# FLUXO DE POLOS EM POÇOS DUPLOS QUADRADOS

Henrique G. Gutierre (BIC/BIC/ARAUCÁRIA), Fabiano M. Andrade (Orientador)
e-mail: fmandrade@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Matemática e Estatística.

**Física/Física Clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos**

**Palavras-chave:** Poço duplo, Função de Green, Estados Ligados

**Resumo**

Neste trabalho estudamos o poço duplo quadrado através do método da função de Green, mostrando assim que a função de Green é uma poderosa ferramenta na mecânica quântica. A função de Green para o poço duplo quadrado pode ser obtida através de uma soma de caminhos que uma partícula pode fazer indo de um ponto a outro no interior do poço. A importância da função de Green é que através dos seus polos é possível obter os autovalores de energia do poço, e através dos seus resíduos, podemos obter as autofunções de onda da partícula.

## Introdução

O estudo de poços quadrados é de fundamental importância na mecânica quântica, pois através deles podemos compreender diversos fenômenos físicos. Este trabalho tem como foco o poço duplo quadrado, que apesar da sua simplicidade matemática, possui uma dinâmica muito rica [1]. O poço duplo quadrado pode ser interpretado, por exemplo, como uma molécula diatômica, onde cada poço representa um átomo desta molécula, e os níveis de energia, os níveis eletrônicos. Diversos métodos podem ser utilizados para encontrar os estados de energia e as autofunções dentro de um poço duplo, porém, os mais usados são o método da resolução da equação de Schrödinger independente do tempo e o método da função de Green. No trabalho em questão, daremos maior atenção para o método da função de Green.
A função de Green na mecânica quântica é uma poderosa ferramenta definida por:

$$[E - H(\boldsymbol{r})]G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; E) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \quad (1)$$

onde $H(\mathbf{r})$ é o operador Hamiltoniano, que é definido como:

$$H(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}).$$

Para o poço duplo quadrado, foi usada a abordagem semiclássica, onde a função de Green é construída através de uma soma de caminhos clássicos que a partícula no interior do poço pode percorrer ao se deslocar de um ponto $x_i$ até um ponto $x_f$ [2]. Uma análise mais detalhada da função de Green generalizada revela que a função de Green pode ser colocada exatamente na seguinte forma:

$$G_{gen}(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k}\sum_{ce} W_{ce}\exp[\frac{i}{\hbar}S_{ce}(x_f, x_i; k)], \quad (2)$$

onde ce é entendido como “caminho de espalhamento”. $S_{ce}$ e $W_{ce}$ são, respectivamente sua ação clássica e amplitude correspondente. Após a construção da função, é possível obter os autovalores de energia através dos polos da função de Green (os pontos na metade superior do plano complexo onde a função de Green diverge). As autofunções da partícula podem ser obtidas através dos resíduos da função de Green. Na Figura 1 vemos uma representação esquemática de um poço duplo quadrado.

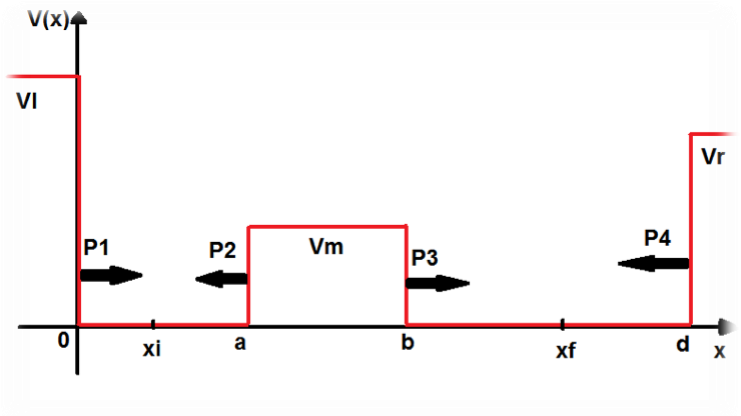



Figura 1 - Imagem representativa de um poço duplo quadrado

Ao analisar a Figura 1, utilizamos a abordagem de Feynman para a soma de caminhos clássicos considerando efeitos quânticos locais, através das amplitudes de reflexão e transmissão dos potenciais envolvidos no problema. Para a construção das famílias de caminhos, consideramos a partícula estando na posição $x_i$, podendo ir tanto para a esquerda quanto para a direita. No primeiro caso, ao ir para a esquerda, ela reflete na barreira de potencial e realiza um caminho $P_1$, onde percorre o todo o poço da esquerda até chegar ao potencial do meio, onde poderá ser refletida para a esquerda e assim ganhar uma amplitude de reflexão $R_m$ e realizar um caminho $P_2$, ou poderá ser transmitida ao poço da direita ganhando uma amplitude de transmissão $T_m$ e realizar um caminho $P_3$. Caso seja refletida para a esquerda, a partícula percorrerá todo o poço da esquerda, refletirá no potencial $V_l$ e fará o caminho $P_1$ novamente. Caso seja transmitida para o poço da direita, a partícula pode ir direto ao ponto final $x_f$, percorrendo assim uma distância $x_f - b$, ou poderá percorrer todo o poço da direita, refletir no potencial $V_r$, ganhar uma amplitude de reflexão $R_d$ e realizar um caminho $P_4$. E por fim, se realizar o caminho $P_4$, a partícula pode ir direto ao ponto final $x_f$, percorrendo uma distância $d - x_f$, ou pode percorrer todo o poço da direita e encontrar o potencial do meio, podendo tanto ser refletida e realizar um caminho $P_3$, ou ser transmitida para o poço da esquerda e realizar um caminho $P_2$. Assim, as famílias de caminhos são representadas matematicamente por:

$$P_1 = e^{ik_1 a}(R_m P_2 + T_m P_3) \quad (3)$$

$$P_2 = e^{ik_1 a} R_e P_1 \quad (4)$$

$$P_3 = e^{ik_2(x_f - b)} + e^{ik_2(d-b)} R_d P_4 \quad (5)$$

$$P_4 = e^{ik_2(d-x_f)} + e^{ik_2(d-b)}(T_m P_2 + R_m P_3), \quad (6)$$

onde

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-V_l)}{\hbar^2}} \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_r)}{\hbar^2}}$$

A função de Green para uma partícula se deslocando de um ponto $x_i$ para um ponto $x_f$ dentro de um poço obtida através dessa abordagem, deverá ser uma função das famílias de caminhos. Para o caso especial em que a função de Green generalizada é aplicada em um poço duplo quadrado, a equação (2) assume a forma:

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{m}{i\hbar^2 k} g_{pd}$$

sendo

$$g_{pd} = \left(e^{ik(a-x_i)} + R_e e^{ik(0-x_i)+ ik(a-0)}\right)(R_m P_2 + T_m P_3),$$

onde $R_e$, $R_m$ e $T_m$ são coeficientes de reflexão na barreira de potencial da esquerda, reflexão no meio e transmissão respectivamente. Os termos $P_2$ e $P_3$ são famílias de possíveis caminhos obtidas anteriormente.

## Materiais e Métodos

As equações obtidas através da Figura 1 foram resolvidas, e assim, foram encontradas as famílias $P_1$, $P_2$, $P_3$ e $P_4$. Como foi considerado que a partícula fica apenas no interior do poço, os coeficientes $R_d$ e $R_e$ são iguais a um. Isso significa 100% de possibilidade de reflexão tanto na direita quanto na esquerda. Para facilitar os cálculos, o problema foi considerado possuindo unidades atômicas, ou seja, $m = \hbar = 1$. Encontradas as famílias de caminhos, foi encontrada também a função de Green para o poço em função dos coeficientes $R_m$ e $T_m$,dos potenciais e das exponenciais de caminho.

## Resultados e Discussão

Resolvendo o sistema de equações (3)-(6) encontramos:

$$P_1 = T_m\left(\frac{1}{g.gD.gE}e^{ik_2(x_f-b)} + \frac{1}{gE}R_d e^{ik_2(d-b)+ ik_2(d-x_f)}\right)$$

$$P_2 = R_e T_m e^{ik_1 a}\left(\frac{1}{g.gD.gE}e^{ik_2(x_f-b)} + R_d\frac{1}{gE}e^{ik_1 a}e^{ik_2(d-b)+ ik_2(d-x_f)}\right)$$

$$P_3 = \left(\frac{1}{g.gD}e^{ik_2(x_f-b)} + R_d e^{ik_2(d-b)+ ik_2(d-x_f)}\right)$$

$$P_4 = e^{ik_2(d-x_f)} + T_m^2\left(\frac{1}{g.gD.gE}R_e e^{2ik_2(x_f-b)}e^{ik_1 a} + \frac{1}{gE}R_d R_e e^{2ik_2(d-b)}e^{ik_1 a}\right) + R_m\left(\frac{1}{g.gD}e^{2ik_2(x_f-b)} + R_d e^{2ik_2(d-b)}\right)$$

onde

$$gE = 1 - R_m R_e e^{2ik_1 a}$$
$$gD = 1 - R_d R_m e^{2ik_2(x_f-b)}$$
$$g = 1 - \frac{T_m^2 R_e R_d}{gE\,gD}e^{2ik_1 a+2ik_2(x_f-b)}$$

Substituindo este resultado na equação (7) obtemos:

$$G(x_f, x_i; k) = \frac{m\,T_m}{i\hbar^2 k}\frac{1}{f_{pd}}\left(e^{ik_1(a-x_i)} + R_e e^{ik_1(a+x_i)}\right) \times \left(e^{ik_2(x_f-d)} + R_d e^{ik_2(b-d)+ ik_2(b-x_f)}\right), \quad (7)$$

onde

$$f_{pd} = \left(1 - R_e R_m e^{2ik_1 a}\right)\left(1 - R_d R_m e^{2ik_2(x_f - b)}\right) - T_m{}^2 R_d R_e e^{2ik_1 a + 2ik_2(d-b)}.$$

A expressão em (7) é a função de Green exata para o poço duplo quadrado de potencial.

## Conclusões

Neste trabalho foi utilizada a função de Green construída através de uma soma de caminhos clássicos, mas que leva em conta efeitos quânticos locais, através das amplitudes de reflexão e transmissão dos potenciais individuais utilizados para construir o poço. Através do método utilizado, foi possível a construção exata da função de Green para o poço duplo quadrado. A função de Green tem mostrado ser uma ferramenta bastante poderosa e matematicamente simples de se trabalhar, o que torna o método compreensível a alunos de graduação, e o resultado encontrado está de acordo com o encontrado na literatura.
Usando o programa Mathematica foi possível calcular alguns polos da função de Green obtida, mas por falta de tempo, não foi possível avançar o suficiente para analisar o fluxo de polos no poço.

## Agradecimentos

Agradeço ao apoio financeiro da Fundação Araucária. Agradeço também aos professores da UEPG pelo conhecimento necessário para a realização do trabalho, especialmente meu orientador Fabiano Manoel de Andrade.

## 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 application to quasi-bound states**, Physics Letters A **378**, 1461-1468 (2014).