

MATERIAIS E MÉTODOS

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER PARA POÇOS UNIDIMENSIONAIS*

P. Murilo Oliveira

Instituto de Física - Universidade Federal Fluminense

e

S. Costa Ribeiro

Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica - RJ

INTRODUÇÃO

No início deste século foram observados alguns fenômenos de natureza microscópica que contrariavam o conceito microscópico de "partícula" bem como o conceito de "onda", enraizados na mente humana. Ficou claro que os entes microscópicos tais como o elétron não se comportavam da mesma forma que uma bola de gude, uma "partícula clássica", mas apresentavam características ondulatórias. Por outro lado, as ondas luminosas também não se comportavam como uma vibração que se propaga ao longo de uma corda, esta uma "onda clássica", mas apresentavam comportamento corpuscular (não ondulatório).

Esta dualidade partícula-onda foi incorporada por Schrödinger em sua teoria da mecânica ondulatória de 1925¹, na qual uma partícula é descrita por uma onda: a função de onda $\psi(x,t)$ que pode ser obtida a partir da equação (1) postulada por Schrödinger.

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

A função $V(x)$ é a energia potencial de interação da partícula com o meio externo, m é a sua massa, e \hbar é a constante de Planck ($\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$ J.s.). A presença da unidade imaginária i na equação de Schrödinger indica que a função de onda $\psi(x,t)$ assume necessariamente valores complexos (não pode ser expressa em números reais). Como os valores das grandezas físicas observáveis (massa, posição, velocidade, carga elétrica, tempo, etc.) são necessariamente números reais, podemos concluir que a função de onda $\psi(x,t)$ associada a uma partícula não é um observável físico. No entanto, segundo a teoria de Schrödinger,

* Trabalho parcialmente financiado pela FINEP e CNPq.

todas as informações acessíveis a respeito de uma dada partícula estão contidas na sua função de onda $\psi(x,t)$. Sob este ponto de vista, a função de onda $\psi(x,t)$ é um artifício concebido para sintetizar todas as informações a respeito dos valores assumidos pelas várias grandezas relativas à partícula (posição, velocidade, etc.)

A consequência mais estranha da dualidade partícula-onda provém da relação entre a velocidade de uma partícula e o comprimento de onda λ (período espacial) da onda associada à mesma partícula. Esta relação

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (2.a)$$

foi sugerida teoricamente por Louis de Broglie² em 1924, e confirmada posteriormente em experiências. A partir deste conceito, a natureza passa a ser descrita por uma nova entidade, que chamaremos onda-partícula, em substituição às ondas e partículas clássicas.

Sabendo-se que o comprimento de onda só pode ser definido para uma onda senoidal, podemos concluir que uma onda-partícula descrita por uma função de onda senoidal possui uma única velocidade bem definida, enquanto para uma outra onda-partícula descrita por outra função de onda não senoidal não podemos definir uma velocidade única. Podemos, no entanto, decompor a função $\psi(x,t)$ em uma soma de várias senóides, cada uma com um comprimento de onda diferente, correspondendo portanto a uma gama de valores diferentes possíveis para a velocidade da onda-partícula. Assim, somos obrigados a admitir uma faixa de incerteza Δv na medida da velocidade da onda-partícula. Por outro lado, a posição da onda-partícula ao longo do eixo x estará restrita à região em que a função de onda $\psi(x,t)$ não é nula, o que introduz uma faixa de incerteza Δx na medida da posição. Por argumentos puramente matemáticos, sabe-se que a quantidade de senóides necessárias na composição de uma função $\psi(x,t)$ e, conseqüentemente, a largura da faixa Δv são tão maiores quanto menor for a região Δx onde a função não é nula. Desta forma as incertezas Δv e Δx são correlacionadas: quanto mais precisa for a medida da posição de uma onda-partícula, menos precisa (maior incerteza) será a medida simultânea de sua velocidade e vice-versa. Na referência 3 é feita uma análise qualitativa detalhada desta propriedade da natureza, que foi primeiramente compreendida por Heisenberg, em 1926⁴, quando enunciou o seu princípio de incertezas:

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{2m} \quad (3.a)$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{h}{2} \quad (3.b)$$

A interpretação física do significado da função de onda $\psi(x,t)$ foi elaborada por Max Born⁵, em 1927: a probabilidade de se encontrar a onda-partícula entre os pontos x e $x + dx$ é igual a $|\psi(x,t)|^2 dx$. Des ta forma, as características ondulatórias dos entes microscópicos tais como o elétron têm uma interpretação probabilística. O acaso, então, é um parâmetro relevante para o comportamento de um ente microscópi- co: medidas feitas sob condições idênticas podem apresentar resulta- dos diferentes. A informação à qual se tem acesso (pela própria natu- reza) é o conhecimento da probabilidade de que se obtenha cada um dos possíveis valores de uma medida, quando repetida várias vezes.

A mesma relação de Louis de Broglie existente entre a posição e a velocidade de uma onda-partícula também se verifica entre sua e- nergia e o período temporal T de sua função de onda através da rela- ção de Einstein

$$T = \frac{h}{E} \quad (2.b)$$

Assim como a dependência espacial da função de onda $\psi(x,t)$ as- sociada a uma onda-partícula com velocidade bem definida é senoidal , como definida na equação (2.a), no caso de uma onda-partícula com e- nergia bem definida, a dependência no tempo de $\psi(x,t)$ também é senoi- dal, como definida na equação (2.b), e pode ser fatorada na equação de Schrödinger (1), dando como resultado a equação independente do tem- po:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.a)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.b)$$

A função $\psi(x)$ é a parte espacial da função de onda $\psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ e é chamada auto-funções do operador energia (entre cha- ves na equação (4.b)), uma vez que tal operador não a modifica mas ape- nas a multiplica pelo valor de E que é a medida da energia da onda- partícula.

Como a unidade imaginária i não está presente na equação (4.a), a auto função $\psi(x)$ poderá sempre ser tomada real. Note-se que, neste caso, a onda partícula não poderá ter velocidade bem definida ($\psi(x)$ não será auto-funções do operador velocidade).

2. O METODO NUMÉRICO⁵

A equação de Schrödinger independente do tempo pode ser escrita na forma (4.c):

$$\frac{d^2\psi(u)}{du^2} = \{P(u) - \epsilon\}\psi(u) \quad (4.c)$$

A nova variável u define a posição $x=u \cdot a$ da partícula, medida na unidade arbitrária previamente fixada a . Desta forma, u é adimensional. A função $P(u)$ e o valor ϵ , também adimensionais, representam respectivamente a energia potencial e a energia total da onda-partícula, e são definidas nas relações

$$x = u \cdot a \quad (a \text{ é a unidade de comprimento})$$

$$P(u) = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V(x) \quad (5)$$

$$\epsilon = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E$$

A forma (4.c) da equação de Schrödinger é conveniente para soluções numéricas porque só contém valores adimensionais.

O eixo u (eixo x dimensional) será dividido em partes iguais a um valor previamente arbitrado H , e a função $\psi(u)$ será definida por seus valores no início de cada intervalo de largura H , como mostra a figura 1.

Desde já podemos notar que a função $\psi(u)$ estará mais precisamente definida quanto menor for o valor de H escolhido. O método será também mais preciso quanto menor for este valor de H . A imprecisão numérica do método, no entanto, pode sempre ser atenuada indefinidamente se escolhermos valores cada vez menores para H . Em outras palavras, qualquer limite de precisão poderá ser atingido, por mais que se necessitem precisos os resultados numéricos obtidos. Quanto menor o intervalo H , maior será o número de pontos tomados no eixo u , e portanto maior será o tempo gasto de computação. Existe, então, um compromisso entre a precisão desejada e o tempo necessário para atingi-la. Aliás, este é um exemplo prático do princípio das incertezas (2.b), já que os dois algarismos (0 e 1) para serem diferenciados num computador necessitam de uma diferença de energia $\epsilon_0 - \epsilon_1 = \epsilon$. A incerteza ΔE nas energias correspondentes a cada algarismo (ϵ_0 ou ϵ_1) deve ser, portanto, menor do que ϵ ($\Delta E < \epsilon$), o que limita o tempo Δt correspondente a cada algarismo ($\Delta t > \frac{\hbar}{2\epsilon}$).

Tomemos um ponto u_i do eixo u , e seus vizinhos u_{i-1} e u_{i+1} , como na figura 2.

A primeira derivada de $\psi(u)$ no ponto $v_i = (u_i + u_{i-1})/2$ pode ser aproximada pela equação

$$\left. \frac{d\psi}{du} \right|_{u=v_i} \approx \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{u_i - u_{i-1}} = \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{H} \quad (6.a)$$

De forma análoga, a equação (6.b) aproxima a primeira derivada de $\psi(u)$ no ponto $w_i = (u_i + u_{i+1})/2$:

$$\left. \frac{d\psi}{du} \right|_{u=w_i} \approx \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{u_{i+1} - u_i} = \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{H} \quad (6.b)$$

A segunda derivada de $\psi(u)$ no ponto u_i é aproximada pela equação

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2\psi}{du^2} \right|_{u=u_i} &\approx \frac{\left. \frac{d\psi}{du} \right|_{u=w_i} - \left. \frac{d\psi}{du} \right|_{u=v_i}}{w_i - v_i} = \frac{\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{H} - \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{H}}{H} = \\ &= \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{H} \end{aligned} \quad (7)$$

Introduzindo a aproximação (7) na equação (4.c) para $u=u_i$, é obtida a relação

$$\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{H} = \{P(u_i) - \epsilon\}\psi_i \quad (8.a)$$

A equação (8.a) permite que conheçamos o valor de ψ_{i+1} , uma vez conhecidos ψ_i e ψ_{i-1} , como na equação

$$\psi_{i+1} = \{2 + H^2 [P(u_i) - \epsilon]\}\psi_i - \psi_{i-1} \quad (8.b)$$

Alternativamente, a equação (8.c) expressa o valor de ψ_{i-1} em função de ψ_i e ψ_{i+1} .

$$\psi_{i-1} = \{2 + H^2 [P(u_i) - \epsilon]\}\psi_i - \psi_{i+1} \quad (8.c)$$

As equações (8.b) e (8.c) nos permitem calcular todos os valores ψ_i , sucessivamente, a partir de apenas dois previamente arbitrados, por exemplo ψ_0 e ψ_1 . Determina-se primeiro o valor de ψ_2 , usando ψ_0 e

ψ_1 na equação (8.b); depois determina-se ψ_3 , usando ψ_1 e ψ_2 na mesma equação, e assim por diante. Os valores ψ_{-1} , ψ_{-2} , ψ_{-3} , etc. serão determinados da mesma forma pela equação (8.c). Depois de determinados os valores ψ_i ao longo do eixo u , utilizaremos critérios baseados na interpretação física da função $\psi(u)$ para considerar como válida ou não a nossa escolha inicial de ψ_0 e ψ_1 . A seção seguinte é dedicada a enunciar tais critérios.

3. CONDIÇÕES DE CONTORNO

Consideraremos o caso em que a função $P(u)$ é um poço de potencial, caso em que a onda-partícula está confinada em uma região limitada do eixo u , como mostra a figura 3.

Com energia total ϵ , a onda-partícula estaria confinada entre os pontos A e B segundo a teoria clássica. Devido ao princípio de incertezas, no entanto, não é nula a probabilidade de se encontrar a onda-partícula além do ponto B ou antes do ponto A. Esta probabilidade, no entanto, deve diminuir à medida em que se afaste da região central do eixo u , tanto no sentido de $u \rightarrow +\infty$ quanto no sentido de $u \rightarrow -\infty$. As condições de contorno que devemos respeitar são, portanto, as expressas na relação

$$\begin{aligned}\psi(u \rightarrow +\infty) &\rightarrow 0 \\ \psi(u \rightarrow -\infty) &\rightarrow 0\end{aligned}\tag{9}$$

Nas regiões $u \rightarrow +\infty$ e $u \rightarrow -\infty$, a energia potencial $P(u)$ é maior do que a energia total ϵ , e conseqüentemente a função $\psi(u)$ e sua segunda derivada têm o mesmo sinal, segundo a equação (4.c). Na mesma equação observa-se que a concavidade (segunda derivada) de $\psi(u)$ depende do valor ϵ . A figura 4 mostra o comportamento da função $\psi(u)$ quando se aumenta gradativamente o valor ϵ , na região $u \rightarrow +\infty$, a partir sempre dos mesmos valores ψ_i e ψ_{i+1} .

No caso da figura 4, nota-se que apenas a energia $\epsilon = \epsilon_c$ satisfaz à primeira condição de contorno (9). Concluimos que a onda-partícula sob a ação do poço de potencial da figura 3 não pode assumir qualquer valor para a energia ϵ , mas apenas valores muito bem escolhidos para que as duas condições de contorno (9) sejam respeitadas*. As energias permitidas para uma tal onda-partícula são quantizadas, isto

* Poder-se-ia pensar em modificar os valores de ψ_i e ψ_{i+1} , na figura 4, para que outra energia próxima de ϵ_c fosse permitida. Tal artifício não funciona porque $\psi(u)$ deve se anular também para $u \rightarrow -\infty$.

é, o conjunto de valores permitidos da energia é um conjunto discreto (não contínuo).

4. OUTRAS CARACTERÍSTICAS

Quando uma onda-partícula colide com uma parede intransponível, o potencial correspondente pode ser aproximado por um valor infinito* atrás da parede, como mostra a figura 5.

O valor da função $\psi(u)$ atrás da parede deve se anular para que a segunda derivada de $\psi(u)$ não seja infinita. Neste caso a condição de contorno se reduz a que a função $\psi(u)$ se anule no ponto B onde está a parede (em substituição à primeira condição (9)). Se a onda-partícula estiver confinada entre duas paredes, $\psi(u)$ se anulará nas duas posições em que se encontram as mesmas.

Quando o poço de potencial for simétrico, isto é $P(u) = P(-u)$, deveremos observar situações idênticas nos dois lados do eixo u . Isto pode ser conseguido de duas formas: i) para auto-funções pares, isto é $\psi(u) = \psi(-u)$, ou ii) para auto-funções ímpares, isto é $\psi(u) = -\psi(-u)$. O segundo caso se justifica porque $\psi(u)$ não é observável, mas $|\psi(u)|^2$ sim. No caso i) podemos notar que a função $\psi(u)$ terá tangente horizontal no ponto $u=0$, o que permite escolhermos de antemão $\psi_0 = \psi_1$ ** . No caso ii), poderemos impor de antemão $\psi_0 = 0$.

5. NORMALIZAÇÃO

A interpretação probabilística da função de onda atribui o valor $|\psi(x,t)|^2 dx$ à probabilidade de se encontrar a onda-partícula entre os pontos x e $x+dx$. Como consequência desta interpretação, podemos impor que a probabilidade de se encontrar a onda-partícula em qualquer ponto do eixo x seja igual a 1, como indica a equação

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (10.a)$$

* Um tal potencial não existe na natureza, mas serve como bom modelo para uma série de fenômenos reais.

** Esta é uma aproximação que poderia ser melhorada se determinássemos $\psi_1 = \psi_{-1}$ através de $P(0)$ e ψ_0 .

Se a onda-partícula tiver energia bem definida, a função de onda se expressa por $\psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$. Neste caso a condição (10.a) se simplifica na forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(u)^2 du = 1 \quad (10.b)$$

A função $\psi(u)$ que é solução da equação (4.c) não atende, em geral, à condição de normalização (10.b), mas o valor da integral será igual a um certo número positivo A^2 . Se dividirmos por A todos os valores ψ_i , a condição (10.b) passa a ser atendida. Nestas condições, diz-se que a nova função $\psi(u)$ está normalizada.

Há três parâmetros a serem determinados para uma solução $\psi(u)$ da equação (4.c). São eles a energia ϵ e os valores ψ_0 e ψ_1 . Há também três condições a serem respeitadas. São elas as duas condições (9) e a condição (10.b). O procedimento normal é descrito a seguir. Para um valor arbitrado de ψ_0 , determinam-se ψ_1 e ϵ de forma a serem satisfeitas as duas condições (9). Se o objetivo for apenas a obtenção das energias permitidas do sistema, sem levar em conta a normalização das funções de onda, o problema está terminado. Para normalizar a função $\psi(u)$, basta calcular a integral (10.b), encontrando o valor A^2 e, finalmente, dividir todos os ψ_{i5} por A . Em geral esta integração é feita simultaneamente com a obtenção dos valores sucessivos de ψ_i . Nos casos apresentados nas seções seguintes, usamos a fórmula de Simpson (11) para executar a integração de $\psi(u)^2$:

$$\int_0^{\infty} \psi(u)^2 du \approx \frac{H}{3} \{ \psi_0^2 + 4\psi_1^2 + 2\psi_2^2 + 4\psi_3^2 + 2\psi_4^2 + \dots + 4\psi_{N-1}^2 + \psi_N^2 \} \quad (11)$$

O valor de N na fórmula de Simpson deve ser par e é tomado grande o suficiente para que se possa desprezar a integral na parte restante do eixo u , onde $u > NH$.

6. TESTE PARA O POÇO QUADRADO INFINITO

As auto-funções do poço definido na figura 6.a são facilmente obtidas analiticamente, sem necessidade de métodos numéricos. É um bom teste para o método numérico sugerido nas seções anteriores. Na figura 6.a estão ainda definidas em escala as primeiras quatro energias permitidas (solução analítica) $\epsilon_1 = \pi^2$, $\epsilon_2 = 4\pi^2$, $\epsilon_3 = 9\pi^2$ e $\epsilon_4 = 16\pi^2$.

Como este poço é simétrico, escolhemos os valores iniciais

$\psi_0 = \psi_1 = 1$ para as auto-funções relativas às energias ϵ_1 e ϵ_3 , e os valores iniciais $\psi_0 = 0$ e $\psi_1 = 0.1$ para ϵ_2 e ϵ_4 . Com um passo $H = 0.02$, as funções obtidas estão apresentadas na figura 7.

Neste exemplo, ao invés de determinar as energias por tentativas, preferimos utilizar os valores conhecidos $\epsilon_1 = \pi^2$, $\epsilon_2 = 4\pi^2$, $\epsilon_3 = 9\pi^2$ e $\epsilon_4 = 16\pi^2$. Os valores de ψ_{25} devem se anular, pois $u_{25} = 25H = 0.5$ é a posição da parede intransponível. A tabela 1 mostra os valores obtidos para ψ_{25} , o valor máximo de $\psi(u)$, e ainda o desvio percentual de ψ_{25} (que deveria ser nulo) em relação àquele valor máximo, para cada uma das quatro primeiras auto-funções.

7. O POÇO QUADRADO FINITO

As auto-funções do poço definido na figura 6.b podem ser obtidas analiticamente, embora de forma mais complicada que no caso do poço infinito, tratado na seção anterior. Os valores das quatro energias permitidas são $\epsilon_1 = 6.83$, $\epsilon_2 = 26.96$, $\epsilon_3 = 58.9$ e $\epsilon_4 = 96.3$, assinaladas na figura 6.b com a mesma escala da figura 6.a.

Usamos o passo $H = 0.02$ e escolhemos $\psi_0 = \psi_1 = 1$ para ϵ_1 e ϵ_3 , ou $\psi_0 = 0$ e $\psi_1 = 0.1$ para ϵ_2 e ϵ_4 . Os valores das energias foram determinados por tentativas, segundo o procedimento que se segue. Para uma mesma escolha de ψ_0 e ψ_1 determina-se a função $\psi(u)$ para cada valor de ϵ numa sequência $\epsilon_a, \epsilon_b, \epsilon_c, \epsilon_d, \epsilon_e$ etc. Desta forma, são obtidas várias funções $\psi(u)$ numa sequência do tipo da apresentada na figura 4. Devido às aproximações numéricas envolvidas, jamais se conseguirá uma função com o comportamento correto, a exemplo da curva correspondente a $\epsilon = \epsilon_c$ na figura 4. No entanto, este não é um entrave, uma vez que o valor correto da energia sempre poderá ser "encurrulado" entre duas tentativas $\epsilon = E_-$ e $\epsilon = E_+$, de forma que $E_- < \epsilon < E_+$. A função $\psi_-(u)$ correspondente a $\epsilon = E_-$ se comporta como a curva $\epsilon = \epsilon_b$ na figura 4, enquanto a função $\psi_+(u)$ correspondente a $\epsilon = E_+$ se comporta como a curva $\epsilon = \epsilon_d$ na mesma figura.

Na figura 8 foram construídos os gráficos das quatro melhores aproximações para as quatro auto-funções permitidas. Na mesma figura são apresentados ainda os "rabos" de cada uma das outras quatro aproximações que, juntamente com as quatro primeiras, "encurralam" as energias $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ e ϵ_4 , bem como o intervalo em que cada uma foi "encurrulada".

A tabela 2 mostra os valores exatos das energias, os valores obtidos numericamente com suas larguras percentuais características, e

os desvios percentuais em relação aos valores exatos. Note-se que as larguras características (de $\pm 0.4\%$) dentro das quais as energias foram encurraladas não correspondem aos desvios relativos aos valores e xatos. A precisão do método não depende da largura do intervalo em que cada energia é encurralada, mas sim do valor de H previamente escolhi do.

Deixamos a cargo do leitor as devidas interpretações das auto-funções e das energias obtidas, bem como comparações com os resultados da seção anterior.

Notamos que nesta seção e na anterior não nos preocupamos em normalizar nossas funções, o que passaremos a fazer a partir da seção seguinte.

8. O OSCILADOR HARMÔNICO

Para o potencial $P(u) = 256 u^2$, as quatro primeiras energias permitidas são $\epsilon_1 = 16$, $\epsilon_2 = 48$, $\epsilon_3 = 80$ e $\epsilon_4 = 112$, que podem ser obtidas analiticamente. Usamos estes valores, com passo $H = 0.02$, escolhendo $\psi_0 = \psi_1 = 1$ para ϵ_1 e ϵ_3 ou $\psi_0 = 0$ e $\psi_1 = 0.1$ para ϵ_2 e ϵ_4 . As auto-funções assim obtidas foram então normalizadas e lançadas nos gráficos da figura 9. A integral de normalização foi executada até o ponto em que $\psi(u)$ corta o eixo u (casos de ϵ_2 e ϵ_4), ou dele mais se aproxima (casos de ϵ_1 e ϵ_3). Tais pontos foram assinalados por linhas verticais na figura 9.

Com as funções normalizadas, o leitor pode comparar probabilidades correspondentes às diferentes auto-funções. Podemos concluir, por exemplo, que a probabilidade de se encontrar a onda-partícula nas imediações do ponto $u=0$ é maior se a sua energia for ϵ_1 do que no caso em que a energia é ϵ_3 .

9. O POTENCIAL DO TIPO MOLÉCULA DIATÔMICA

As figuras 10.a e 10.b mostram dois potenciais do tipo que se observa em moléculas diatômicas reais, aproximado por polinômios do 4º grau. Não há solução analítica exata para tais potenciais. Nas figuras 10.a e 10.b são apresentados também os valores permitidos das quatro primeiras energias, na mesma escala, nos dois casos, obtidos numericamente da mesma forma que na seção 7.

Nas figuras 11.a e 11.b foram construídos os gráficos das quatro melhores aproximações para as auto-funções de cada um dos dois poços, respectivamente, e são apresentados os valores que "encurralam" cada uma das energias permitidas.

A tabela 3 mostra os valores das quatro primeiras energias permitidas com suas larguras percentuais características, em cada caso (não confundir com a precisão do método que corresponde a maiores desvios, $\pm 5\%$, para $H = 0.02$).

As figuras 10.a, 10.b, 11.a e 11.b contêm uma variedade de in formações conceitualmente úteis. Como exemplo, notamos que a proximidade entre ϵ_1 e ϵ_2 ou entre ϵ_3 e ϵ_4 é maior no caso da figura 10.b do que no caso da figura 10.a. Este efeito se deve ao maior valor da protuberância do potencial na região do ponto $u = 0$, o que dificulta a passagem da onda-partícula de um lado para o outro, diminuindo o valor de $\psi(x)$ naquela região. Desta forma, as duas metades do poço tendem a se tornar independentes, fazendo as funções $\psi(x)$ ímpares (ϵ_2 e ϵ_4) se aproximarem, a menos do sinal, das respectivas funções $\psi(x)$ pares (ϵ_1 e ϵ_3). Notamos ainda que a proximidade entre ϵ_1 e ϵ_2 é maior do que entre ϵ_3 e ϵ_4 em ambos os casos, da mesma forma que as bandas energéticas em um cristal são mais largas quanto mais acima se localizam no eixo das energias. Outras observações são deixadas a cargo do leitor.

10. UM PROGRAMA PARA HP25

Os cálculos apresentados nas seções anteriores podem ser executados nas mais simples calculadoras programáveis, como a HP25 por exemplo. Apresentamos a seguir um programa para esta calculadora, com instruções de uso.

01	RCL 5	26	R+
	RCL 2		+
	x		STO 1
04	P(u)		g x ²
	GTO 12	30	STO + 7
12	RCL 3		RCL 5
	-		1
	RCL 4		+
			STO 5
15	x	35	2
	2		:
	+		g frac
	RCL 0		2
	CHS		x
20	RCL 1	40	x
	STO 0		STO + 7
	x ∇ y		RCL 6
	R+		RCL 5
	x		f x \geq y
25	x ∇ y	45	GTO 47
			GTO 01
			RCL 5
			f PAUSE
		49	RCL 1

As instruções de 04 até 11 são reservadas para construir o potencial $P(u)$ a partir do valor de u .

As memórias de 0 até 7 são utilizadas durante a execução, e seus conteúdos são descritos abaixo.

Memória 0 - contém ψ_{i-1} ; deve ser inicializada com ψ_0 .

- Memória 1 - contém ψ_i ; deve ser inicializada com ψ_1 .
- Memória 2 - contém H.
- Memória 3 - contém ϵ .
- Memória 4 - contém H^2 .
- Memória 5 - contém o índice atual i ; deve ser inicializada com 1.
- Memória 6 - contém o índice final l até o qual se deseja que o cálculo prossiga sem interrupções; se $i \geq l$ o cálculo é interrompido a cada nova iteração.
- Memória 7 - contém a soma $\frac{1}{2} \psi_0^2 + 2\psi_1^2 + \psi_2^2 + 2\psi_3^2 + \dots + 2\psi_{i-1}^2 + \psi_i^2$ (com i par), através da qual pode ser calculada a integral

$$\int_0^{u_i} \psi(u)^2 du = \frac{2H}{3} \left\{ \frac{1}{2} \psi_0^2 + 2\psi_1^2 + 2\psi_{i-1}^2 + \frac{1}{2} \psi_i^2 \right\};$$

deve ser inicializada com $\frac{1}{2} \psi_0^2 + 2\psi_1^2$. Note-se que o último valor ψ_i^2 ainda não está multiplicado por 1/2 na soma disponível nesta memória. Deve-se subtrair desta soma o valor $\frac{1}{2} \psi_i^2$ que pode ser calculado com o valor de ψ_i disponível na memória 1.

Depois de inicializados os devidos valores nas memórias e iniciada a execução do programa, esta terminará com o valor de i no mostrador durante um segundo, e a seguir o valor de ψ_i . Este valor de i será igual a l se houver algum valor maior do que 2 inicializado na memória 6, ou será 2 em caso contrário. A cada vez que se reiniciar a execução do programa, o índice i será incrementado de uma unidade e a execução novamente interrompida com os valores $i+1$ (um segundo) e ψ_{i+1} no mostrador. Caso um novo valor de l seja inicializado na memória, a execução prosseguirá até $i = l$ sem interrupções.

REFERÊNCIAS

1. E. Schrödinger, Ann. Phys. LXXIX (1926).
2. L. de Broglie, Comptes Rendus CLXXXIII (1926).
3. P. Murilo Oliveira, "Superposição de Ondas Harmônicas", Contato nº 14, Fundação Cesgranrio (1976).
4. W. Heisenberg, Zeitschr. für Phys. XXXVIII (1926).

5. Há um método equivalente, um pouco menos simples, no seguinte livro: R. Eisberg, R. Resnick, "Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles", N.Y., apêndice F, 1974.

TABELAS

	E_1	E_2	E_3	E_4
ψ_{25}	0.031	-0.002	-0.088	0.007
ψ_{MAX}	1.000	0.796	1.000	0.400
ψ_{25}/ψ_{MAX}	3%	-0.3%	-9%	2%

TABELA 1 - Valores de ψ_{25} , ψ_{MAX} e ψ_{25}/ψ_{MAX} para o poço quadrado infinito de largura unitária.

	E_1	E_2	E_3	E_4
exato	6.83	26.96	58.9	96.3
numérico	6.85 ($\pm 0.4\%$)	25.9 ($\pm 0.4\%$)	59.0 ($\pm 0.4\%$)	94.0 ($\pm 0.4\%$)
desvio	0.3%	-4%	0.2%	-2%

TABELA 2 - Valores exatos e obtidos numericamente das energias permitidas para o poço quadrado finito de largura unitária e altura 100.

$P(u)$	E_1	E_2	E_3	E_4
$(16u^2-4)^2$	11.75 $\pm 2\%$	16.75 $\pm 2\%$	36.25 $\pm 0.7\%$	55.25 $\pm 0.5\%$
$(36u^2-9)^2$	33.5 $\pm 1.5\%$	34.5 $\pm 1.5\%$	81.5 $\pm 0.6\%$	98.5 $\pm 0.5\%$

TABELA 3 - Valores das quatro primeiras energias permitidas para os poços das figuras 10.a e 10.b.

FIGURAS

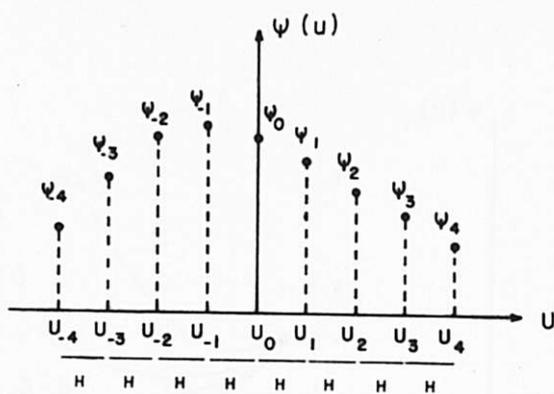


Figura 1 - Gráfico de uma função $\psi(u)$ definida numericamente ao longo do eixo u .

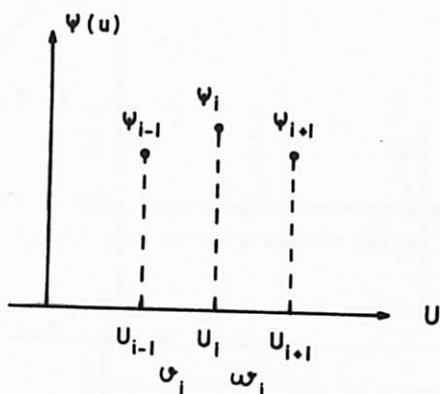


Figura 2 - Três pontos consecutivos da função $\psi(u)$.

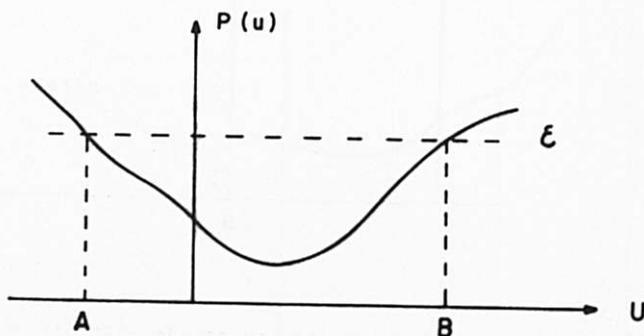


Figura 3 - Gráfico de um poço de potencial $P(u)$, com a energia total E e os pontos de retorno clássicos A e B .

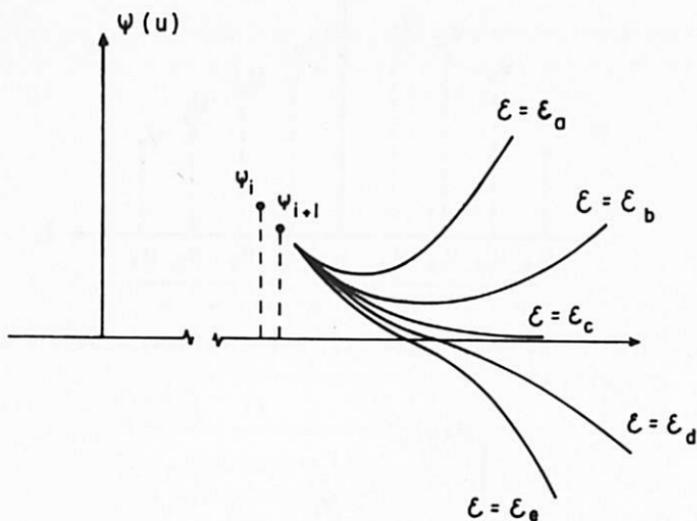


Figura 4 - Comportamento de $\psi(u)$ para valores diferentes de energia, na região $u \rightarrow \infty$ do eixo u , onde $P(u) > \epsilon$.

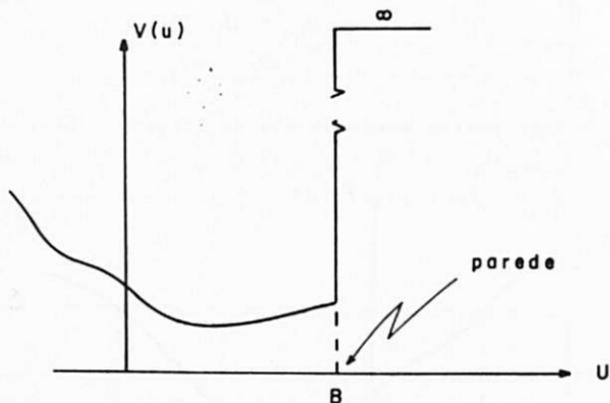
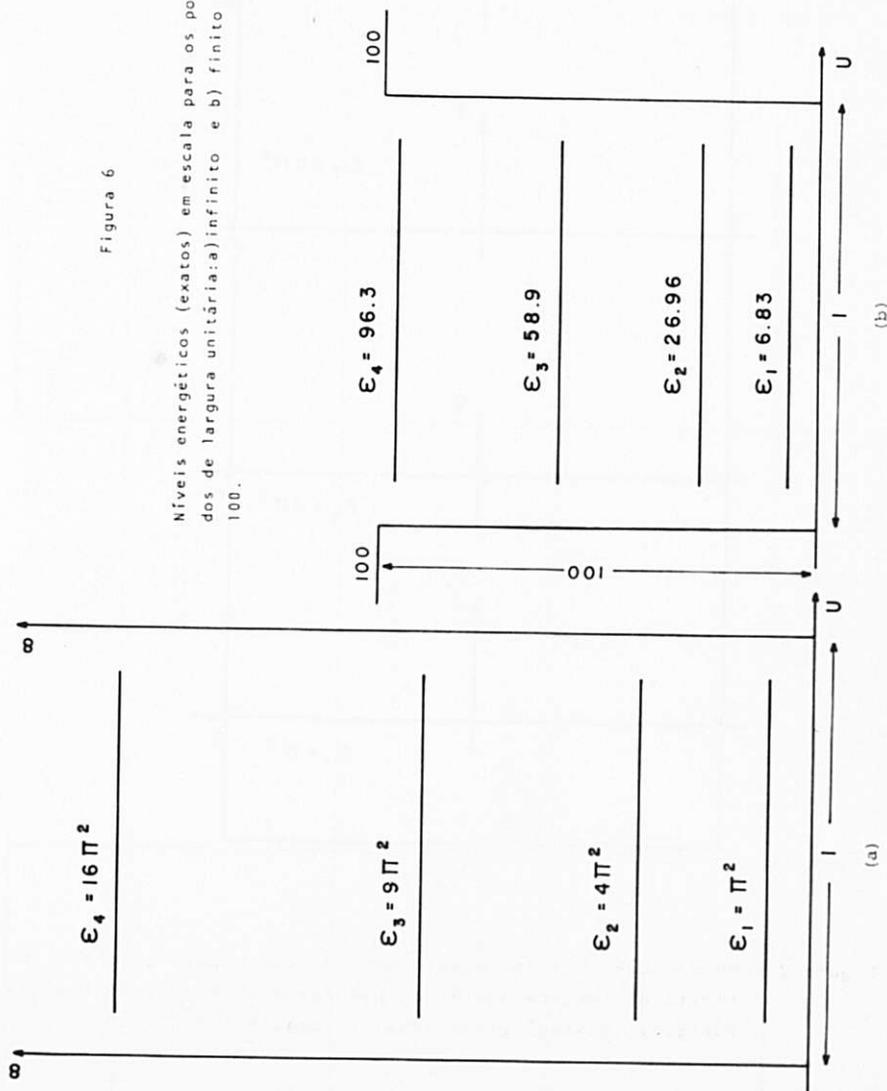


Figura 5 - Modelo para um potencial com parede intransponível.

Figura 6

Níveis energéticos (exatos) em escala para os poços quadrados de largura unitária: a) infinito e b) finito com altura 100.



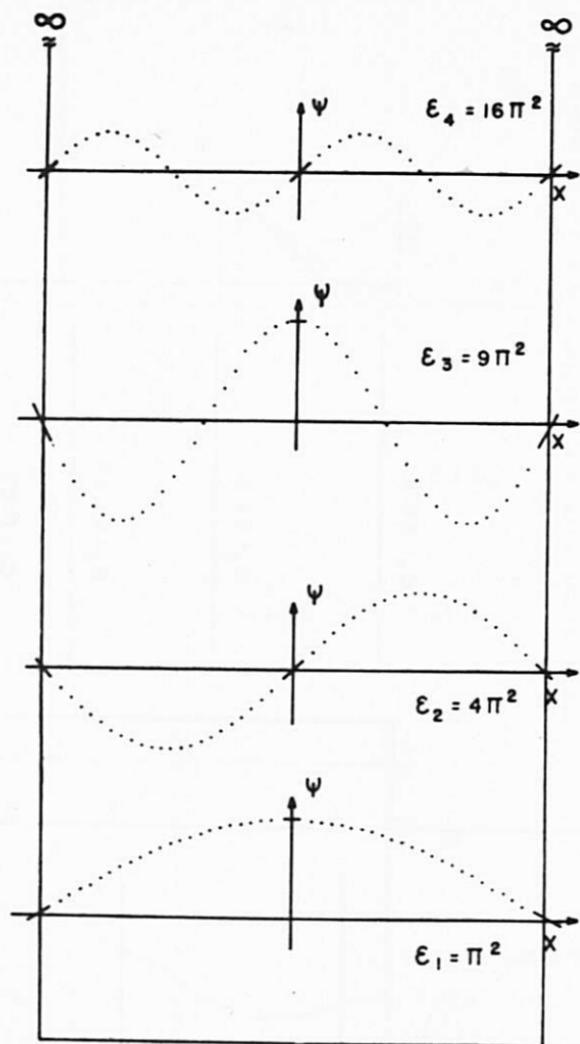


Figura 7 - Autofunções obtidas numericamente para o poço quadrado infinito de largura unitária, usando-se as quatro primeiras energias (exatas) permitidas, e passo $h = 0.02$.

Figura 8 - Autofunções obtidas numericamente para o poço quadrado finito de largura unitária e altura 100, com as quatro energias permitidas também determinadas numericamente (encurraladas entre E_- e E_+). O passo usado foi $H = 0,02$.

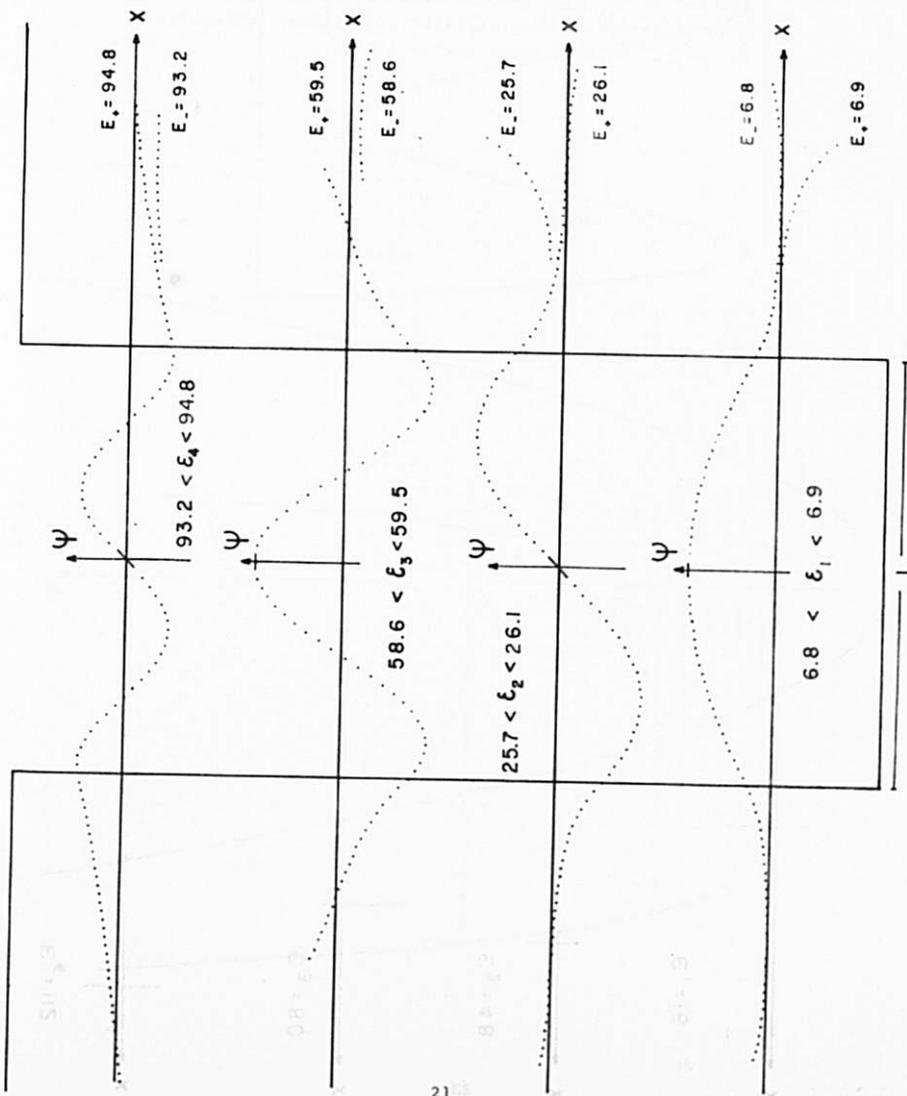


Figura 9 - Autofunções normalizadas obtidas numericamente para o poço harmônico $P(u) = 256 u^2$, usando-se as quatro primeiras energias (exatas) permitidas, e passo $H = 0.02$. A normalização foi feita integrando-se cada função no intervalo definido pelas duas linhas verticais, colocadas nos pontos onde $|\psi|$ se anula ou passa por um mínimo.

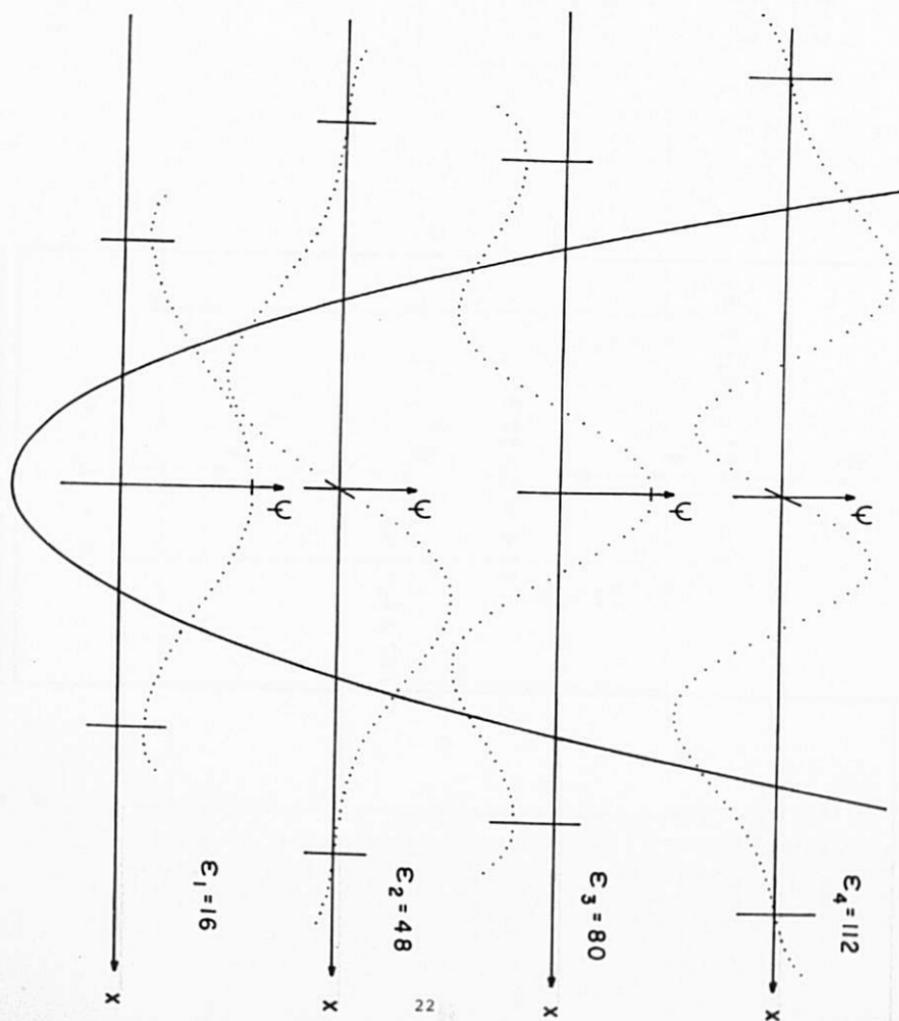
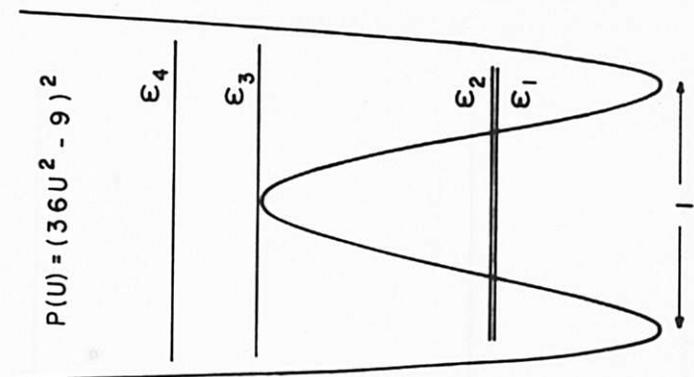
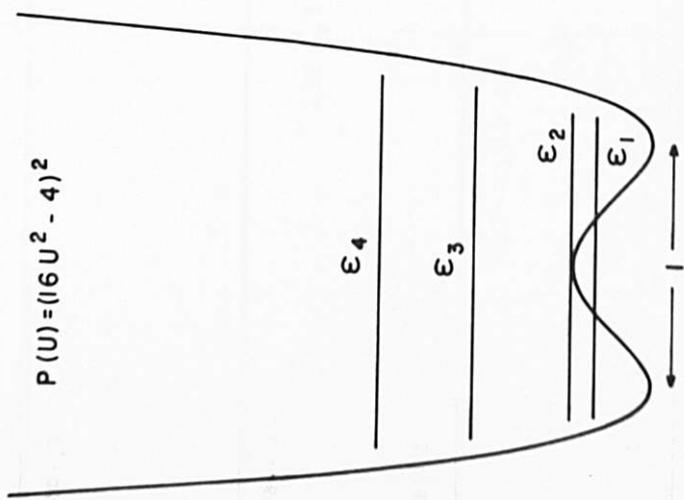


Figura 10 - Níveis energéticos (obtidos numericamente) em escala para os poços: a) $P(u) = (16u^2 - 4)^2$ e b) $P(u) = (36u^2 - 9)^2$. O passo usado foi $H = 0.02$.

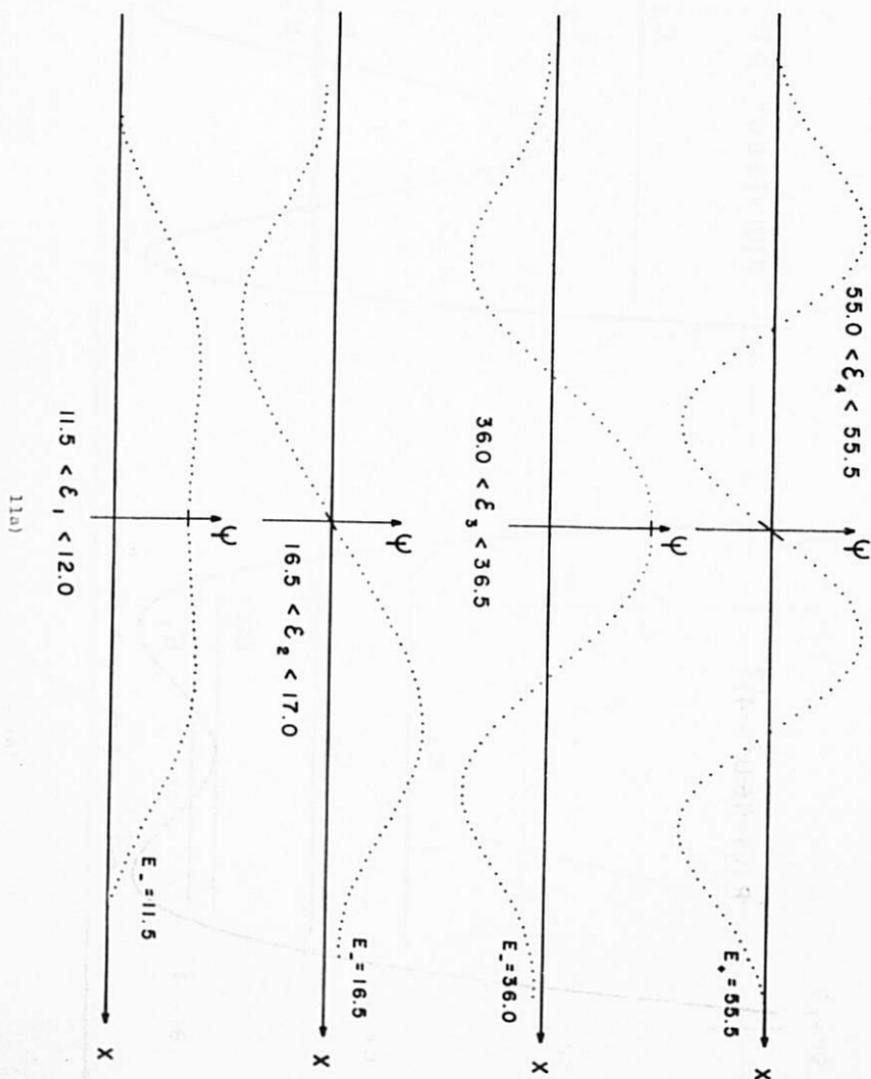


(b)



(a)

Figura 11 - Autofunções correspondentes aos níveis energéticos apresentados na figura a) 10a e b) 10b.



11a)

11b)

