

Solução da Equação de Schrödinger Independente do Tempo para um Poço de Potencial Quadrado Assimétrico

(Solution of time-independent Schrödinger equation for an assymmetric square potential well)

Paulo César M. Machado

Escola de Engenharia Elétrica, Universidade Federal de Goiás
C.P. 12082, CEP 74641-970 Goiânia - Go, E-mail: pcesar@eee.ufg.br

Francisco Aparecido P. Osório

Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás
Departamento de Matemática e Física, Universidade Católica de Goiás
C.P. 131 CEP 74001-970 Goiânia - Go.

Antônio Newton Borges

Departamento de Física, Universidade Federal de Goiás
Departamento de Matemática e Física, Universidade Católica de Goiás
C.P. 131 CEP 74001-970 Goiânia - Go, E-mail: newton@fis.ufg.br

Trabalho recebido em 20 de outubro de 1996

Utilizando um tema muito comum na Mecânica Quântica, chegamos a um resultado muito interessante que não é usualmente abordado na literatura tradicional. Trata-se do cálculo dos autovalores da energia do elétron em poços de potenciais quadrados finitos assimétricos. Mostraremos que os autovalores da energia do elétron em poços de potenciais finitos assimétricos podem ser obtidos a partir das soluções de primeira e segunda classes dos poços de potenciais quadrados finitos simétricos, que são encontradas nos livros de Mecânica Quântica.

Abstract

Using a common theme in Quantum Mechanics, we reached an interesting result which is not usually developed in the traditional literature. This theme is the calculation of the electron energy eigenvalue in assymmetric finite square potential wells. We will show that the electron energy eigenvalue in assymmetric finite square potential wells may be obtained from first and second classes solutions of symmetric finite square potential wells, which are found in Quantum Mechanics books.

I. Introdução

Nos anos recentes com o desenvolvimento de sofisticadas técnicas de crescimento de cristais, tais como a Epitaxia por Feixe Molecular (MBE), tornou-se possível a fabricação de estruturas semicondutoras, nas quais elétrons ficam confinados em poços quânticos quadrados, geralmente constituídos de GaAs. Então o que

antes era um simples problema acadêmico de encontrar a solução da equação de Schrödinger para o elétron confinado em um poço quântico, passou a ter um interesse prático^[1].

Frequentemente os pesquisadores que trabalham nessa área se defrontam com a questão de se considerar o poço como simétrico ou assimétrico. Dependendo do

problema que se está estudando, a escolha correta pode trazer grande simplificação nos cálculos.

Tradicionalmente os livros de Mecânica Quântica apresentam a solução do problema clássico, que é o cálculo dos autovalores da energia de um elétron em um poço de potencial quadrado finito, considerando o poço simétrico e de largura $L(-L/2 < y < L/2)$. Normalmente calcula-se as autofunções do elétron e, através de métodos gráficos, calcula-se quantos e quais são os autovalores deste problema [2,3]. No entanto, quando se trata de um poço de potencial quadrado finito assimétrico de mesma largura $L(0 < y < L)$ não se vê o mesmo tratamento. Neste trabalho vamos calcular os autovalores da energia do elétron para os dois tipos de poços simétrico e assimétrico e mostrar que as soluções são equivalentes.

II. Poço de potencial quadrado finito simétrico

Seja um elétron em um poço quântico de largura $L(-L/2 < y < L/2)$, confinado pelo potencial $V(y)$, dado por:

$$V(y) = \begin{cases} V_0 & p/|y| > \frac{L}{2} \\ 0 & p/|y| < \frac{L}{2} \end{cases} \quad (1)$$

conforme mostrado na figura 1.

Consideremos o caso em que a energia do elétron é menor que a altura da barreira, isto é, $E < V_0$ e seja m a massa efetiva do elétron. Na região $-L/2 < y < L/2$ devemos resolver a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\frac{d^2 \phi(y)}{dy^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(y) = 0 \quad (2)$$

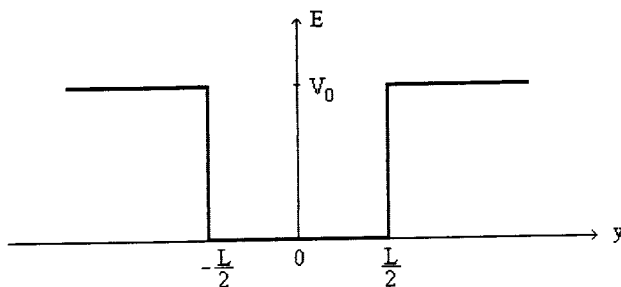


Figura 1. Representação de um poço de potencial quadrado simétrico.

Fazendo

$$K_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (3)$$

teremos a equação diferencial

$$\frac{d^2 \phi(y)}{dy^2} + K_1^2 \phi(y) = 0 \quad (4)$$

cuja solução é

$$\phi(y) = B_1 \text{sen} K_1 y + B_2 \text{cos} K_1 y, \quad p/ -\frac{L}{2} < y < \frac{L}{2} \quad (5)$$

Nas regiões $y < -L/2$ e $y > L/2$ teremos:

$$\frac{d^2 \phi(y)}{dy^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \phi(y) = 0 \quad (6)$$

e fazendo

$$K_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (7)$$

teremos a equação diferencial

$$\frac{d^2 \phi(y)}{dy^2} - K_2^2 \phi(y) = 0 \quad (8)$$

cujas soluções são

$$\phi(y) = C_1 e^{K_2 y} + C_2 e^{-K_2 y}, \quad p/y < -\frac{L}{2} \quad (9)$$

e

$$\phi(y) = D_1 e^{K_2 y} + D_2 e^{-K_2 y}, \quad p/y > \frac{L}{2} \quad (10)$$

Impondo a condição de que a autofunção permaneça finita para todo y , deveremos ter $C_2 = 0$ e $D_1 = 0$. As equações (9) e (10) se reduzem então a

$$\phi(y) = C_1 e^{K_2 y}, \quad p/y < -\frac{L}{2} \quad (11)$$

e

$$\phi(y) = D_2 e^{-K_2 y}, \quad p/y > \frac{L}{2} \quad (12)$$

Usando as condições de continuidade das autofunções e conservação da corrente nas interfaces do poço, teremos as seguintes relações a serem satisfeitas:

$$K_1 \text{tg} \frac{K_1 L}{2} = K_2 \quad (13)$$

e

$$K_1 \text{cotg} \frac{K_1 L}{2} = -K_2. \quad (14)$$

Como as duas equações (13) e (14) não podem ser satisfeitas simultaneamente, teremos duas classes de autofunções para o poço quadrado simétrico.

II.1 Primeira classe

Definida pela equação (13):

$$K_1 \operatorname{tg} \frac{K_1 L}{2} = K_2$$

e com a função de onda do elétron dada por

$$\phi(y) = \begin{cases} [B_2 \cos \frac{K_1 L}{2} e^{K_2 L/2}] e^{K_2 y} & p/y < -\frac{L}{2} \\ B_2 \cos K_1 y & p/ -\frac{L}{2} < y < \frac{L}{2} \\ [B_2 \cos \frac{K_1 L}{2} e^{K_2 L/2}] e^{-K_2 y} & p/y > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (15)$$

II.2 Segunda classe

Definida pela equação (14):

$$K_1 \operatorname{cotg} \frac{K_1 L}{2} = -K_2$$

e com a função de onda do elétron dada por

$$\phi(y) = \begin{cases} [-B_1 \operatorname{sen} \frac{K_1 L}{2} e^{K_2 L/2}] e^{K_2 y} & p/y < -\frac{L}{2} \\ B_1 \operatorname{sen} K_1 y & p/ -\frac{L}{2} < y < \frac{L}{2} \\ [B_1 \operatorname{sen} \frac{K_1 L}{2} e^{K_2 L/2}] e^{-K_2 y} & p/y > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (16)$$

As constantes B_1 e B_2 são determinadas através da normalização da função de onda em todo o espaço.

III. Poço de potencial quadrado finito assimétrico

Seja agora um elétron em um poço quântico de largura $L(0 < y < L)$, confinado pelo potencial $V(y)$, dado por:

$$V(y) = \begin{cases} V_0 & p/y < 0 \\ 0 & p/0 < y < L \\ V_0 & p/y > L \end{cases} \quad (17)$$

conforme mostrado na figura 2.

Estaremos novamente considerando o caso em que a energia do elétron é menor que a altura da barreira, isto é, $E < V_0$. Como no caso anterior, teremos as soluções:

$$\phi(y) = A \operatorname{sen} K_1 y + B \cos K_1 y \quad , \quad p/0 < y < L \quad (18)$$

$$\phi(y) = C e^{K_2 y} \quad , \quad p/y < 0 \quad (19)$$

$$\phi(y) = D e^{-K_2 y} \quad , \quad p/y > L \quad (20)$$

Usando novamente as condições de continuidade das autofunções e conservação da corrente nas interfaces do poço, teremos a seguinte relação a ser satisfeita:

$$\operatorname{tg} K_1 L = \frac{2K_1 K_2}{K_1^2 - K_2^2} \quad (21)$$

com a função de onda do elétron dada por

$$\phi(y) = \begin{cases} A \frac{K_1}{K_2} e^{K_2 y} & p/y < 0 \\ A \left(\operatorname{sen} K_1 y + \frac{K_1}{K_2} \cos K_1 y \right) & p/0 < y < L \\ A \left(\operatorname{sen} K_1 L + \frac{K_1}{K_2} \cos K_1 L \right) e^{K_2 L} e^{-K_2 y} & p/0 > L \end{cases} \quad (22)$$

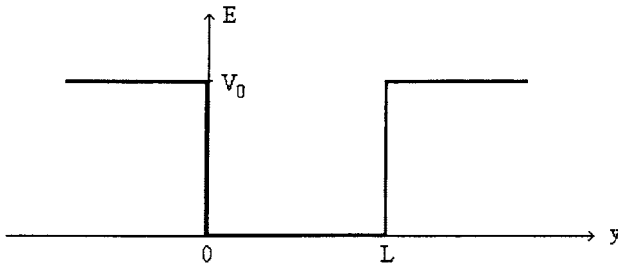


Figura 2. Representação de um poço de potencial quadrado assimétrico.

A constante A é determinada através da normalização da função de onda em todo o espaço.

IV. Comparação entre os autovalores de energia dos dois poços

Com o uso da relação trigonométrica

$$\operatorname{tg} K_1 L = \frac{2 \operatorname{tg} \frac{K_1 L}{2}}{1 - \operatorname{tg}^2 \frac{K_1 L}{2}}, \quad (23)$$

a equação (21) se torna:

$$K_1^2 - K_2^2 = 2K_1 K_2 \left(\frac{1 - \operatorname{tg}^2 K_1 L/2}{2 \operatorname{tg} K_1 L/2} \right) \quad (24)$$

que pode ser fatorada, resultando em:

$$\left(K_1 \operatorname{tg} \frac{K_1 L}{2} - K_2 \right) \cdot \left(K_1 \cot g \frac{K_1 L}{2} + K_2 \right) = 0 \quad (25)$$

Esta equação é o produto das equações (13) e (14) e, portanto, a solução do poço quântico finito assimétrico

é igual ao conjunto das soluções de primeira e segunda classe do poço quântico finito simétrico. Então, se encontrarmos as soluções das equações (13) e (14), estaremos encontrando as soluções da equação (21).

VI. Conclusões

A grande vantagem de trabalharmos com o poço assimétrico é que temos uma única expressão para a função de onda que descreve o conjunto completo dos níveis de energia, enquanto que para o poço simétrico temos duas classes de funções. A desvantagem ficaria por conta de encontrar as soluções para a equação transcendental (21). No entanto, no presente trabalho, nós mostramos que tais soluções podem ser obtidas a partir das soluções do poço simétrico, que são conhecidas e podem ser facilmente encontradas em livros de Mecânica Quântica.

Referências

1. T. Ando, A. B. Fowler e F. Stern, *Rev. Modern Phys.*, **54**, 437 (1982).
2. R. M. Eisberg, *Fundamentos da Física Moderna*. Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1979.
3. R. M. Eisberg, R. Resnick, *Física Quântica*. Campus, Rio de Janeiro, 1988.