FLUXO DE POLOS EM POÇOS QUADRADOS

Alana S. Santos (PIBIC/PIBIC/CNPq), Fabiano M. Andrade (Orientador),
email: fmandrade@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/ Departamento de Matemática e Estatística

Física, Física Clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos

Palavras-chave:
Estados ligados, funções de Green, polos.

Resumo

O objetivo deste projeto é estudar detalhadamente as soluções para o poço de potencial quadrado através da construção da função de Green. A partir das soluções, é usado um método numérico para encontrar os autovalores de energia. Para melhor compreensão do sistema, foi variado os parâmetros que caracterizam o poço, a fim de avaliar o comportamento das energias com tais mudanças.

Introdução

O poço de potencial quadrado é um dos sistemas de potenciais mais simples na mecânica quântica onde podemos estudar a quantização de energia devido ao confinamento da mesma em uma região limitada do espaço [1]. Neste trabalho é apresentado um método de solução através da construção da função de Green.

A função de Green $G_{f,i}$ pode ser interpretada como uma amplitude de probabilidade para uma partícula que se encontra inicialmente no ponto $\boldsymbol{x_i}$ e se move para o ponto $\boldsymbol{x_f}$ para uma energia fixa. A função de Green semiclássica generalizada é dada por

$$G_{f,i} = \frac{m}{i\hbar^2\sqrt{k_f k_i}} \sum W_{sp} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{sp}(x_f, x_i; E)\right] \quad (1)$$

onde W_{sp} é a amplitude e S_{sp} é a ação clássica. A soma acima é realizada sobre todos os caminhos de espalhamento que começam em x_i e terminam em x_f. As amplitudes W_{sp} estão relacionadas aos efeitos quânticos locais através das amplitudes de reflexão e transmissão do potencial. Para o caso do poço quadrado estes são as amplitudes de reflexões $R_j^{\pm}$. O número de onda em cada região é $k = \sqrt{2m[E - V(x)]/\hbar}$. Os autovalores são obtidos a partir dos polos da função de Green [2].

Materiais e Métodos

O potencial quadrado simples é definido matematicamente como

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| > a \\ 0, & -a < x < a \end{cases} \quad (2)$$

o qual é mostrado na Figura 1. Estamos interessados na função de Green para o caso onde $E < V_0$. Os autovalores serão obtidos a partir dos polos da função de Green e as autofunções a partir de seus respectivos resíduos. Podemos escrever nove tipos diferentes da função de Green para o problema, contudo, analisamos apenas três situações relevantes: (1) $x_1 < x_i < x_2$ e $x_f < x_1$; (2) $x_1 < x_i,\ x_f < x_2$; e (3) $x_1 < x_i < x_2$ e $x_f > x_2$. As outras seis funções podem ser obtidas por simetria dos três casos acima.

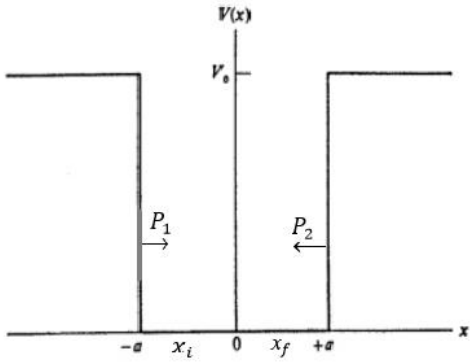


Figura 1: Poço de potencial quadrado com as famílias de caminhos P_1 e P_2.

O método utilizado para somar todos os caminhos possíveis é através de classificação de famílias de caminhos. Considerando a situação (2) onde a partícula está dentro do poço, começando o caminho de x_i ela pode (a) ir para a direita e chegar em x_f; ou (b) ir para esquerda, acertar o potencial V_0 em $-a$ sendo refletido. Há uma família com uma infinidade de caminhos para a partícula em $-a$, identificamos essa família como P_1; e (c) a partícula vai para a direita, atinge o potencial V_0 em a sendo refletida. Da mesma forma, existe uma família com infinitos caminhos para a partícula em a, identificamos essas famílias como P_2. Na Figura 1 está esquematizado P_1 e P_2. Assim, pela prescrição acima, a função de Green pode ser escrita como

$$G_{f,i}^{(2)} = \frac{m}{ik_2\hbar^2}\left[e^{ik(x_f-x_i)} + e^{ik(a-x_i)}R_{(a)}^{(+)}P_2 + e^{-ik(-a-x_i)}R_{(-a)}^{(-)}P_1\right] \qquad (3)$$

A família P_1 possui duas contribuições: (a) vai para a direita e chega em x_f; e (b) vai para a direita, atinge o potencial V_0 em a e é refletido seguindo pela família P_2. Da mesma forma, a família P_2 possui duas contribuições: (a) vai para a esquerda e chega em x_f; e (b) vai para a esquerda, atinge o potencial V_0 em $-a$ e é refletido seguindo pela família P_1. Portanto,

$$\begin{cases} P_1 = e^{ik(x_f+a)} + e^{2ika}R_{(a)}^{(+)}P_2 \\ P_2 = e^{ik(x_f-a)} + e^{2ika}R_{(-a)}^{(-)}P_1 \end{cases}$$

Resolvendo o sistema para P_1 e P_2, temos

$$P_1 = \frac{1}{f_{aw}}\left[e^{ik(x_f+a)} + R_{(a)}^{(+)}e^{2ika}e^{ik(a-x_f)}\right] \qquad (4a)$$

$$P_2 = \frac{1}{f_{aw}}\left[e^{ik(a-x_f)} + R_{(-a)}^{(-)}e^{2ika}e^{ik(x_f+a)}\right] \qquad (4b)$$

onde $f_{aw} = 1 - R_{(-a)}^{(-)}R_{(a)}^{(+)}e^{4ika}$. Substituindo as equações (4a) e (4b) na equação (3), obtemos

$$G_{f,i}^{(2)} = \frac{m}{ik\hbar^2 f_{aw}}\left[e^{ik(x_f+a)} + R_{(a)}^{(+)}e^{2ika}e^{ik(a-x_f)}\right] \times \left[e^{-ik(x_i+a)} + R_{(-a)}^{(-)}e^{2ika}e^{-ik(a-x_i)}\right] \quad (5)$$

Os outros dois casos são obtidos de maneira semelhante. Por exemplo, para o caso (1) encontramos

$$G_{f,i}^{(1)} = \frac{m}{i\sqrt{k_0 k}\hbar^2 f_{aw}} T_{(-a)}^{(-)}e^{-ik_0(x_f+a)} \times \left[e^{-ik(x_i+a)} + R_{(+a)}^{(+)}e^{2ika}e^{-ik(a-x_i)}\right] \quad (6)$$

e para o caso (3), encontramos

$$G_{f,i}^{(3)} = \frac{m}{i\sqrt{k_0 k}\hbar^2 f_{aw}} T_{(a)}^{(+)}e^{ik_0(x_f-a)} \times \left[e^{ik(a-x_i)} + R_{(-a)}^{(-)}e^{2ika}e^{-ik(-a-x_i)}\right] \quad (7)$$

Como mencionado anteriormente, os estados ligados são calculados a partir dos polos das funções de Green em (5), (6) e (7). Seus polos $E_n = \hbar^2 k_n^2/2m$ estão contidos no termo $1/f_{aw}$. Eles são calculados a partir de $f_{aw} = 0$. Pela simetria do potencial, as amplitudes de reflexões são iguais e são dadas por

$$R_{(-a)}^{(-)} = R_{(a)}^{(+)} = \frac{k-k_0}{k+k_0}$$

onde $k_0 = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$. Assim, a partir do polo, encontramos a seguinte equação transcendental

$$\left[\frac{k_n - k_0^n}{k_n + k_0^n}\right]^2 e^{4ik_n a} = 1 \quad (8)$$

Para resolver a equação transcendental (8), usamos o programa Mathematica, primeiramente com um método gráfico e posteriormente um método numérico.

Resultados e Discussão

Para obter os gráficos, definimos alguns parâmetros, tais como: a largura do poço igual a 2, ou seja $a = 1$, a constante $\hbar = 1$, a massa da partícula como $m = 1$ e um parâmetro $c = k_0 a$, que controla o tamanho do poço. Poderíamos usar os valores reais de cada parâmetro, porém, todos eles são de escala atômica, então, por simplicidade, usamos os valores mencionados.

Para melhor compreensão do sistema, realizamos a variação da área do poço para analisar como a energia se comporta com tais mudanças. A variação do tamanho do poço por meio da fixação da largura a e deixando a profundidade V_0 do poço variar. Com os mesmos parâmetros citados acima, porém deslocando o eixo x para o topo do poço (a altura do poço se torna $-V_0$) e fazendo V_0 variar de $k_0 = 1$ até $k_0 = 20$, obtemos a Figura 2.

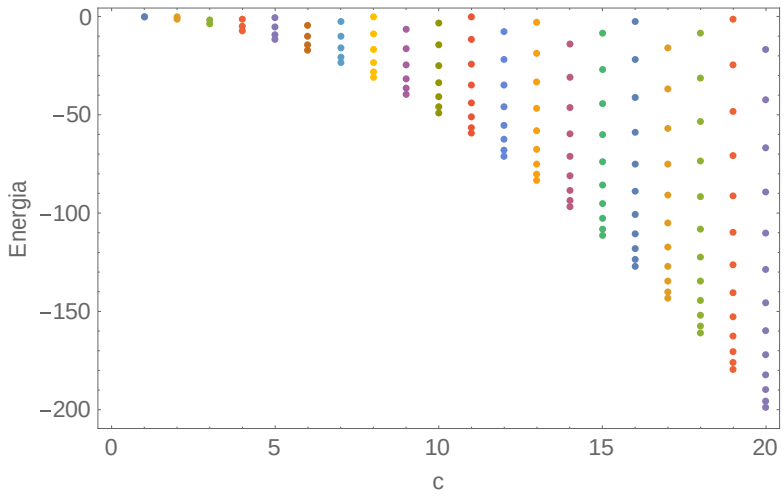


Figura 2: Autovalores de energia em função da área do poço através da função de Green.

Na Figura 2, fica claro o conceito de quantização de energia, pois podemos perceber que a energia só pode assumir valores discretos em escala microscópica. É possível observar que a medida em que o tamanho do poço aumenta, o número de níveis de energia possíveis aumentam também. Isto é, para poços grandes (escalas macroscópicas), o sistema possui muitos niveis de energia gerando a aparência de uma energia contínua, como esperado pela teoria clássica.

Conclusões

O poço quadrado pertence a uma classe bastante simples de potenciais em mecânica quântica a partir do qual é possível entender a quantização de energia de maneira clara, uma vez que, como visto na Figura 2, a energia não pode mais ser considerada contínua, como a física clássica ensina, mas só pode assumir valores discretos que vão depender dos parâmetros do sistema. Foi possível estudar a função de Green detalhadamente, entendendo cada passo de solução e como obter os autovalores de energia a partir das soluções encontradas.

Agradecimentos

Agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro para a realização deste projeto e ao professor Fabiano Manoel de Andrade pela orientação.

Referências

[1] R. Eisberg, R. Resnick. **Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles**, John Wiley & Sons, New York, 1985.

[2] F. M. Andrade, Exact Green's function for rectangular potentials and its applications to quasi-bound states. *Phys. Lett. A* **378**, 1461, 2014.