

Examinando a existência de estados ligados em um poço quadrado aplicando um método simples

Examining the existence of bound states in a square well using a simple method

João Vitor Santos Perles^{*1}, Elso Drigo Filho¹

¹Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, São José do Rio Preto, SP, Brasil.

Recebido em 10 de fevereiro de 2023. Revisado em 01 de maio de 2023. Aceito em 05 de maio de 2023.

A equação de Schrödinger independente do tempo é solucionada analiticamente para o poço de potencial quadrado, unidimensional e simétrico, com a finalidade de demonstrar, utilizando um método simples, que há pelo menos um estado ligado nos casos limites de profundidade e largura do sistema analisado. Para uma análise completa, cinco condições para a profundidade e largura do poço são necessárias.

Palavras-chave: Equação de Schrödinger, Poço de potencial, Estados ligados.

The time-independent Schrödinger equation is analytically solved for the square, one-dimensional and symmetrical potential well, in order to demonstrate, using a simple method, that there is at least one bound state in the limiting cases of depth and width of the analyzed system. For a complete analysis, five conditions for the depth and width of the well are required.

Keywords: Schrödinger equation, Potential well, Bound states.

1. Introdução

Um estado ligado representa um sistema que está preso a um tipo de potencial atrativo, não contendo energia suficiente para escapar [1–5]. Na mecânica quântica, a busca por fenômenos que apresentam esses estados é de grande relevância, visto que uma de suas características é a quantização dos níveis de energia, o que é muito importante, devido à natureza discreta dos eventos de ordem subatômica e atômica [1–4, 7]. Exemplos de potenciais que pertencem a essa classe, são: Potencial de Morse, Coulomb e o poço finito unidimensional [7–11].

O presente artigo tem como objetivo solucionar a equação de Schrödinger para uma partícula confinada em um poço de potencial quântico finito, unidimensional e simétrico [1–7, 12–15], alterando os valores da profundidade e da largura do poço em cinco diferentes casos. A solução encontrada permite inferir que, para qualquer condição estudada no artigo, existe pelo menos um estado ligado (para um resultado mais completo, porém mais avançado matematicamente, ver a referência [6]). O resultado analítico obtido utilizando uma matemática simples é confirmado por cálculo numérico, onde as equações transcendentais são resolvidas por um método gráfico. Nesse sentido, a argumentação usada difere daquela apresentada na referência [16].

O trabalho está organizado como se segue: na seção 2, apresentamos a equação de Schrödinger unidimensional

e independente do tempo. Na seção 3, a partícula em uma caixa finita é resolvida da maneira tradicional encontrada nos livros-textos de mecânica quântica [1–3, 7, 12–15]. Na seção 4, são apresentados os resultados de cinco condições divididas em subtópicos. Por fim, na seção 5 são apresentadas as conclusões sobre os resultados obtidos.

2. Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger unidimensional e independente do tempo para um potencial $V(x)$ é dada por

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (1)$$

e o operador hamiltoniano, \hat{H} , é escrito como

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x),$$

onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π e m é a massa do sistema não relativístico [1–3, 7, 12, 14].

Na equação (1), $\psi(x)$ é chamado de função de onda ou autofunção e tem o papel de descrever o comportamento do sistema no espaço e E corresponde ao autovalor de energia [1–3, 12, 14].

As funções de onda representam uma distribuição de probabilidade, o que implica que ela seja normalizável, ou seja, devem se aproximar de zero quando a posição

*Endereço de correspondência: vitor.perles01@gmail.com

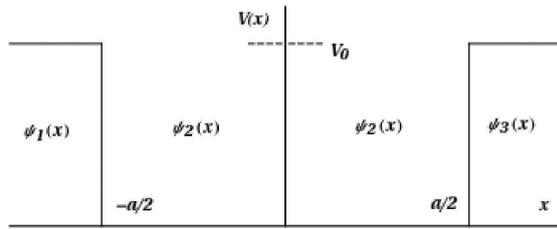


Figura 1: Poço de potencial finito dividido em três regiões distintas. À esquerda da barreira (região 1), entre as barreiras (região 2) e à direita do poço (região 3). As funções de onda são escritas nas respectivas regiões.

tende a mais e menos infinito [1–3, 12, 14]. A normalização das funções de onda corresponde a,

$$\int_{-L}^L |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad (2)$$

sendo que o sistema se encontra confinado entre $-L$ e L .

3. Poço de Potencial Quântico Finito, Unidimensional e Simétrico

O potencial estudado possui a seguinte forma matemática,

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < -\frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V_0, & x > \frac{a}{2}, \end{cases} \quad (3)$$

e pode ser representado visualmente como indicado na Figura 1. Observamos que a profundidade do poço é V_0 e a largura é igual a a , ambos sendo valores positivos e reais. Também é importante frisar que os estados contínuos começam em V_0 e, ao longo do trabalho, é mostrado que o sistema não admite estados ligados negativos.

Como o poço é simétrico, as soluções são divididas entre pares (ψ_p) e ímpares (ψ_i). As soluções pares são escritas por, vide ref. [1, 2]

$$\psi_p(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = [B \cos(\frac{a}{2} k_2) e^{\frac{a}{2} k_1}] e^{k_1 x} \\ \psi_2(x) = B \cos(k_2 x) \\ \psi_3(x) = [B \cos(\frac{a}{2} k_2) e^{\frac{a}{2} k_1}] e^{-k_1 x}, \end{cases} \quad (4)$$

sendo que

$$k_1 = \sqrt{2m[V_0 - E]/\hbar^2} \quad e \quad k_2 = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad (5)$$

com sua equação transcendental de autovalor par encontrada por:

$$k_2 \tan\left(\frac{a}{2} k_2\right) = k_1, \quad (6)$$

ou ainda,

$$f(E) = g(E), \quad (7)$$

onde $f(E) = \sqrt{E} \tan\left(\sqrt{mEa^2/2\hbar^2}\right)$ e $g(E) = \sqrt{V_0 - E}$. As soluções ímpares (ψ_i) são:

$$\psi_i(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = [-A \operatorname{sen}(\frac{a}{2} k_2) e^{\frac{a}{2} k_1}] e^{k_1 x} \\ \psi_2(x) = A \operatorname{sen}(k_2 x) \\ \psi_3(x) = [A \operatorname{sen}(\frac{a}{2} k_2) e^{\frac{a}{2} k_1}] e^{-k_1 x}, \end{cases} \quad (8)$$

com sua equação transcendental de autovalor ímpar encontrada por:

$$k_2 \cot\left(\frac{a}{2} k_2\right) = -k_1, \quad (9)$$

ou então,

$$h(E) = w(E), \quad (10)$$

com $h(E) = \sqrt{E} \cot\left(\sqrt{mEa^2/2\hbar^2}\right)$ e $w(E) = -\sqrt{V_0 - E}$. Por fim, A e B podem ser determinadas a partir da condição de normalização, equação (2).

4. Diferentes Valores para V_0 e a

No poço finito, quando resolvido analiticamente pela equação de Schrödinger, os níveis de energia são obtidos por meio de equações transcendentais pares e ímpares, já mostradas nas equações (6) e (9) [1, 3, 7, 12, 14, 16].

Inicialmente, olhando para a expressão de autovalor par, obtemos uma curva típica como aquela mostrada na Figura 2a, que mostra a intersecção das funções $f(E)$ e $g(E)$ com os valores de a e V_0 definidos.

Vemos que essas soluções apresentam o cruzamento entre as curvas para qualquer valor de $V_0 > 0$ e da largura a . Entretanto, com as soluções ímpares, a intersecção das curvas $h(E)$ e $w(E)$ está definida somente para valores particulares dos parâmetros V_0 e a , como observamos na Figura 2b. Como estamos interessados na análise da existência de, ao menos, um estado ligado, vamos concentrar a atenção nos autovalores pares.

4.1. Condição A: $V_0 = \text{constante}$ e $a \rightarrow 0$

Esse caso trata a barreira de potencial constante e a largura do poço tendendo a zero.

Partindo da equação (6), é possível realizar, do lado esquerdo da igualdade, uma expansão em série de Maclaurin sobre a variável a . Utilizamos apenas o primeiro termo da expansão diferente de zero, que resulta em:

$$Ea = \sqrt{V_0 - E}, \quad (11)$$

sendo que adotamos $m = 2\hbar^2 = 1$ para a simplificação dos cálculos, porém sem interferir nos resultados obtidos. Pela aplicação do limite de a tendendo a zero, é possível notar que o valor da energia E do sistema é aproximadamente V_0 , pelo fato de ficarmos apenas no segundo termo da expansão,

$$E \approx V_0, \quad (12)$$

e essa expressão, indica haver pelo menos um nível de energia próximo a V_0 ($E < V_0$).

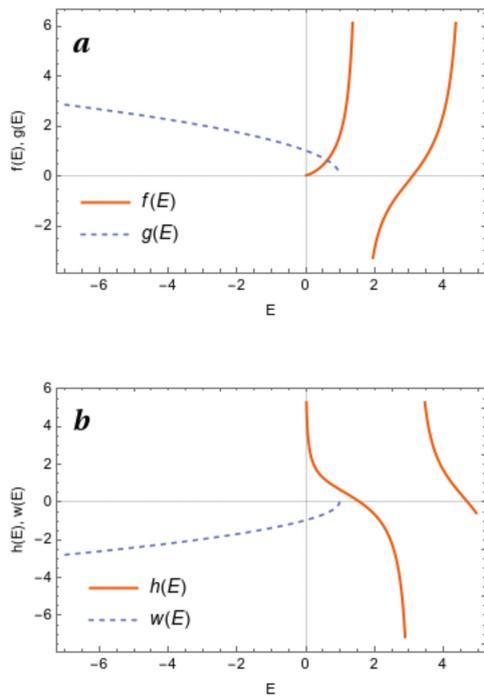


Figura 2: Para (2a), intersecção entre as funções de autovalor par. A curva tracejada é referente a $g(E)$ e a curva não tracejada é referente a $f(E)$, com $V_0 = ma^2 = 2\hbar^2 = 1$. Para (2b), intersecção entre as funções de autovalor ímpar. A curva tracejada é referente a $w(E)$ e a curva não tracejada é referente a $h(E)$, com $V_0 = ma^2 = 2\hbar^2 = 1$. Nota-se que (2a) sempre apresenta um cruzamento de $f(E)$ e $g(E)$, o que indica haver sempre um autovalor de energia. Para (2b) nem sempre as curvas, $h(E)$ e $w(E)$, se cruzam indicando que nem sempre existe um estado ligado.

4.2. Condição B: $V_0 \rightarrow \infty$ e $a = constante$

A configuração *B* representa um poço de potencial infinito, portanto, é interessante resgatar os níveis de energia deste caso [1, 2, 12, 17, 18]. Partindo da equação (6),

$$\tan\left(\sqrt{\frac{a^2 m E}{2\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{V_0}{E}} - 1, \tag{13}$$

e adotando $m = 2\hbar^2 = 1$, por similaridade, é possível aplicar o limite de $V_0 \rightarrow \infty$ diretamente, obtendo assim,

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{V_0}{E}} - 1 = \infty. \tag{14}$$

A função $\tan(x)$ diverge para valores múltiplos de $\frac{\pi}{2}$, ou seja, $n\frac{\pi}{2}$. Dessa forma:

$$E = \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 \tag{15}$$

com $n = 1, 2, 3 \dots$

O valor da energia mostrado na equação (15) é o autovalor da energia de um poço de potencial infinito, como pode ser visto em [1, 2, 12, 17, 18].

4.3. Condição C: $V_0 \rightarrow 0$ e $a = constante$

A configuração *C* caracteriza o caso da partícula livre, sendo possível recuperar o sistema de potencial nulo.

Partindo da equação (6), com as mesmas simplificações nas constantes vista nas condições anteriores, podemos aplicar o limite sobre $V_0 \rightarrow 0$ diretamente e reescrever a expressão como mostra a equação abaixo,

$$\tan\left(\sqrt{E}\right) = i\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{E}} = i. \tag{16}$$

Entende-se que não há valores possíveis para a E que satisfaça a expressão acima. Os autovalores não são discretos, mas sim, contínuos, recuperando o caso da partícula livre [1, 2, 19].

4.4. Condição D: $V_0 \rightarrow \infty$ e $a \rightarrow 0$

Os casos que se seguem, são mais interessantes, pois o limite é imposto aos dois parâmetros.

No geral, o termo de primeira ordem não nulo obtido na equação (6), com uma expansão em torno de zero para o parâmetro a , fornece

$$\sqrt{E}\sqrt{\frac{mE}{2\hbar^2}}a = \sqrt{V_0 - E}, \tag{17}$$

com $V_0 \rightarrow \infty$ e $a \rightarrow 0$. A expressão acima pode ser reescrita elevando ambos os lados da igualdade ao quadrado e adotando $m = 2\hbar^2 = 1$, ou seja,

$$(Ea)^2 = V_0 - E. \tag{18}$$

Uma vez que a altura do poço tende a infinito, o termo proporcional a a se torna desprezível, resultando em:

$$E \approx V_0. \tag{19}$$

e que é traduzida como um nível de energia possível.

Outra forma de obter a existência de ao menos um estado ligado para a condição *D*, é usar uma equação transcendente para verificar os resultados graficamente. Partindo da equação (17), definimos $f(E) = Ea$ e $g(E) = \sqrt{V_0 - E}$ com o intuito de buscar uma intersecção entre as funções $f(E)$ e $g(E)$ como indicado na Figura 3.

É visível que haja apenas um ponto de intersecção entre as funções e, portanto, apenas um valor que satisfaz a equação (17), o que pode ser entendido como um único estado ligado.

4.5. Condição F: $V_0 \rightarrow 0$ e $a \rightarrow \infty$

A configuração *F* descreve um poço onde os limites para V_0 e a são trocados em relação ao caso anterior. Partindo da equação (6), elevamos ambos os lados da igualdade ao quadrado, levando em seguida, a barreira de potencial a zero como mostrado abaixo,

$$\tan^2\left(\sqrt{Ea^2}\right) = \pm \lim_{V_0 \rightarrow 0} \left[\frac{V_0}{E} - 1\right]. \tag{20}$$

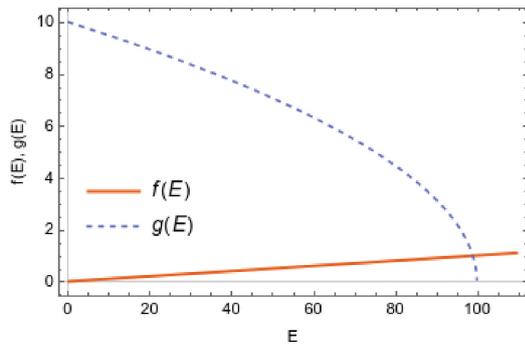


Figura 3: Intersecção das funções $f(E) = Ea$ representada pela curva não tracejada, e $g(E) = \sqrt{V_0 - E}$ representada pela curva tracejada, com os valores de $V_0 = 100$ e $a = 0.01$.

Adotamos a solução negativa como resposta para o lado direito da equação acima. Dessa forma,

$$\tan^2(\sqrt{Ea^2}) \approx 1, \quad (21)$$

e para isso ser verdade,

$$E \approx \left(\frac{n\pi}{4a}\right)^2. \quad (22)$$

Tomando o limite para o parâmetro a , observamos que $E \approx 0$, porém ainda existe um valor de energia possível, visto que ainda existe, por menor que seja, uma profundidade para o poço.

Da mesma forma que no tópico anterior, é importante ilustrar graficamente os níveis de energia, para comprovar o argumento do parágrafo acima. Simplificamos as constantes novamente na equação de autovalor par, como mostrado abaixo,

$$\sqrt{E} \tan(\sqrt{a^2 E}) = \sqrt{V_0 - E}, \quad (23)$$

e analogamente à condição F , utilizamos as equações transcendentais com $f(E) = \sqrt{E} \tan(\sqrt{a^2 E})$ e $g(E) = \sqrt{V_0 - E}$ [16].

A Figura 4 mostra apenas um ponto de intersecção entre as curvas, em outras palavras, mostra apenas um valor que satisfaz a equação (23), demonstrando apenas um estado ligado [13], e mais, o valor de energia obtido no caso da Figura 4 é muito pequeno, da ordem de 10^{-6} .

Um caso particular para essa condição é atribuir ao parâmetro V_0 um valor maior do que zero porém muito menor que a . Entretanto essa configuração retorna a F , uma vez que a largura do poço tende a infinito. Com isso o autovalor de energia é igualmente escrito da forma mostrada aqui, independentemente do valor da altura do poço.

5. Conclusões

Neste trabalho, estudamos o poço de potencial quântico finito, unidimensional e simétrico. Para isso, solucionamos a equação de Schrödinger para o potencial finito

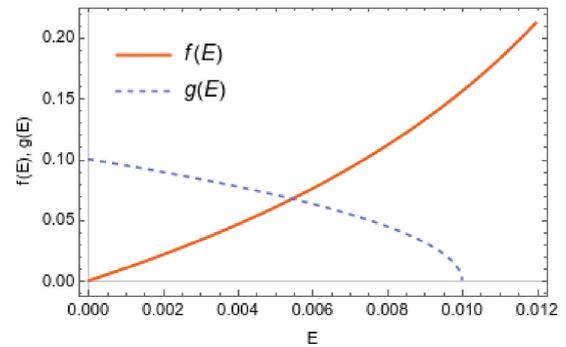


Figura 4: Intersecção das funções $f(E) = \sqrt{E} \tan(\sqrt{a^2 E})$ representada pela curva não tracejada, e $g(E) = \sqrt{V_0 - E}$ representada pela curva tracejada, com os valores de $V_0 = 0.00001$ e $a = 10000$.

da forma tradicional encontrada nos livros-textos [1, 2]. Com as autofunções e autovalores obtidos, analisamos cinco condições onde os valores da largura a e do potencial V_0 eram levados ao infinito e/ou a zero, com o objetivo de demonstrar se em cada um desses casos há pelo menos um nível de energia possível. Os casos analisados cobrem todos os parâmetros possíveis.

Nas condições A , B e C , não houve grandes problemas com as aplicações dos limites. Dessa forma, a comprovação por cálculo numérico não se fez necessária, visto que os resultados obtidos eram imediatos ou recaíam sobre outros problemas bem conhecidos de mecânica quântica, com seus níveis de energia bem estabelecidos [1, 2]. Para as condições D e F , que são os casos mais complexos, existe a necessidade de um maior cuidado. Por isso, o uso de equações transcendentais via gráfico confirma as análises, como visto nas Figuras 3 e 4.

Observamos que em todos os casos, exceto a condição D , há pelo menos um nível de energia. Assim, pode-se concluir que qualquer configuração do poço quadrado unidimensional possui ao menos um estado ligado. Esse resultado pode ser estendido para outros poços de potenciais não necessariamente quadrados [20].

Agradecimentos

Os autores agradecem pelo suporte financeiro parcial da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), processo número 88887.641424/2021-00. As discussões com os professores Jorge Chahine e José Roberto Rugiero também foram importantes para a conclusão desse trabalho.

Referências

- [1] D.J. Griffiths, *Introdução à Mecânica Quântica* (Pearson, São Paulo, 2011), 2 ed.
- [2] R.M. Eisberg e R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles* (John Wiley & Sons, New York, 1985).

- [3] J.J. Sakurai e J. Napolitano, *Mecânica Quântica Moderna* (Bookman, Porto Alegre, 2013).
- [4] W.F. Buell e B.A. Shadwick, *American Journal of Physics* **63**, 256 (1995).
- [5] C.A. Kocher, *American Journal of Physics* **45**, 71 (1977).
- [6] F.A.B. Coutinho, C.P. Malta e J.F. Perez, *Physics Letters A* **97A**, 242 (1983).
- [7] G.B. Freitas, R.G. Veigas e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **32**, 1502 (2010).
- [8] L.A.M. Pera, J.V.S. Perles, E.J.N. Terra, R.P. Silva e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **44**, e20220122 (2022).
- [9] S.H. Dong, R. Lemus e A. Frank, *International Journal of Quantum Chemistry* **86**, 433 (2002).
- [10] J.M.C. Monteiro, A. Algozini Júnior e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **41**, e20180315 (2019).
- [11] J. Heyd, G.E. Scuseria e M. Ernzerhof, *The Journal of Chemical Physics* **118**, 8207 (2003).
- [12] L.I. Schiff, *Quantum Mechanics* (Mcgraw-Hill, New York, 1955).
- [13] S. Singh, P. Pathak e V.A. Singh, *European Journal of Physics* **32**, 1701 (2011).
- [14] W. Greiner, *Quantum Mechanics: An Introduction* (Springer, Berlin, 2011).
- [15] M. Velloso, V. Acioly e A.C.F. Santos, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **42**, e20200209 (2020).
- [16] J.A. Jacoby, M. Curran, D.R. Wolf e J.K. Freericks, *European Journal of Physics* **40**, 045404 (2019).
- [17] H.O. Batael, J.F. Silva, A.N. Silva, S.F.M. Santos e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **40**, e2305 (2017).
- [18] E. Drigo Filho e R.M. Ricotta, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **37**, 10057 (2004).
- [19] X. Guo e M. Xu, *Journal of Mathematical Physics* **47**, 082104 (2006).
- [20] N.A. Rao e B.A. Kagali, arXiv:0808.2427 (2008).