Potenciais delta revisitados via transformada de Fourier

(Delta potentials revisited via Fourier transform)

A.S. de Castro¹

Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Guaratinguetá, SP, Brasil
Recebido em 9/5/2012; Aceito em 29/8/2012; Publicado em 7/12/2012

O problema de estados ligados em potenciais delta é revisitado usando uma abordagem baseada na transformada de Fourier. O problema de um simples potencial delta resume-se à resolução de uma equação algébrica de primeiro grau para a transformada de Fourier da autofunção e o problema para mais que uma função delta também revela-se uma questão simples. Diferentemente de métodos diretos, nenhum conhecimento acerca da descontinuidade de salto da derivada primeira da autofunção é necessário para determinar a solução do problema. **Palavras-chave:** delta de Dirac, estado ligado, transformada de Fourier.

The problem of bound states in delta potentials is revisited by means of Fourier transform approach. The problem in a simple delta potential sums up to solve an algebraic equation of degree one for the Fourier transform of the eigenfunction and the problem for more than one delta function also reveals itself to be a simple matter. Quite differently from direct methods, no knowledge about the jump discontinuity of the first derivative of the eigenfunction is required to determine the solution of the problem.

Keywords: Dirac delta, bound state, Fourier transform.

1. Introdução

A análise da equação de Schrödinger com um potencial constituído de uma soma de duas funções delta de Dirac ocupa as páginas de muitos livros-texto [1-7]. Os possíveis estados ligados são encontrados pela localização dos polos complexos da amplitude de espalhamento ou por meio de uma solução direta da equação de Schrödinger com fulcro na descontinuidade de salto da derivada primeira da autofunção, mais a continuidade da autofunção e seu bom comportamento assintótico. Em um trabalho recente [8] tal problema foi examinado com o método da transformada de Laplace. Resultou que a solução do problema de estados ligados não requer qualquer conhecimento sobre a descontinuidade da derivada primeira da autofunção. Na esteira da Ref. [8], o problema de estados ligados em potenciais delta de Dirac é agora revisitado usando a abordagem via transformada de Fourier. O problema com um potencial constituído de uma única função delta resume-se a resolver uma equação algébrica de primeira ordem para a transformada de Fourier da autofunção, e o problema para mais que uma função delta também revela-se desembaraçado. Sucede que, tal como na análise via transformada de Laplace, o conhecimento da descontinuidade da derivada primeira da autofunção é irrelevante. Para dizer a verdade, a transformada de Fourier

tem sido usada para abordar os estados ligados do oscilador harmônico quântico de uma maneira simples e elegante [9-12]. Mais recentemente, baseado em um *ansatz* para o comportamento assintótico da autofunção, Palm and Raff [12] desenvolveram um método para lidar com uma classe ampla de potenciais via transformada de Fourier. Entretanto, os potenciais contemplados pelo método constante na Ref. [12] são aqueles constituídos de uma soma de termos da forma x^γ , com $-2 \leq \gamma \leq 2$, e assim sendo o procedimento de Palm and Raff é inepto para resolver problemas envolvendo deltas de Dirac.

Começaremos nosso exame com um único delta de Dirac localizado na origem. A equação de Schrödinger independente do tempo para o potencial delta é dada por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x) \right] \phi(x) = E \phi(x), \quad (1)$$

onde α é um parâmetro real. Usando as definições

$$a = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}, \quad b = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad (2)$$

a equação para estados ligados ($E = -|E|$) pode ser escrita como

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + a \delta(x) \phi(x) - b^2 \phi(x) = 0. \quad (3)$$

¹E-mail: castro@pq.cnpq.br.

Em razão da paridade par da função delta de Dirac, i.e. $\delta(-x) = \delta(x)$, a autofunção pode ser escolhida para ser par ou ímpar. Definindo $\Phi(k)$ como a transformada de Fourier de $\phi(x)$,

$$\Phi(k) = \mathcal{F}\{\phi(x)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ikx} \phi(x), \quad (4)$$

a transformada de Fourier inversa é dada por

$$\phi(x) = \mathcal{F}^{-1}\{\Phi(k)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-ikx} \Phi(k). \quad (5)$$

Pode ser mostrado que $\Phi^*(k) = \Phi(-k)$ se $\phi(x)$ for real e $\Phi^*(k) = -\Phi(-k)$ se $\phi(x)$ for imaginário [13]. Com estes resultados, e porque qualquer função pode ser expressa como uma combinação linear de suas partes real e imaginária, pode-se perceber que a paridade de $\Phi(k)$ sob a troca de k por $-k$ é a mesma que essa de $\phi(x)$ sob a troca de x por $-x$. Assumindo que $\phi(x)$ e sua derivada se anulam quando $|x| \rightarrow \infty$, pode-se escrever

$$\mathcal{F}\left\{\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}\right\} = -k^2 \mathcal{F}\{\phi(x)\}, \quad (6)$$

de modo que a transformada de Fourier da Eq. (3) nos conduz a uma equação algébrica para $\Phi(k)$ cuja solução é

$$\Phi(k) = a \frac{\phi(0)}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{k^2 + b^2}. \quad (7)$$

Haja vista que $\Phi(k)$ é uma função par pode-se concluir que $\phi(x)$ é também uma função par. Lições de Mecânica Quântica (...if the eigenfunctions are arranged in the order of increasing eigenvalues of the energy, these functions are alternately even and odd, the eigenfunction of the ground state is always even [14]) permite-nos especular, sem qualquer maquinário matemático adicional, que a solução de nosso problema, se é que ela existe, é única. Pode ser mostrado que [13]

$$\mathcal{F}\{e^{-\Gamma|x|}\} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Gamma}{k^2 + \Gamma^2}, \quad \Gamma > 0. \quad (8)$$

Usando este fato pode-se escrever

$$\phi(x) = \frac{a}{2b} \phi(0) e^{-b|x|}, \quad (9)$$

que é válido somente se $a/(2b) = 1$. Obviamente $\phi(x)$ é uma solução aceitável somente para $a > 0$. Conforme já especulado pelo uso de argumentos de simetria, existe uma e somente uma solução de estado ligado. Em termos das variáveis originais, esta solução única pode ser expressa como

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}, \quad \phi(x) = \phi(0) e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}, \quad \alpha > 0. \quad (10)$$

Agora consideraremos a equação de Schrödinger com duas funções delta separadas pela distância $2L$

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + a[\delta(x+L) + \delta(x-L)]\phi(x) - b^2\phi(x) = 0, \quad (11)$$

com a e b definidos como antes. Neste caso, $\Phi(k)$ torna-se

$$\Phi(k) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \left[\phi(-L) e^{-ikL} \frac{1}{k^2 + b^2} + \phi(+L) e^{+ikL} \frac{1}{k^2 + b^2} \right]. \quad (12)$$

É instrutivo observar que $\Phi(k)$ é uma função par ou ímpar sob a troca de k por $-k$ consoante $\phi(x)$ seja par ou ímpar, respectivamente, de forma que o problema possivelmente admite autofunções pares ou ímpares. Usando a propriedade de deslocamento das transformadas de Fourier [13]

$$\mathcal{F}\{\phi(x \pm L)\} = e^{\mp ikL} \mathcal{F}\{\phi(x)\}, \quad (13)$$

se obtém

$$\Phi(k) = \frac{a}{2b} \left[\phi(-L) \mathcal{F}\{e^{-b|x+L|}\} + \phi(+L) \mathcal{F}\{e^{-b|x-L|}\} \right], \quad (14)$$

e usando a Eq. (8) outra vez, $\phi(x)$ é reconstruída como

$$\phi(x) = \frac{a}{2b} \left[\phi(-L) e^{-b|x+L|} + \phi(+L) e^{-b|x-L|} \right]. \quad (15)$$

A continuidade de $\phi(x)$ em $x = L$ implica em

$$e^{-2bL} = \left(\frac{2b}{a} - 1 \right) \frac{\phi(+L)}{\phi(-L)}. \quad (16)$$

As possíveis soluções desta condição de quantização podem ser visualizadas graficamente por meio de esboços de seus membros direito e esquerdo como função de bL . As abscissas das interseções fornecem as soluções. Pode-se inferir que não existe nenhuma solução para $a < 0$. Quanto a $a > 0$, sempre existe uma solução com $E < -m\alpha^2/(2\hbar^2)$. A existência de uma solução (ímpar) adicional, em mais alta energia, ocorre somente se $aL > 1$ [5]. Este limiar ocorre porque as curvas e^{-2bL} e $1 - 2b/a$ se osculam em $bL = 0$ quando $aL = 1$ e se interceptam em algum ponto com abscissa $bL > 0$ se e somente se $aL > 1$.

A continuidade de $\phi(x)$ e a magnitude da descontinuidade de salto de sua derivada primeira são ingredientes essenciais para resolver a equação de Schrödinger com potenciais delta de Dirac pela força bruta. A abordagem via transformada de Fourier, contudo, somente requer que $\phi(x)$ e sua derivada primeira se anulem quando $|x| \rightarrow \infty$. O ajuste trivial, $\lim_{x \rightarrow 0} \phi(x) = \phi(0)$, é suficiente para determinar a solução no caso de uma simples função delta, e a continuidade de $\phi(x)$ em $x = L$ é necessária no caso de um delta duplo.

A generalização para um potencial periódico formado por uma sequência de funções delta igualmente espaçadas é deixada para os leitores.

Agradecimentos

O autor é grato ao CNPq pelo apoio financeiro.

Referências

- [1] S. Gasiorowicz, *Física Quântica* (Guanabara Dois, Rio de Janeiro 1974), p. 88-92.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics* (Hermann, Paris, 1977), v. 1, p. 88.
- [3] A. Galindo e R. Pascual, *Quantum Mechanics I* (Springer-Verlag, Berlim, 1990), p. 159-167.
- [4] K. Gottfried e T.-M. Yan, *Quantum Mechanics: Fundamentals* (Springer, Nova Iorque, 2003), 2nd. ed., p. 204-213.
- [5] K. Tamvakis, *Problems & Solutions in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge 2005), p. 59-60.
- [6] R.W. Robinett, *Quantum Mechanics* (Oxford University Press, Oxford, 2006), 2nd. ed., p. 213-216.
- [7] D.J. Griffiths, *Mecânica Quântica* (Pearson Prentice Hall, São Paulo, 2011), 2nd. ed., p. 60.
- [8] A.S. de Castro, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **34**, 4301 (2012).
- [9] G. Muñoz, *Am. J. Phys.* **66**, 254 (1998).
- [10] S.A. Ponomarenko, *Am. J. Phys.* **72**, 1259 (2004).
- [11] A. Engel, *Am. J. Phys.* **74**, 837 (2006).
- [12] G. Palma e U. Raff, *Am. J. Phys.* **79**, 201 (2011).
- [13] E. Butkov, *Física Matemática* (LTC, Rio de Janeiro, 1988), cap. 7.
- [14] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1961), v. I, p. 113.