

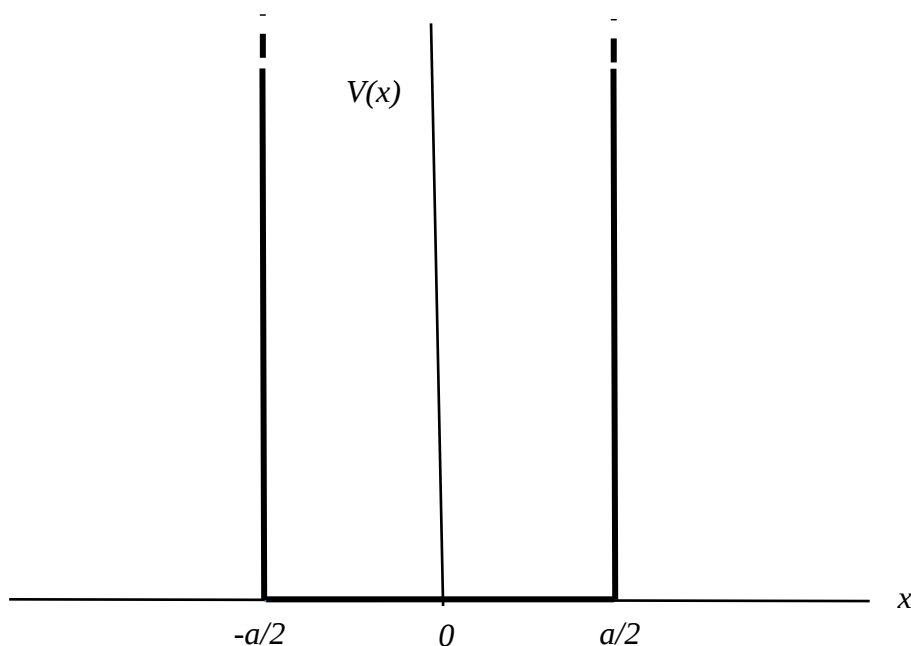


Figura 1: Representação gráfica para o potencial quântico infinito. Fonte: próprios autores, 2018.

Neste problema algumas condições sobre a auto-função tem que ser consideradas: especificamente a autofunção deve ser contínua $x = -a/2$ e $x = a/2$. Entretanto, a derivada da função de onda é descontínua em $x = -a/2$ e $x = a/2$, pois, o potencial é infinito nesses pontos. Além disso, para que as funções de onda sejam normalizáveis é necessário que a condição:

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \psi(x) = 0 \quad (8)$$

seja satisfeita.

3.1 Cálculo das auto-funções e níveis de energia

Para $x > a/2$ ou $x < -a/2$ o hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + \infty, \quad (9)$$

que fatorizado reduz à seguinte equação de Ricatti

$$\beta^2(x) - \beta'(x) + \varepsilon = +\infty, \quad (10)$$

As soluções da equação (10) que satisfazem as condições de contorno (8) do problema são

$$\begin{cases} \beta(x) = +\infty, & \text{se } x > a/2 \\ \beta(x) = +\infty, & \text{se } x < -a/2, \end{cases} \quad (11)$$

e

$$\varepsilon = +\infty \quad (12).$$

Desta forma, as auto-funções que são obtidas substituindo a equação (11) na equação (6) são dadas por

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < -a/2 \\ 0, & \text{se } x > a/2. \end{cases} \quad (13)$$

O valor de energia de fatorização, ε , é também conhecido como autovalor de energia. O resultado (equação 13) indica que a probabilidade de encontrarmos a partícula fora do poço é necessariamente nula. Pois precisaríamos de uma energia infinita (equação 12) para encontrar a partícula fora do poço. Desta forma a partícula não pode ser encontrada na região externa do poço, ela deve ficar confinada na região $-a/2 < x < a/2$ (dentro do poço). Assim, a função de onda terá de ser nula na região externa (equação 13).

Devemos informar que nos livros textos (EISBERG e RESNICK, 1979); (YOUNG e FREEDMAN, 2009), as soluções para as regiões externas do poço, não são obtidas através da resolução da equação de Schroedinger. Elas são simplesmente impostas através de argumentos físicos. No método utilizado em nosso trabalho chegamos às mesmas soluções resolvendo as equações (5) e (6), respectivamente.

Para o caso em que $-a/2 < x < a/2$ (FREITAS *et al*, 2010) o potencial se anula e o hamiltoniano do sistema se resume a

$$H = -\frac{d^2}{dx^2}. \quad (14)$$

Assim a fatorização da equação (14) fornece a seguinte equação de Ricatti

$$\beta^2(x) - \beta'(x) + \varepsilon = 0, \quad (15)$$

cujas soluções possíveis, que satisfazem as condições de continuidade, são

$$\beta(x) = k \tan(kx) \quad \text{e} \quad \beta(x) = -k \cot g(kx), \quad (16)$$

com k constante e

$$\varepsilon = k^2. \quad (17)$$

As autofunções de onda correspondentes, obtidas ao substituirmos a equação (16) na equação (6) são dadas por:

$$\psi(x) = A \cos(kx), \quad (18)$$

e

$$\psi(x) = B \sin(kx). \quad (19)$$

Onde A e B são constantes. As funções de onda descritas pela equação (18) são de paridade par. As funções de onda descritas pela equação (19) são de paridade ímpar.

Como a autofunção deve ser contínua em $x = \pm a/2$: $\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0$, a função $\beta'(x)$ deve ser também contínua em $x = \pm a/2$ (vide equação 6). Assim obtemos o seguinte,

$$A \cos(-ka/2) = A \cos(ka/2) = 0, \quad (20)$$

Por causa desta condição, os valores possíveis de k são aqueles para os quais ka é

$$\text{um múltiplo ímpar de } \pi, \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (21)$$

E usando a equação (19),

$$B \sin(-ka/2) = B \sin(ka/2) = 0, \quad (22)$$

e novamente por causa desta condição, os valores possíveis de k são aqueles para os quais ka é um múltiplo par de π ,

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (23)$$

A solução com $n = 0$ não é possível, já que levaria a $\psi(x) = 0$ para todo x . Também é necessário frisar que não é necessário considerar valores negativos de n , já que levam às mesmas soluções do que os positivos, sendo possível verificar com facilidade.

As equações (17), (21) e (23), definem os seguintes valores possíveis para a energia, ε_n ,

$$\varepsilon_n = \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 = \frac{n^2 \pi^2}{a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (24)$$

Ou seja, a energia é quantizada.

Aplicando a condição de normalização das auto-funções de onda,

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\psi_n(x)|^2 dx = 1, \quad (25)$$

para as equações (18) e (19), chegamos as seguintes funções de onda associadas a cada valor de k_n ,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{a} x\right), \quad (26)$$

e

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a} x\right). \quad (27)$$

Com $A = B = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

Na Figura 2 estão representados os três primeiros níveis de energia do poço de potencial infinito. A energia do estado de menor energia, também conhecido

como estado fundamental vale $\varepsilon_1 = \frac{\pi^2}{a^2}$. Observa-se que as energias dos estados aumentam em forma quadrática com o valor de n . Nota-se que, como existe apenas uma função de onda para uma dada energia, esses níveis de energia são chamados *não degenerados*.

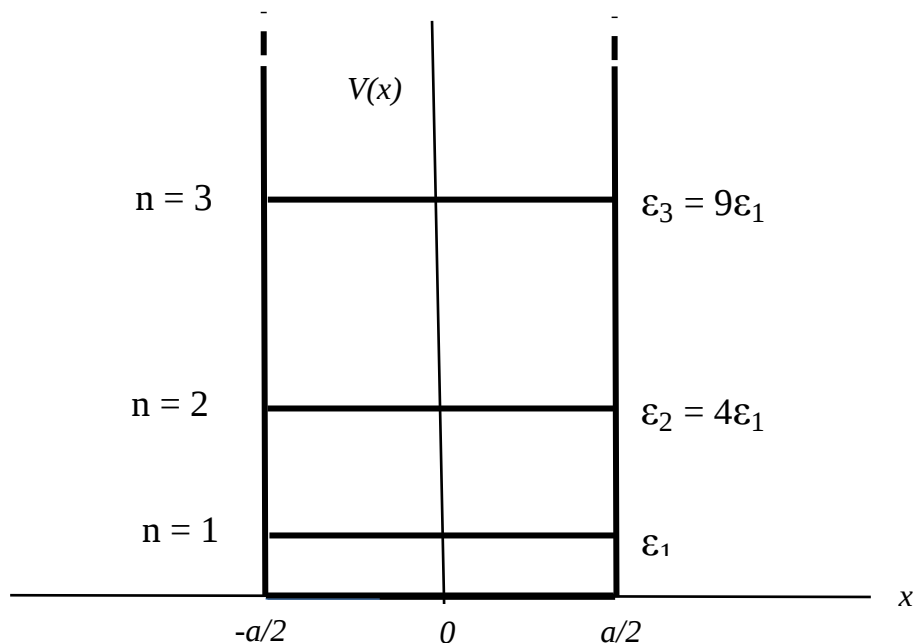


Figura 2: os três primeiros níveis de energia do poço de potencial infinito.

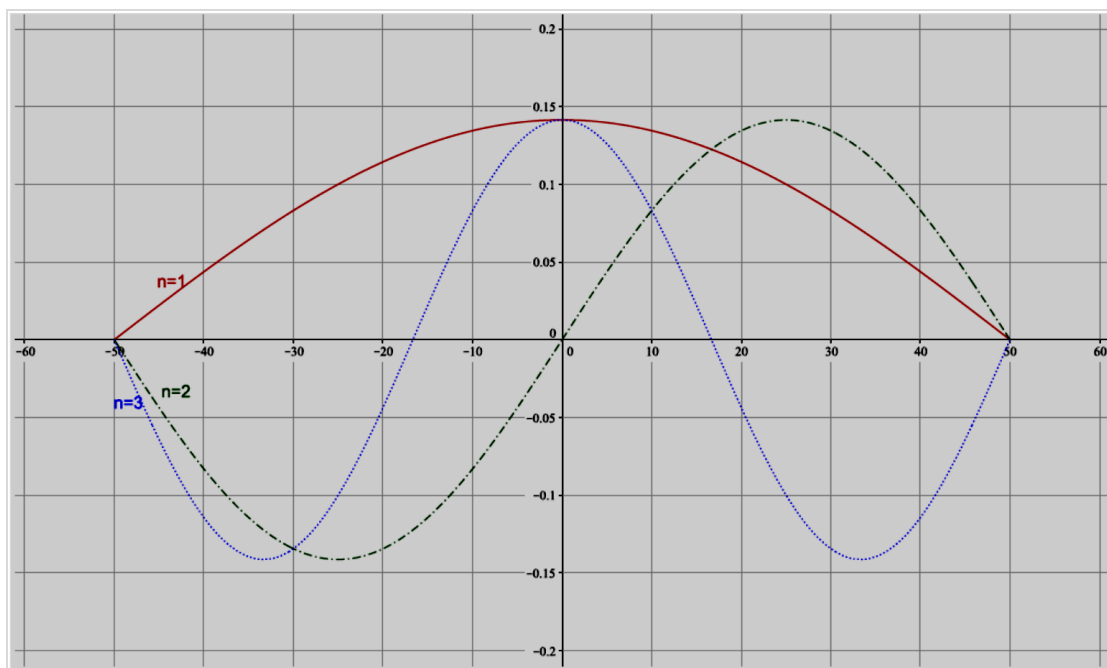


Figura 3: as funções de onda do poço quadrado infinito no caso $a = 100$, para $n = 1, 2, 3$.

Na Figura 3 estão mostradas as funções de onda correspondentes aos três estados de energia mais baixa do poço infinito. Observa-se que a autofunção do

estado fundamental ($n=1$) não possui zeros, ou seja, não corta o eixo das abcissas, a do primeiro estado excitado ($n=2$) possui apenas um zero e a do segundo estado excitado ($n=3$) possui dois zeros. Esses resultados (Figuras 2 e 3) podem ser comparados aos de Donangelo e Capaz (DONANGELO e CAPAZ, 2009).

4. Discussão dos resultados

Neste presente trabalho reproduzimos alguns resultados que se encontram na literatura da equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao poço de potencial quântico infinito unidimensional. Nosso intuito maior foi empregar o método de fatorização que consistiu em fatorizar equação de Schrödinger (equação diferencial de segunda ordem), passando com isso, a analisarmos uma equação diferencial de primeira ordem para obtermos as auto-funções de onda do sistema.

Essa equação de primeira ordem é chamada equação de Ricatti (ARAÚJO *et al*, 2016). A resolução dessa equação depende do potencial $V(x)$ que aparece na equação (5). Desta forma, dependendo do sistema físico (valor de $V(x)$) em análise, a equação (5) se transforma numa equação diferencial de primeira ordem não linear que não tem solução analítica.

Assim o método apresentado neste artigo (método de fatorização) torna-se inviável. E a resolução direta da equação de segunda ordem de Schrödinger continua a ser o melhor negócio.

5. Considerações Finais

O principal assunto tratado nesse artigo foi o uso do método de fatorização para a resolução da equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao poço de potencial quântico infinito unidimensional.

Na equação (24) temos os possíveis valores para a energia da partícula dentro do poço. Os resultados obtidos aqui podem ser comparados aos de Donangelo e Capaz 2009.

É importante salientar também que existem outras funções que satisfazem a equação (15), entretanto, elas violam as condições de contorno e, portanto, não podem ser consideradas. Nesse artigo só foram apresentadas funções que possuem

significado físico, ou seja, aquelas que não violam as condições de contorno e que permitem a continuidade das autofunções.

O método de fatorização tem uma importância grande na resolução de determinados tipos de equações diferenciais que permeiam a Física e a Matemática. Recentemente, ele foi utilizado como ferramenta principal em problemas de supersimetria aplicada à Mecânica Quântica (KHARE e SUKHATME, 2006); (DRIGO, 2009). Este formalismo é empregado com sucesso na solução da equação de Schrödinger para diversos tipos de potenciais e consiste de sucessivas fatorizações.

De um modo geral concluímos que as principais contribuições do método empregado neste trabalho, são os resultados obtidos quantitativamente e/ou analiticamente para a auto-função (equação 13) e o auto-valor de energia (equação 12) para a região fora do poço de potencial quântico infinito unidimensional. Esses cálculos não são realizados em nenhuma referência. E também, apesar do modelo físico e da estrutura matemática do sistema apresentado aqui, conclui-se que ele pode ser usado como um bom exemplo didático para introduzir o método de fatorização no estudo da equação de Schrödinger.

Referências

ANDO T.; FOWLER A. B. Rev. Mod. Phys. 54, 437, 1982.

SANTOS, L. C. N. Método de operadores em Mecânica quântica. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 59 p, 2010.

BOYCE, Willian E. e DI PRIMA, Richard C. Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno. Trad. Horácio Macedo. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos – LTC, 1994.

GASIOROWICZ, S. Quantum Physics. Nova Iorque: John Wiley, 1996.

SCHIFF L. I. *Quantum Mechanics*. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1955.

SCHRÖDINGER E. Proc. Roy. Iricsh Acad. A 46, 9, 1940.

FREITAS, G. B.; VEIGAS, R. G.; DRIGO FILHO E. Poço quântico finito e método de fatorização. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 32, n. 1, pp. 1502-1506, 2010.

EISBERG R.; RESNICK R. Física Quântica. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.

YOUNG D. H.; FREEDMAN R. A. Ótica e Física Moderna. 12 ed. São Paulo: Addison Wesley, v. 4, 2009.

ROSAS-ORTIZ J. O. J. Phys. A: Math. Gen. 31, 10163, 1998.

DONANGELO R. J. ; CAPAZ R. B. Introdução à Mecânica Quântica. Fundação Cecierj/Consórcio Cederj. Rio de Janeiro, v. 2, 2009.

KHARE A.; SUKHATME U. J. Math. Phys. 47, 062103, 2006.

DRIGO FILHO E. Supersimetria Aplicada à Mecânica Quântica. São Paulo: Editora Unesp, 2009.

ARAÚJO, J. C.; MÁRQUEZ, R. G.; HUAROTO, Y. A. R. Equações diferenciais ordinárias: teoria básica e aplicações com o uso do Maple. Joinville: Ed. Clube de Autores, 2016.

Processo de Avaliação por Pares: *Blind Review*

Publicado na Revista Vozes dos Vales - www.ufvjm.edu.br/vozes em: 10/2018

Revista Científica Vozes dos Vales - UFVJM - Minas Gerais - Brasil

www.ufvjm.edu.br/vozes

www.facebook.com/revistavozesdosvales

UFVJM: 120.2.095-2011 - QUALIS/CAPES - LATINDEX: 22524 - ISSN: 2238-6424

Periódico Científico Eletrônico Multidisciplinar - UFVJM