

Uma Análise Semi-Clássica para Teoria de Perturbação na Forma

Rosana B. Santiago

*Departamento de Eletrônica Quântica,
Instituto de Física, Universidade do Estado do Rio de Janeiro,
Rua São Francisco Xavier 524 Maracanã, 20550-013, Rio de Janeiro, Brazil*

e

L. G. Guimarães

*Departamento de Física Nuclear,
Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro,
Cx. Postal 68528, 21945-970, Rio de Janeiro, Brazil.*

Recebido em 13 de janeiro, 2000

Neste trabalho, baseados na regra de quantização de Bohr-Sommerfeld e nos efeitos de tunelamento, mostramos que é possível estimar o espectro de energia de poços de potencial finitos por meio do comportamento do espectro de um poço infinito equivalente.

In this work based on Bohr-Sommerfeld quantization rule and wave function tunneling effects, we show that it is possible to estimate the energy levels of a finite confining potential well comparing the energy spectrum of this one with the behavior of the spectrum of an infinite well.

I Introdução

Em geral, nos cursos introdutórios de física moderna não é uma tarefa fácil introduzir o conceito de tunelamento. Acreditamos que isto se deva em parte à ausência de uma analogia clara¹ deste fenômeno com outros da mecânica clássica. Aqui vamos tentar mostrar que a idéia de comprimento de tunelamento pode ser vista como uma escala natural de medida de distância espacial. Por outro lado, certos problemas em física podem ter seu estudo facilitado por meio de teorias perturbativas. Em geral, na teoria de Rayleigh-Schrödinger modelamos o potencial relacionado ao problema real como sendo um potencial exatamente solúvel superposto a uma pequena perturbação. Aqui veremos que estes conceitos podem também ser estendidos às teorias semi-clássicas. Para tanto, faremos um estudo do espectro de energia de poços finitos utilizando as idéias do modelo de mecânica quântica de Bohr para a quantização de movimentos periódicos. Com isto, mostraremos que o problema de determinação do espectro de energias mais baixas de poços finitos é análogo ao cálculo dos mesmo níveis de energia de um poço mais largo porém delimitado por barreiras mais altas. Para tanto, é necessário que o conceito e os efeitos de tunelamento sejam introduzidos como novas escalas de comprimento associadas ao problema.

Este trabalho está organizado da seguinte forma. Na segunda Seção exporemos as idéias básicas relacionadas à teoria semi-clássica de perturbação na forma. Nas seções posteriores estudaremos dentro deste contexto três classes distintas de potenciais a saber: Harmônico, retangular e triangular. Por fim, finalizaremos o trabalho fazendo um resumo de nossos principais resultados.

II O modelo semi-clássico

Neste trabalho vamos admitir que uma partícula de massa m seja confinada por um potencial da forma:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2mL^2} V_0 \mu(x - x_0) \quad (1)$$

Sendo μ uma função da posição da partícula e as grandezas positivas V_0 e L representando respectivamente escalas apropriadas de energia e comprimento. Além disto, sem perda de generalidade vamos admitir que x_0 seja um ponto onde o potencial e a força sejam nulos. Desta forma, estamos interessados em obter estimativas para as auto-energias associadas à seguinte equação de Schrödinger unidimensional e independente do tempo:

¹ Achamos que o conceito de ondas evanescentes comumente abordado em livros-texto não é muito apropriado para esta tarefa.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2mL^2} V_0 \mu(x - x_0) \psi_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \varepsilon_n \psi_n \quad (2)$$

$-\infty < x < \infty$

onde temos associadas às auto-funções $\psi_n(x)$, as respectivas escalas ε_n de auto-energias (em unidades reduzidas). Além disso, como V_0 é finito, existe um número finito $n_{\max} + 1$ de estados ligados, de tal forma que $n = 0, 1, \dots, n_{\max}$. Para fazermos uma análise semi-clássica é conveniente reescrever a equação diferencial(2) da seguinte forma:

$$\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + k_n^2(x) \psi_n = 0 ; \quad -\infty < x < \infty, \quad (3)$$

onde definimos k_n o momento efetivo como

$$k_n(x) \equiv \frac{\sqrt{\varepsilon_n - V_0 \mu(x - x_0)}}{L} ; \quad x_1(\varepsilon_n) \leq x \leq x_2(\varepsilon_n), \quad (4)$$

sendo $x_{2,1}(\varepsilon_n)$ os pontos de retorno clássicos, ou seja, são os zeros do momento efetivo ($k_n(x_{2,1}) = 0$). A regra de quantização de Bohr-Sommerfeld [1] nos diz que

$$\int_{x_1}^{x_2} dx k_n(x) = (n + \frac{1}{2}) \pi . \quad (5)$$

Em geral, a regra de quantização(5) dá origem a equações transcendentais cujos zeros são os valores possíveis para as auto-energias ε_n . Além disso, é interessante notar da Fig. 1, que a área hachurada sob a curva k_n vale $(n + 1/2)\pi$. Portanto para um dado valor de ε_n , pode haver diferentes curvas passando por pontos de retorno próximos a $x_{2,1}$, tais que sua área também seja $(n + 1/2)\pi$. Para entendermos isto melhor vamos olhar para a série de Taylor de $k_n(x)$ em torno de x_0 , a saber:

$$k_n(x) \sim L^{-1} \sqrt{\varepsilon_n} \left(1 - \frac{1}{4\varepsilon_n} \left[V_0 \frac{d^2 \mu}{dx^2} \right] \Big|_{x_0} (x - x_0)^2 + O(x - x_0)^3 \right) . \quad (6)$$

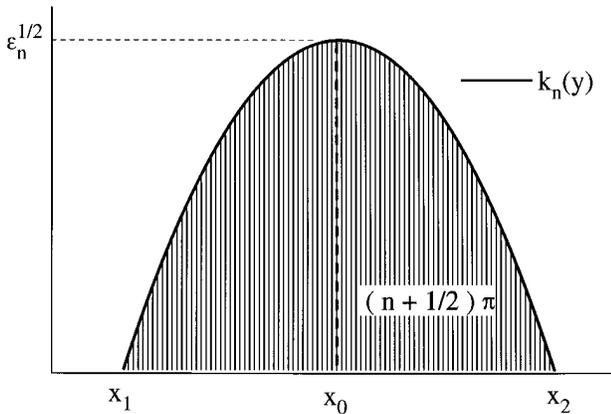


Figura 1. Comportamento do momento efetivo k_n . Observe que k_n , possui um máximo em x_0 e zeros em $x_{2,1}$. A regra de quantização de Bohr-Sommerfeld(5) afirma que a área hachurada acima vale $(n + 1/2)\pi$.

Desta forma uma vez que o valor de ε_n é adotado como fixo, curvas com a propriedade de preservação de área acima citada devem ter o termo entre colchetes da expansão em Taylor(6) bastante semelhantes. Em outras palavras, para que isto ocorra é necessário que o produto da barreira de potencial pela curvatura do mesmo na vizinhança de x_0 varie pouco. Por exemplo, sabemos que os valores das auto-energias associadas a poços quânticos crescem à medida que os valores característicos das larguras efetivas destes poços decrescem. Porém, isto também ocorre quando a altura das barreiras

que delimitam o poço crescem. Ou seja, do ponto de vista do espectro, existe um mecanismo competitivo entre a largura de poços versus a altura de barreiras. Este fato nos permite introduzir um procedimento sistemático de cálculo de espectro de energia baseado em perturbação na forma do potencial. Por exemplo, para um dado valor específico de auto-energia associada a um poço finito podemos também associá-la a um poço infinito porém mais largo. Sendo que esta nova escala de largura do poço será delimitada pelo comprimento de tunelamento ξ (veja a Fig. 2)). Obviamente, este procedimento não é único. Entretanto, muitas vezes o fato da barreira de potencial ser ilimitada introduz condições de contorno que facilitam a resolução do problema. A Fig. 2 compara o potencial $V_0 \mu(x)$ com o potencial modelador $U_0 \nu(x)$. Suponha, por outro lado, que seja inviável uma resolução exata ou mesmo semi-clássica do problema real $V_0 \mu(x)$, entretanto isto não ocorra para o potencial modelador $U_0 \nu(x)$. Desta forma, admitamos por exemplo que no limite de $U_0 \rightarrow \infty$, possamos aplicar a regra de quantização(5) ao potencial $U_0 \nu(x)$ para estimar uma dada auto-energia sua. Sendo assim, podemos também estimar o espectro associado ao problema real $V_0 \mu(x)$ de poço de profundidade finita contanto que sejam adicionadas às escalas de comprimento do problema modelado o comprimento de tunelamento ξ (veja Fig.2). Uma vez que obteve-se explicitamente $\varepsilon_n(\xi)$ aplicando-se a Eq.(5) ao potencial modelador $U_0 \nu(x)$, a Fig. 2 sugere que uma estimativa

para o comprimento de tunelamento ξ é a solução da seguinte equação transcendental

$$\xi \rightarrow \xi_n \approx x'_2(\varepsilon_n) - x_2(\varepsilon_n). \quad (7)$$

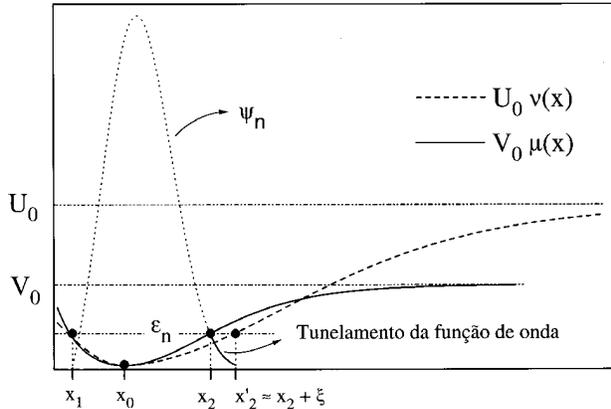


Figura 2. O espectro de um poço de profundidade V_0 pode ser interpretado como sendo o espectro de um poço U_0 mais profundo porém com uma ‘largura efetiva’ maior devido ao tunelamento da função de onda.

No caso de poços finitos porém descontínuos nos pontos $x = x_d$, essas idéias podem também serem aplicadas. Para tanto, é necessário se utilizar uma regra de quantização similar à Eq.(5) aplicável ao caso de potenciais descontínuos. Tal equação é expressa como [2]

$$\int_{x_1}^{x_2} dx k_n(x) = - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_d \arctan \left(\left| \frac{k_n(x_d - \epsilon)}{k_n(x_d + \epsilon)} \right| \right)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[(1 - \eta^2) \frac{d\psi_n}{d\eta} \right] + \left(\frac{s}{L} \right)^2 \left[V_0 - \frac{(V_0 - \varepsilon_n)}{1 - \eta^2} \right] \psi_n = 0 ; -1 < x < 1. \quad (10)$$

Observando que a Eq. (10) é a equação diferencial das funções associadas de Legendre e que além disso, também temos que impor a condição de contorno que ψ_n se anule na origem, segue-se então que as auto-energias são dadas por

$$\varepsilon_n = \frac{2}{(s/L)^2} (2n + 3/2) \sqrt{V_0 (s/L)^2 + 1/4} - \frac{1}{(s/L)^2} [2(n + 1)(2n + 1) + 1/2]. \quad (11)$$

Por outro lado, segue da regra de quantização (5) que ε_n satisfaz

$$\varepsilon_n = \frac{2\sqrt{V_0}}{(s/L)} (2n + 1) \left[1 - \frac{(2n + 1)}{2(s/L)\sqrt{V_0}} \right]. \quad (12)$$

Uma vez que V_0 é finito, a distância entre níveis consecutivos diminui a medida que n cresce. Este tipo de comportamento nos permite estimar n_{\max} , ou seja,

$$+ \left(n + \frac{3}{4} \right) \pi. \quad (8)$$

Nós abordamos com essas idéias problemas de poços de potenciais finitos com formas simples tais como parabólica, retangular e triangular. A seguir exibiremos estes resultados em mais detalhes.

III Comparando o oscilador harmônico com o potencial $\tanh^2(x)$

Neste trabalho, definimos como potenciais contínuos aqueles que com exceção da origem $x = 0$ (que por ventura pode se tornar um eixo de simetria de inversão) são em todo restante do eixo real funções infinitamente diferenciáveis (C^∞). Em caso contrário, dizemos que o potencial é descontínuo, e se torna necessário se impor como condição de contorno a continuidade da função de onda e sua derivada nestes pontos de discontinuidade.

Vamos inicialmente analisar o problema de uma partícula sujeita ao potencial dado por

$$\mu(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ \tanh^2(x/s) & 0 < x < \infty, \end{cases} \quad (9)$$

onde s é o alcance do potencial. Para resolvermos o problema acima[3] é conveniente fazermos a mudança de variável $\eta = \tanh(x/s)$ na equação diferencial(3), obtendo

admitindo que n_{\max} é um ponto crítico da Eq.(12) obtemos que

$$n_{\max} \leq \frac{s\sqrt{V_0} - 1}{2}. \quad (13)$$

Para $V_0 = 200$ e $s = L$, a Fig. 3 mostra todos os possíveis níveis de energia(11). É interessante notar que para estes valores de V_0 e s , a Eq.(13) fornece que $n_{\max} \sim 6.57$. Comparando os resultados numéricos nos

casos exato (11) e semi-clássico (12), vemos, da tabela 1, que à medida que n cresce os dois resultados se aproximam. Isto é um comportamento típico dos resultados semi-clássicos, uma vez que a aproximação (5) é tão melhor quanto mais afastados estejam os pontos de retorno x_1 e x_2 . Por outro lado, do ponto de vista de suas fórmulas explícitas, comparando o resultado exato (11) com o resultado semi-clássico (12), vemos que no caso de poços muito profundos ou largos, que este último resultado pode ser interpretado como o limite assintótico do primeiro (veja a tabela 1) para mais detalhes). Além disso para poços muito profundos ($V_0 \rightarrow \infty$), podemos notar de (12) que a separação entre níveis consecutivos é quase constante. Este fato sugere que neste limite podemos modelar o comportamento do potencial (9) como o de um oscilador harmônico do tipo:

$$\mu(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ (x/r)^2 & 0 < x < \infty \end{cases} \quad (14)$$

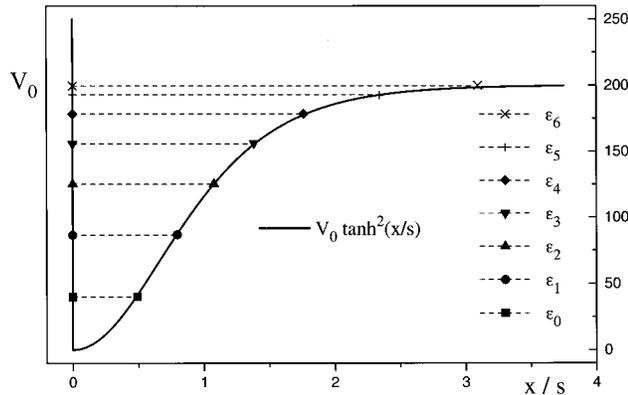


Figura 3. Perfil do potencial (9) e seus respectivos níveis de energia (11) para $V_0 = 200$ e $s = L$.

n	ε_n^{Exato}	ε_n^{BS}	Erro(%)
0	39.95291510	27.28427124	31.70893495
1	86.55680190	75.85281371	12.36643216
2	125.1606887	116.4213562	6.982489942
3	155.7645755	148.9898987	4.349305212
4	178.3684623	173.5584411	2.696676945
5	192.9723491	190.1269836	1.474493892
6	199.5762359	198.6955261	0.441289914

Tabela 1: Comparação das auto-energias para $V_0 = 200$ e $s = L$, com o resultado exato ε_n^{Exato} (veja Eq.(11)) com o resultado semi-clássico ε_n^{BS} dado pela Eq.(12). Observe na última coluna que o erro relativo entre os dois resultados decresce à medida que n cresce.

Desta forma, uma vez que no caso do oscilador harmônico os resultados exato e semi-clássico coincidem, segue que as auto-energias devem satisfazer a equação

$$\varepsilon_n = \frac{2\sqrt{V_0}}{(r/L)}(2n + 1). \quad (15)$$

Portanto, para uma dada auto-energia ε_n , a solução de (15), se adotarmos $r \rightarrow r_n = s + \xi_n$. Segue de (7) que neste caso particular, uma estimativa para o comprimento de tunelamento é dada por

$$\xi_n \approx s \varepsilon_n / (2V_0). \quad (16)$$

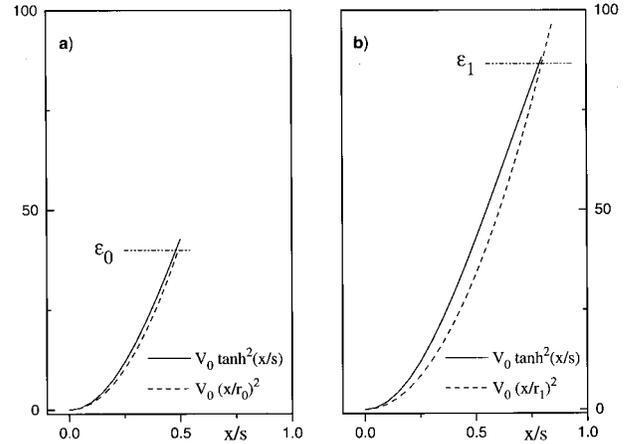


Figura 4. Potenciais (9) com o modelador (14). Para os estados a) Fundamental e b) Primeiro Excitado com $V_0 = 200$ e $s = L$.

Vemos que (12) e (15) possuem o mesmo comportamento assintótico quando $V_0 \rightarrow \infty$. Isto significa que para obtermos o espectro, podemos resolver simultaneamente Eqs.(15 e 16) ao invés de resolvermos Eq.(12). Certamente isto se tornaria extremamente útil caso não fosse possível se obter explicitamente (12) ou (11). Para $V_0 = 200$ e $s = L$, as Figs. 4a e b mostram para o estado fundamental e primeiro estado excitado respectivamente os possíveis potenciais modeladores do tipo oscilador harmônico (14). Note-se, como era de se esperar, que em ambos os casos os potenciais modeladores são mais 'largos' que o potencial finito(9). Passemos agora a aplicar estas idéias a potenciais descontínuos.

IV Os potenciais finitos retangular e triangular

Inicialmente para analisar estes dois tipos de potenciais é conveniente se introduzir um fator π^2 nas escalas de energia, de forma que as equações de Schrödinger (2) e momento efetivo k_n (veja a Eq.(4)) passam a ser respectivamente reescritas como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} V_0 \mu(x - x_0) \psi_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \varepsilon_n \psi_n \quad (17)$$

$$-\infty < x < \infty,$$

com

$$k_n(x) \equiv \pi \frac{\sqrt{\varepsilon_n - V_0} \mu(x - x_0)}{L} \quad (18)$$

$$x_1(\varepsilon_n) \leq x \leq x_2(\varepsilon_n).$$

Sendo assim, definimos o potencial retangular finito como

$$\mu(x) = \begin{cases} 0 & ; |x| < s/2 \\ V_0 & ; |x| > s/2 \end{cases} \quad (19)$$

Como este potencial é par, suas auto-funções possuem paridade definida. Isto introduz a útil condição de contorno que as auto-funções ímpares e a primeira derivada das pares devam se anular na origem. Desta forma exigindo também a continuidade da derivada logarítmica de ψ_n em $x = s/2$ ou em $x = -s/2$, pode-se mostrar [1] que o espectro é solução da seguinte equação transcendental é dada por

$$\frac{s}{L} \sqrt{\varepsilon_n} + \frac{2}{\pi} \arctan \left(1/\sqrt{\frac{V_0}{\varepsilon_n} - 1} \right) = (n+1)\pi \quad (20)$$

$$n = 0, 1, \dots, n_{\max}^s$$

No caso de aplicarmos a regra de quantização (8) obtemos um resultado análogo à (20) onde troca-se $(n+1) \rightarrow (n+3/4)$. Nos dois casos, uma maneira mais conveniente de se escrever (20) é a seguinte

$$\varepsilon_n(V_0) = \frac{(n+1)^2 \pi^2}{s^2} \left(\frac{s}{s+2\ell_n} \right)^2, \quad (21)$$

onde definimos uma escala de comprimento ℓ_n dada por

$$\ell_n(V_0) \equiv \frac{L}{\pi \sqrt{\varepsilon_n}} \arctan \left(1/\sqrt{\frac{V_0}{\varepsilon_n} - 1} \right). \quad (22)$$

Observe que no limite de $V_0 \rightarrow \infty$, ℓ_n é da mesma ordem do comprimento de tunelamento (7) (veja Fig.2) ou seja

$$\ell_n \approx \frac{L}{\pi \sqrt{V_0 - \varepsilon_n}} = \frac{L}{s} \xi_n. \quad (23)$$

Um vez que $\ell_n \rightarrow 0$ quando $V_0 \rightarrow \infty$, então podemos neste limite reescrever (21) como

$$\varepsilon_n(V_0) \approx \frac{(n+1)^2 \pi^2}{(s+2\xi_n L/s)^2}. \quad (24)$$

A Eq.(24) acima pode ser interpretada como o espectro de energia de um poço infinito porém com uma largura $\xi_n(L/s) + s + \xi_n(L/s)$, onde cada fator proporcional a ξ_n deve-se ao tunelamento da função de onda nas duas regiões classicamente proibidas $-\infty < x \leq -s/2$ e $s/2 < x \leq \infty$.

Observe que com isto para os níveis de mais baixa energia podemos fazer uma estimativa rudimentar para o espectro, como sendo

$$\varepsilon_n(V_0) \approx \frac{(n+1)^2 \pi^2}{\left(s + 2L / \left(\pi \sqrt{V_0 - [(n+1)\pi/s]^2} \right) \right)^2} \quad (25)$$

com $n \ll n_{\max}^s$.

De forma análoga podemos estudar o problema de um poço triangular finito. Neste caso, definimos o potencial da seguinte forma

$$\mu(x) = \begin{cases} 2V_0 |x|/t & \text{para } |x| < t/2 \\ V_0 & \text{para } |x| > t/2. \end{cases} \quad (26)$$

Novamente o potencial é par e t é seu alcance. Porém neste caso as funções de onda com paridade definida são combinações lineares de funções regulares Ai e irregulares (no infinito) Bi de Airy [4]. Desta forma, usando a simetria das auto-funções do problema e exigindo a continuidade da sua derivada logarítmica em $x = t/2$, o espectro de energia tem que satisfazer a seguinte equação transcendental

$$\sqrt[3]{2\pi^2 V_0} \frac{L}{t} \left[\frac{Ai'(\gamma_n(x)) - \Gamma_n Bi'(\gamma_n(x))}{Ai(\gamma_n(x)) - \Gamma_n Bi(\gamma_n(x))} \right] \Big|_{x=t/2} = -\pi \sqrt{V_0 - \varepsilon_n}, \quad (27)$$

onde definimos $\gamma_n(x) \equiv \sqrt[3]{2\pi^2 V_0 L/t} (x - t \varepsilon_n/V_0)$ e,

$$\Gamma_n \equiv \frac{1}{2} \left[(1 + (-1)^n) \frac{Ai'(\gamma_n(0))}{Bi'(\gamma_n(0))} + (1 - (-1)^n) \frac{Ai(\gamma_n(0))}{Bi(\gamma_n(0))} \right], \quad (28)$$

Em geral, a solução numérica de (27) não é uma tarefa trivial. Porém aplicando-se a regra de quantização (8) ao potencial (26) obtém-se um resultado relativamente simples para o espectro, a saber

$$\varepsilon_n \approx \left(\frac{3}{2} \frac{V_0}{(t+2\ell_n)} \right)^{2/3} \left(n + \frac{3}{4} \right)^{2/3}$$

$$\text{com } n = 0, 1, \dots, n_{\max}^t, \quad (29)$$

onde ℓ_n é descrito pela Eq.(23). De forma análoga ao problema do poço retangular, podemos interpretar (29) como sendo as auto-energias associadas a um poço triangular infinito porém com sua largura efetiva $t + 2\ell_n$ mais larga que o caso finito. Essa diferença entre larguras deve-se à penetração da função de onda nas regiões classicamente proibidas. Além disso para ambos os tipos de poços tanto retangular como triangular, usando-se as fórmulas semi-clássicas acima podemos estimar os seus respectivos números máximos de estados ligados, n_{\max}^s e n_{\max}^t , tais que

$$n_{\max}^s \leq 2s \sqrt{V_0} - 1, \quad (30)$$

$$n_{\max}^t \leq \frac{4}{3}t \sqrt{V_0} - \frac{3}{2}. \quad (31)$$

Comparando (30) com (31), vemos que para poços de mesmas larguras e alturas, o poço retangular permite a existência de mais estados ligados que o triangular. Isto deve-se à variação com a energia dos pontos de retorno associados ao poço triangular, fato este que não ocorre no caso retangular. A Fig. 5 compara os níveis de energia de poços retangular com triangular que possuem barreiras de mesma altura (V_0) e largura ($t = s = L$). Os símbolos com formas quadradas e triangulares representam os resultados semi-clássicos que

são dados respectivamente pelas Eqs.(24 e 29) enquanto que as barras verticais são os resultados numéricos exatos obtidos resolvendo-se (20) e (27) respectivamente. Observe que neste casos, $n_{\max}^s = 27 > n_{\max}^t = 17$ confirmando os resultados semi-clássicos dados em (30) e (31).

V Conclusão

Neste trabalho, através de argumentos semi-clássicos, mostramos que é possível se estimar o espectro de poços finitos modelando-os por potenciais também confinantes com larguras efetivas maiores, porém cujas barreiras possam ser infinitas. Este acréscimo na largura do poço modelador deve-se basicamente à penetração da função de onda nas regiões classicamente proibidas. Com essas idéias, abordamos problemas de poços de potenciais finitos com formas simples tais como parabólica, retangular e triangular. Estes resultados se mostraram bastante simples e satisfatórios quando comparados com os resultados exatos descritos em geral em termos de funções especiais. Desta forma, acreditamos que a metodologia semi-clássica aqui proposta seja uma pequena contribuição para uma compreensão pedagógica dos mecanismos inerentes da mecânica quântica como por exemplo, o tunelamento. Este trabalho tem apoio parcial das agências de fomento CNPq e FAPERJ.

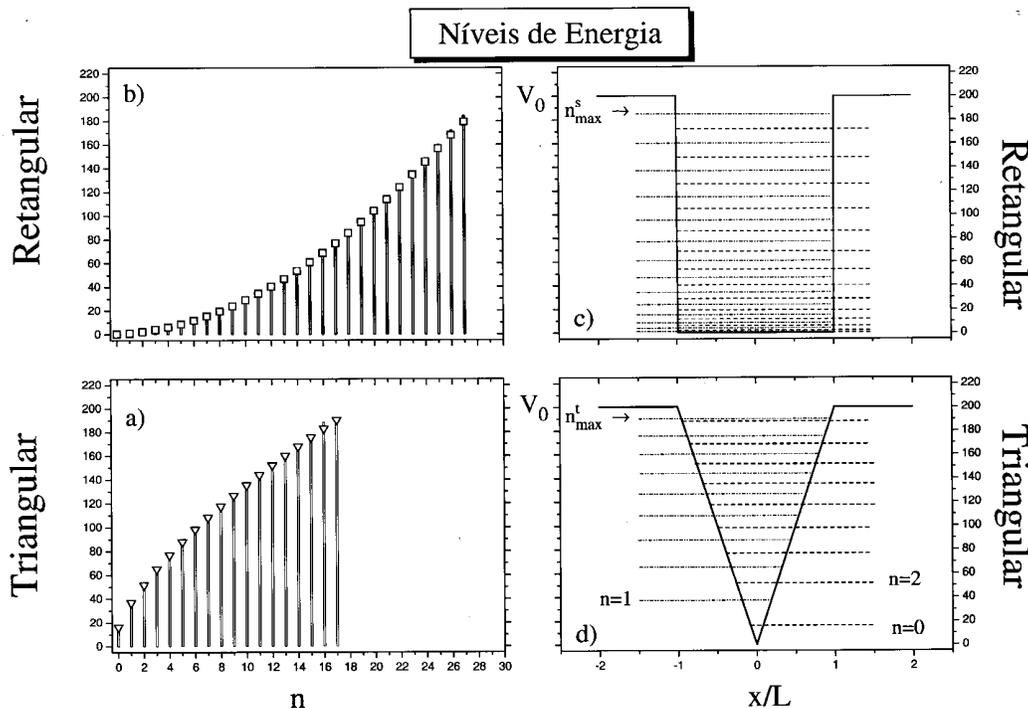


Figura 5. Níveis de energia de poços retangular com triangular com barreiras de mesma altura (V_0) e largura ($t = s = L$). Os quadrados, os triângulos e as barras verticais representam os resultados semi-clássicos e exatos dados respectivamente pelas Eqs.(24, 29) e Eqs.(20, 27). $V_0 = 200$ e $s = L$.

References

- [1] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, (John Wiley & Sons, N. Y., 1970).
- [2] M. V. Berry, K. E. Mount, *Rep. Prog. Phys.* **35**, 315 (1972).
- [3] L. G. Guimarães, *J. Phys. A* **28**, L233 (1995).
- [4] M. Abramowitz, I. Stegun, eds., *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1968).
- [5] J. J. Sakurai and S. F. Tuan, *Modern Quantum Mechanics*, (Benjamin-Cummings, LA, 1985).