

Espalhamento e estados ligados em potenciais localizados

(Scattering and bound states by localized potentials)

A.S. de Castro¹

Departamento de Física e Química, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Guaratinguetá, SP, Brasil
Recebido em 15/3/2011 ; Aceito em 2/5/2011; Publicado em 9/12/2011

Apresenta-se um formalismo simples que permite explorar o espalhamento quântico e os possíveis estados ligados em um potencial simétrico localizado de forma arbitrária de um modo unificado. A barreira e o poço quadrados simétricos são utilizados como ilustração do método.

Palavras-chave: espalhamento, estado ligado, potencial localizado, coeficiente de transmissão.

A simple formalism for exploring quantum scattering and possible bound states in an arbitrary symmetric and localized potential in a unified way is presented. The symmetric square barrier and well potentials are used for illustrating the method.

Keywords: scattering, bound state, localized potential, transmission coefficient.

1. Introdução

Um exame detalhado do espalhamento quântico em um potencial retangular generalizado foi publicado recentemente nesta Revista por Cândido Ribeiro e colaboradores [1]. Nesse estudo, após uma proficiente descrição das aplicações do espalhamento quântico, desde o decaimento alfa até os *quantum dots*, os autores exploram um potencial retangular constituído de três patamares que reduz-se a ao poço de potencial, à barreira de potencial e ao degrau duplo, consoante o ajuste de dois parâmetros do potencial generalizado. O coeficiente de transmissão é calculado exatamente, e alguns casos particulares, incluindo poços e barreiras assimétricos, são estudados com certa minúcia.

O presente trabalho apresenta um formalismo simples que permite explorar os estados de espalhamento, tanto quanto os possíveis estados ligados, em um potencial simétrico localizado de forma arbitrária. O método permite abordar o problema de espalhamento e estados ligados de uma forma unificada utilizando-se de um formalismo matemático acessível aos estudantes de física já nos cursos introdutórios de mecânica quântica. A barreira e o poço quadrados simétricos, problemas analiticamente solúveis que se fazem presentes nos livros-texto de mecânica quântica, são utilizados como ilustração do método.

¹E-mail: castro@pq.cnpq.br.

2. Solução para um potencial localizado

A equação de Schrödinger unidimensional para uma partícula de massa de repouso m sujeita a um potencial $V(x, t)$ é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t), \quad (1)$$

onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , e $\Psi(x, t)$ é a função de onda. A equação da continuidade para a equação de Schrödinger

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

é satisfeita com ρ e J definidos como

$$\rho = |\Psi|^2, \quad J = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right). \quad (3)$$

A grandeza ρ é interpretada como uma densidade de probabilidade e J como uma corrente (ou fluxo) de probabilidade. Para um potencial independente do tempo, equação de Schrödinger admite soluções da forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (4)$$

onde ψ obedece à equação de Schrödinger independente do tempo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \psi = E \psi, \quad (5)$$

e a densidade e corrente correspondentes à solução expressa pela Eq. (4) tornam-se

$$\rho = |\psi|^2, \quad J = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right). \quad (6)$$

Em virtude de ρ e J serem independentes do tempo, a solução (4) é dita descrever um estado estacionário. Também, a lei de conservação expressa pela Eq. (2) implica que o fluxo de probabilidade é independente de x para os estados estacionários.

Vamos agora considerar a equação de Schrödinger com um potencial independente do tempo localizado. O potencial localizado, não-nulo apenas numa região finita do eixo x , é expresso como

$$V(x) = \mathcal{V}(x) [\theta(x+L) - \theta(x-L)] = \begin{cases} 0 & \text{para } |x| > L, \\ \mathcal{V}(x) & \text{para } |x| < L, \end{cases} \quad (7)$$

onde $\theta(x)$ é a função de Heaviside,

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0, \\ 1 & \text{para } x > 0. \end{cases} \quad (8)$$

Para $x < -L$, a equação de Schrödinger apresenta a solução geral

$$\psi = a_+ e^{+ikx} + a_- e^{-ikx}, \quad (9)$$

onde o número de onda k é definido como

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (10)$$

Para $E > 0$, a solução expressa pela Eq. (9) reverte-se em uma soma de autofunções do operador momento ($p_{\text{op}} = -i\hbar\partial/\partial x$). Tais autofunções descrevem ondas planas propagando-se em ambos os sentidos do eixo x com velocidade de grupo (veja, *e.g.*, Ref. [2])

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}, \quad (11)$$

igual à velocidade clássica da partícula. Por conseguinte, $a_+ e^{+ikx}$ descreve partículas incidentes ($v_g = \hbar k/m > 0$), enquanto $a_- e^{-ikx}$ descreve partículas refletidas ($v_g = -\hbar k/m < 0$). A corrente nesta região do espaço, correspondendo a ψ dada pela Eq. (9), é expressa por

$$J = J_{\text{inc}} - J_{\text{ref}}, \quad (12)$$

onde

$$J_{\text{inc}} = \frac{\hbar k}{m} |a_+|^2, \quad J_{\text{ref}} = \frac{\hbar k}{m} |a_-|^2. \quad (13)$$

²Se $\phi(x)$ satisfaz à equação de Schrödinger independente do tempo para um dado E , assim acontece com $\phi(-x)$, e portanto também satisfazem as combinações lineares $\phi(x) \pm \phi(-x)$.

³Se ϕ satisfaz à equação de Schrödinger independente do tempo para um dado E , assim acontece com ϕ^* , e portanto também satisfazem as combinações lineares $\phi \pm \phi^*$.

Observe que a relação $J = \rho v_g$ mantém-se tanto para a onda incidente quanto para a onda refletida pois

$$\rho_{\pm} = |a_{\pm}|^2. \quad (14)$$

Por outro lado, para $x > L$ as soluções são da forma

$$\psi = b_+ e^{+ikx} + b_- e^{-ikx}. \quad (15)$$

Para termos uma onda progressiva se afastando da região do potencial (propagando-se no sentido positivo do eixo x com $v_g = \hbar k/m > 0$) devemos impor $b_- = 0$. A densidade e a corrente nesta região do espaço, correspondendo a ψ dada pela Eq. (15) com $b_- = 0$, são expressas por

$$\rho = |b_+|^2, \quad J_{\text{trans}} = \frac{\hbar k}{m} |b_+|^2. \quad (16)$$

Para $|x| < L$ a solução geral tem a forma

$$\psi = c_P u(x) + c_I v(x), \quad (17)$$

onde u e v são soluções linearmente independentes da equação de Schrödinger, e c_P e c_I são constantes arbitrárias. Doravante, por motivos de simplicidade, vamos considerar um potencial par, *i.e.* $\mathcal{V}(-x) = +\mathcal{V}(x)$, de modo que podemos considerar soluções com paridade definida.² Seja u a solução par e v a solução ímpar

$$u(-x) = u(x) \quad \text{e} \quad v(-x) = -v(x). \quad (18)$$

Mais ainda, sem perda de generalidade, podemos considerar que u e v são funções reais.³ Neste caso, o leitor pode facilmente verificar que

$$J(|x| < L) = \frac{\hbar W(x)}{m} \text{Im}(c_P^* c_I), \quad (19)$$

onde W é o wronskiano das soluções u e v , *i.e.* $W = uv' - u'v$, onde a plica $'$ (também conhecida como linha, irreconhecível como *primo* na Língua Portuguesa) significa a derivada em relação a x . Sucede que o wronskiano para duas soluções linearmente independentes de uma equação diferencial de segunda ordem é diferente de zero, e para o caso a equação de Schrödinger, como o leitor pode verificar, é independente de x . Assim, podemos até mesmo escrever $W = u(0)v'(0)$.

Começaremos agora o cálculo de grandezas de suma importância na descrição do espalhamento, *viz.* os coeficientes de reflexão e transmissão, assim k , definido na Eq. (10), é uma quantidade real. Não obstante possíveis discontinuidades do potencial em $x_0 = \pm L$, a autofunção e sua derivada primeira são funções contínuas. Esta conclusão, válida para potenciais com discontinuidades finitas, pode ser obtida pela integração da Eq. (5) entre $x_0 - \varepsilon$ e $x_0 + \varepsilon$ no limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Pode-se verificar, pelo mesmo procedimento,

que apenas as autofunções são contínuas quando as descontinuidades dos potenciais são infinitas.

A demanda por continuidade de ψ e $d\psi/dx$ fixa todas as amplitudes em termos da amplitude da onda incidente a_+ . A continuidade em $x = -L$ é expressa como

$$\begin{aligned} a_+ e^{-ikL} + a_- e^{+ikL} &= \\ c_P u_L - c_I v_L, & \\ ik (a_+ e^{-ikL} - a_- e^{+ikL}) &= \\ -c_P u'_L + c_I v'_L, & \end{aligned} \quad (20)$$

e em $x = +L$ como

$$\begin{aligned} b_+ e^{+ikL} &= c_P u_L + c_I v_L, \\ ik b_+ e^{+ikL} &= c_P u'_L + c_I v'_L, \end{aligned} \quad (21)$$

onde o subscrito L em u e v significa avaliação em

$x = L$. Das Eqs. (20) e (21), temos

$$\frac{c_P}{a_+} = -\frac{ike^{-ikL}}{u'_L - iku_L}, \quad (22)$$

$$\frac{c_I}{a_+} = +\frac{ike^{-ikL}}{v'_L - ikv_L}, \quad (23)$$

$$\frac{a_-}{a_+} = -\frac{e^{-2ikL} (k^2 u_L v_L + u'_L v'_L)}{(u'_L - iku_L)(v'_L - ikv_L)}, \quad (24)$$

$$\frac{b_+}{a_+} = -\frac{ike^{-2ikL} W}{(u'_L - iku_L)(v'_L - ikv_L)}. \quad (25)$$

Agora focalizamos nossa atenção na determinação dos coeficientes de reflexão R e transmissão T . O coeficiente de reflexão (transmissão) é definido como a razão entre as correntes refletida (transmitida) e incidente. Haja vista que $\partial\rho/\partial t = 0$ para estados estacionários, temos que a corrente é independente de x . Usando este fato obtemos prontamente que

$$R = \frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{|a_-|^2}{|a_+|^2} = \frac{(k^2 u_L v_L + u'_L v'_L)^2}{(k^2 u_L v_L - u'_L v'_L)^2 + k^2 (u'_L v_L + u_L v'_L)^2}, \quad (26)$$

$$T = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{|b_+|^2}{|a_+|^2} = \frac{k^2 W^2}{(k^2 u_L v_L - u'_L v'_L)^2 + k^2 (u'_L v_L + u_L v'_L)^2}, \quad (27)$$

Daí o leitor pode mostrar que $R + T = 1$, como deve ser por causa da conservação da probabilidade.

O formalismo desenvolvido acima também permite a análise de estados ligados. Note que as Eqs. (9), (15) e (17) descrevem estados de espalhamento com $E > 0$ e $k \in \mathbb{R}$. Possíveis estados ligados também poderiam ser descritos por essas autofunções com $k = i|k|$, onde $|k| = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$ com $E < 0$, e $a_+ = b_- = 0$. Devemos impor que a_+ e b_- sejam nulos para que a densidade de probabilidade seja finita em $x = -\infty$. Ora, tem que ser assim, pois $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi|^2 < \infty$. Para $|x| < L$ pode-se deduzir que $J = 0$, e portanto deveríamos concluir que $\text{Im}(c_P^* c_I) = 0$, para se pôr de acordo com a equação da continuidade e com a expressão do fluxo na região $|x| < L$ expressa pela Eq. (19). Nesta circunstância, as relações (20) e (21) fornecem

$$\begin{aligned} u'_L + |k|u_L &= 0, \quad c_I = 0, \\ b_+ = a_- &= c_P u_L e^{-\frac{u'_L}{u_L} L}, \end{aligned} \quad (28)$$

e

$$\begin{aligned} v'_L + |k|v_L &= 0, \quad c_P = 0, \\ b_+ = -a_- &= c_I v_L e^{-\frac{v'_L}{v_L} L}. \end{aligned} \quad (29)$$

As autofunções correspondentes às Eqs. (28) e (29) podem ser escritas como

$$\psi(x) = b_+ \begin{cases} +e^{+|k|x} & \text{para } x < -L, \\ \frac{e^{-|k|L}}{u_L} u(x) & \text{para } |x| < L, \\ +e^{-|k|x} & \text{para } x > L, \end{cases} \quad (30)$$

para ψ par, e

$$\psi(x) = b_+ \begin{cases} -e^{+|k|x} & \text{para } x < -L, \\ \frac{e^{-|k|L}}{v_L} v(x) & \text{para } |x| < L, \\ +e^{-|k|x} & \text{para } x > L, \end{cases} \quad (31)$$

para ψ ímpar. Fortuitamente, as condições para a existência de estados ligados também poderiam ser obtidas por meio da identificação dos polos das amplitudes expressas pelas Eqs. (24) e (25) se os valores físicos do número de onda k , definidos no eixo real, são estendidos para o plano complexo. Com efeito, a prescrição $k \rightarrow i|k|$ anula o denominador das Eqs. (24) e (25)

sempre que

$$u'_L + |k|u_L = 0, \quad (32)$$

ou

$$v'_L + |k|v_L = 0. \quad (33)$$

As Eqs. (32) e (33) são relações implícitas para a determinação das possíveis autoenergias. A primeira fornece autovalores associados com autofunções pares ($c_I = 0$), e a segunda com autofunções ímpares ($c_P = 0$). Daí se vê que o fluxo de probabilidade expresso pela Eq. (19) é nulo no caso de estados ligados, como deve ser.

Formalmente, tanto o problema de espalhamento quanto o problema de estados ligados estão resolvidos. Na seção seguinte ilustramos a técnica com o caso simples de um potencial retangular constituído de três patamares que reduz-se a ao poço de potencial ou à barreira de potencial, conforme o sinal de $\mathcal{V}(x)$.

3. O potencial quadrado

Consideremos agora

$$\mathcal{V}(x) = V_0, \quad (34)$$

e o número de onda q definido por

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}. \quad (35)$$

A segregação dos casos $E > V_0$ e $E < V_0$, correspondendo a q real e q imaginário respectivamente, conduz a duas classes distintas de soluções. A seguir, calcularemos explicitamente o coeficiente de transmissão e encontraremos as condições de quantização para cada uma dessas classes de soluções, seja V_0 positivo ou negativo.

- $E > V_0$. Neste caso q é um número real e a equação de Schrödinger independente do tempo admite as soluções linearmente independentes

$$u = \cos(qx) \quad \text{e} \quad v = \sin(qx). \quad (36)$$

Desta maneira, o wronskiano das soluções u e v é igual a q e a Eq. (27) torna-se

$$T = \left\{ 1 + \left[\frac{k^2 - q^2}{2kq} \sin(2qL) \right]^2 \right\}^{-1}. \quad (37)$$

Ao passo que as condições de quantização, expressas por (32) e (33), tornam-se

$$\frac{|k|}{q} = \begin{cases} \tan(qL) & \text{para } c_I = 0, \\ -\cot(qL) & \text{para } c_P = 0. \end{cases} \quad (38)$$

Convém lembrar que o coeficiente de transmissão só é válido para $E > 0$ (k é real). Entretanto, as condições de quantização são válidas somente

para $E < 0$ (k é imaginário puro), o que impõe naturalmente que V_0 seja negativo. Em outras palavras, somente o poço de potencial tolera a existência de estados ligados.

- $E < V_0$. Neste caso q é um número imaginário puro e as soluções linearmente independentes são

$$u = \cosh(|q|x) \quad \text{e} \quad v = \sinh(|q|x). \quad (39)$$

Desta feita, $W = |q|$ e

$$T = \left\{ 1 + \left[\frac{k^2 + |q|^2}{2k|q|} \sinh(2|q|L) \right]^2 \right\}^{-1}. \quad (40)$$

Neste caso de energias menores que a altura do potencial, necessariamente com $V_0 > 0$ e $E > 0$, revela-se o efeito túnel. Uma circunstância em que, embora não haja ondas progressivas na região do potencial, há uma corrente dada por

$$J = \frac{\hbar|q|}{m} \text{Im}(c_P^* c_I), \quad (41)$$

que se anula somente quando k é um número imaginário. As condições de quantização das Eqs. (32) e (33) ditam que

$$-\frac{|k|}{|q|} = \begin{cases} \tanh(|q|L) & \text{para } c_I = 0, \\ \coth(|q|L) & \text{para } c_P = 0. \end{cases} \quad (42)$$

Contudo, estas condições não fornecem soluções porque o membro esquerdo da Eq. (42) é negativo e os membros direitos são positivos. Em outras palavras, a existência de estados ligados requer um número de onda real na região do potencial. A ausência de estados ligados, verificada aqui em decorrência das condições de quantização expressas pela Eq. (42), se dá porque as soluções normalizáveis da equação de Schrödinger requerem que E exceda o mínimo de $V(x)$.

4. Conclusão

Apresentou-se um formalismo que pode descrever estados de espalhamento e estados ligados de uma forma unificada. O método foi desenvolvido para potenciais localizados simétricos mas pode ser estendido para potenciais assimétricos com relativa facilidade. O exemplo do afamado potencial quadrado poderia nos conduzir a concluir que o método é extremamente poderoso, mas não é bem assim. Acontece que certas formas de $\mathcal{V}(x)$, ainda que sejam simples, deixam a proposta na berlinda devido à equação de Schrödinger não resultar em soluções amigáveis para $u(x)$ e $v(x)$, e até mesmo não redundar em soluções analíticas. Formas simples

para $\mathcal{V}(x)$ com interesse prático, por exemplo, incluem o potencial parabólico [3] e o potencial triangular [4]. As soluções da equação de Schrödinger para a primeira forma envolvem funções hipergeométricas confluentes enquanto a segunda forma envolvem funções de Airy. Não obstante, o método pode se tornar um excelente ponto de partida para a busca de soluções numéricas, ou ainda de soluções analíticas aproximadas, para o coeficiente de transmissão e para as energias dos possíveis estados ligados.

Agradecimentos

O autor é grato ao CNPq pelo apoio financeiro.

Referências

- [1] M.A. Cândido Ribeiro, V.C. Franzoni, W.R. Passos, E.C. Silva e A.N.F. Aleixo, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **26**, 1 (2004).
- [2] D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, Nova Jersey 1955).
- [3] H. Cruz, A. Hernández-Cabrera and A. Muñoz, *Semicond. Sci. Technol.* **6**, 218 (1991).
- [4] A. Chandra and L.F. Eastman, *J. Appl. Phys.* **53**, 9165 (1982).