revista de ensino de física vol. 7 nº 1 jun/1985

APROXIMAÇÕES ANALÍTICAS PARA OS NÍVEIS DE ENERGIA DO POÇO DE POTENCIAL: $V(x) = \frac{1}{2}|x|^{\nu}$ $(\nu > 0)$

ANANIAS M. MARIZ*

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, RJ

P. MURILO OLIVEIRA

Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense

RESUMO

Apresentamos duas aproximações analíticas (W.K.B. e Turschner) que podem ser usadas para calcular os níveis de energia do potencial: $V(x) = 1/2\ |x|^{\nu}$ $(\nu > 0)$.

Uma comparação entre estas propostas é feita, nos casos particulares em que uma solução exata é disponível, através de fórmulas analíticas $(\nu = 0, 2, \infty)$ ou de cálculos numéricos de alta precisão $(\nu = 4, 8)$. As funções de onda do estado fundamental (onde as aproximações possuem maior discrepância) são obtidas numericamente para valores típicos de ν.

Resultados obtidos para o calor específico a altas temperaturas, mostram que estas aproximações predizem diferentes correções quânticas aos valores clássicos das grandezas térmicas do sistema.

INTRODUÇÃO

Uma das características básicas da Mecânica Quântica, é que devido à sua complexidade operacional, a obtenção de resultados exatos é uma tarefa árdua, que tem tido um sucesso relativamente modesto, se levarmos em conta o enorme esforço intelectual feito desde o advento desta teoria.

O cálculo exato dos níveis de energia da maioria dos sistemas quânticos é ainda desconhecido. Em particular, aqueles descritos pelo potencial:

$$V(x) = \frac{1}{2}|x|^{\nu} \qquad (\nu > 0) \quad . \tag{1}$$

Esta classe de potenciais é de enorme interesse físico, pois contém inúmeros sistemas, encontrados em diversos ramos da física (Fi-

---

*Endereço permanente: Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, RN.

gura 1).

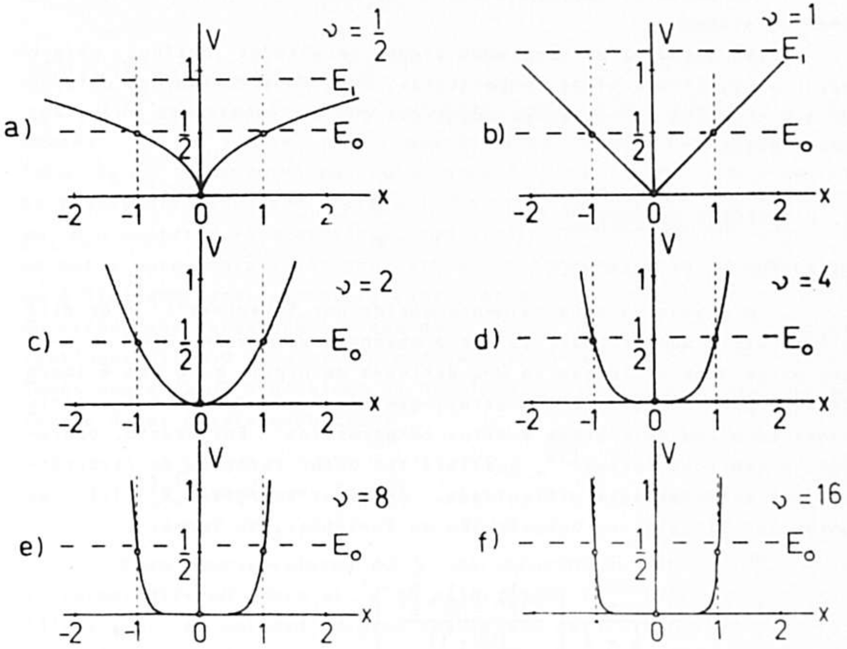

Figura 1 - Gráfico do potencial $V(x) = \frac{1}{2}|x|^{\nu}$ para diversos valores de ν.

Soluções exatas são conhecidas somente nos casos de uma partícula livre ($\nu \to 0$), do oscilador harmônico simples ($\nu = 2$) e do poço quadrado infinito ($\nu \to \infty$).

Para outros valores de ν, que representam osciladores de anarmonicidade generalizada, somente aproximações numéricas existem, para alguns valores de ν ($\nu = 4,6,8$).

Neste trabalho nós apresentamos duas aproximações analíticas para os níveis de energia desta classe de potenciais, válidas para qualquer valor do expoente ν.

A primeira é a aproximação W.K.B. (Wentzel-Kramers-Brillouin), já conhecida e discutida na maioria dos textos básicos de Mecânica Quântica[1]. A segunda é uma proposta recentemente estabelecida por H. Turschner[2], que foi analisada e comparada com a aproximação W.K.B. em trabalho posterior[3], tendo-se mostrado bastante superior àquela.

Na Seção 1 nós exibimos as duas propostas e apresentamos al guns valores típicos para os níveis de energia.

Na Seção 2, fazemos uma análise qualitativa das funções de onda do sistema.

Na Seção 3, apresentamos alguns resultados obtidos para o calor específico a altas temperaturas, onde as aproximações diferem no que concerne às correções quânticas que os resultados clássicos devem exibir.

1. O ESPECTRO ENERGÉTICO

a) A FÓRMULA DE TURSCHNER

A expressão originalmente obtida por Turschner[2] é de difícil manuseio operacional, já que a obtenção do n-ésimo nível de energia exige a determinação de uma derivada de ordem n, o que é impraticável para energias muito altas, que são fundamentais nas propriedades térmicas do sistema a altas temperaturas. Entretanto, operações algébricas feitas[3], possibilitam obter relações de recorrência que eliminam esta dificuldade. Assim as energias $E_n^{(T)}(\nu)$ do potencial (1) são, na aproximação de Turschner, da forma:

$$E_0^{(T)}(\nu) = \frac{1}{\frac{1}{2}+\lambda}\left[\frac{\Gamma(\frac{1}{2})\ \Gamma(\frac{1}{\nu}+\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{1}{\nu}+1)}\right]^{\lambda}\Gamma(1+\lambda) \qquad (2)$$

$$E_1^{(T)}(\nu) = (2\lambda+1)\,E_0^{(T)}(\nu) \qquad (3)$$

$$E_n^{(T)}(\nu) = \frac{1}{n}\left[(2\lambda+1)\,E_{n-1}^{(T)}(\nu) + (n-1)\,E_{n-2}^{(T)}(\nu)\right] \qquad n=2,3\ldots \qquad (4)$$

onde

$$\lambda = \frac{2\nu}{\nu+2} \qquad 0<\lambda<2 \qquad (5)$$

e $\Gamma(\lambda)$ é a função gama (a generalização do fatorial).

b) A FÓRMULA W.K.B.

A aproximação W.K.B., adequada ao potencial (1) é da forma[3]:

$$E_n^{(\omega)}(\nu) = \frac{2^\lambda (n+\frac{1}{2})^\lambda}{\Gamma(\lambda+1)} E_0^{(T)}(\nu) \qquad (6)$$

onde $E_0^{(T)}(\nu)$ é dado por (2).

As aproximações acima coincidem somente nos casos em que são exatas: (i) No limite $\nu \to 0$, quando temos um poço quadrado de altura $V_0 = \frac{1}{2}$ constante, mas cuja largura tende a zero. Neste caso os níveis discretos com energia inferior a V_0, são expulsos do poço, e o espectro fica contínuo, com limite inferior $E_0 = V_0 = \frac{1}{2}$. Como estas aproximações são para estados discretos (cuja função de onda é limitada espacialmente), elas predizem corretamente que o único estado que permanece é o que dá o limite inferior dos estados do contínuo; (ii) O caso $\nu = 2$, onde ambas as aproximações são exatas. Temos neste caso, o problema do oscilador harmônico simples, cujo espectro é por demais conhecido:

$$E_n^{(e)}(\nu=2) = (n+\frac{1}{2}) \quad . \qquad (7)$$

Para outros valores de $\underline{\nu}$, as aproximações de W.K.B. e de Turschner diferem entre si, e do valor exato ($E_n^{(e)}(\nu)$) dos níveis de energia. No entanto, alguns resultados gerais têm sido observados: (i) Para um dado $\underline{\nu}$, as aproximações possuem maior discrepância com o valor exato para o estado fundamental (n=0) diminuindo esta diferença nos níveis excitados; (ii) Para um mesmo valor de $\underline{n}$ (número quântico da energia) as aproximações diferem mais significativamente do valor exato quando $\underline{\nu}$ cresce. A situação mais desfavorável é o caso $\nu \to \infty$ ($\lambda = 2$), onde o potencial (1) torna-se um poço infinito de largura $\underline{2}$ cujos níveis de energia são conhecidos e dados pela expressão[1]:

$$E_n^{(e)}(\nu \to \infty) = \frac{\pi^2}{8}(n+1)^2 \qquad (n = 0,1,2,\ldots) \quad . \qquad (8)$$

As aproximações mencionadas fornecem os resultados:

$$E_n^{(T)}(\nu \to \infty) = \frac{\pi^2}{8}(n^2+n+\frac{1}{2}) \quad , \qquad (9)$$

$$E_n^{(\omega)}(\nu \to \infty) = \frac{\pi^2}{8}(n^2+n+\frac{1}{4}) \quad . \qquad (10)$$

O erro mais significativo ocorre no estado fundamental do poço quadrado infinito, onde:

$$E_0^{(T)}(\nu \to \infty) = \frac{E_0^{(e)}(\nu \to \infty)}{2} \, , \tag{11}$$

$$E_0^{(\omega)}(\nu \to \infty) = \frac{E_0^{(e)}(\nu \to \infty)}{4} \, . \tag{12}$$

Em todos os casos examinados[3] a aproximação de Turschner fornece valores mais próximos aos exatos que a W.K.B.. Para uma comparação ver Tabela 1.

ν	n	W.K.B.	TURSCHNER	EXATO
2	0	0.5	0.5	0.5
	1	1.5	1.5	1.5
	2	2.5	2.5	2.5
4	0	0.433573	0.516229	0.530181 (5)
	1	1.875961	1.892839	1.899837 (5)
	2	3.706996	3.728318	3.727849 (5)
8	0	0.380968	0.544641	0.612911 (5)
	1	2.209441	2.287492	2.377909 (5)
	2	5.003113	5.076054	5.122494 (5)
∞	0	0.308425	0.616850	1.233701
	1	2.775826	3.084251	4.934802
	2	7.710628	8.019054	11.103305

TABELA 1 - Energia dos três primeiros níveis para diversos valores de ν. [Por simplicidade adotamos neste trabalho $\hbar = m = 1$ (onde $\hbar$ é a constante de Planck e m é a massa da partícula)].

2. AS FUNÇÕES DE ONDA

Um exame da Fig. 1 nos mostra que para grandes valores de $|x|$ ($\nu \neq 0$) o potencial $V(x)$ cresce indefinidamente, o que significa que só existem estados ligados. O potencial $V(x)$ tende a infinito mais rapidamente para maiores valores de ν, indicando que quando ν cresce, as funções de onda devem ser mais localizadas, pois a probabilidade de encontrarmos a partícula longe da origem deve tender acentuadamente a zero para grandes valores de ν.

Utilizamos um método numérico simples[4] para calcularmos as funções de onda do estado fundamental (onde as aproximações têm um erro maior em relação ao valor exato) para valores típicos de ν. O gráfico destas funções estão exibidos nas Figuras 2, 3 e 4. Na opinião dos autores a observação destes gráficos é um excelente exemplo para estudantes que iniciam o aprendizado de Mecânica Quântica a nível semi-quantitativo, bem como a obtenção de outras funções de onda, para níveis mais excitados. Uma análise da precisão do método e de sua sensibilidade à utilização de valores aproximados para os níveis de energia, não é feita neste trabalho, pois entendemos ser este um exercício elementar que pode ser estimulante para iniciantes.

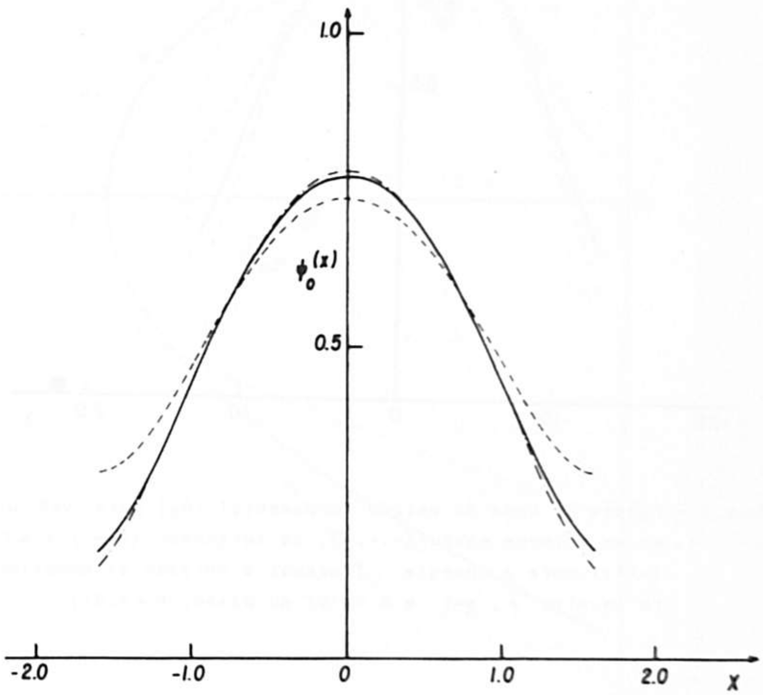

Figura 2 - Função de onda do estado fundamental (ψ_0) para $\nu=4$ usando os valores exato (-.-.-), de Turschner (——) e W.K.B. (----) para a energia. [Fazemos a unidade de comprimento no eixo x, $\underline{a}=1$ e o valor do passo, $H = 0.05$].

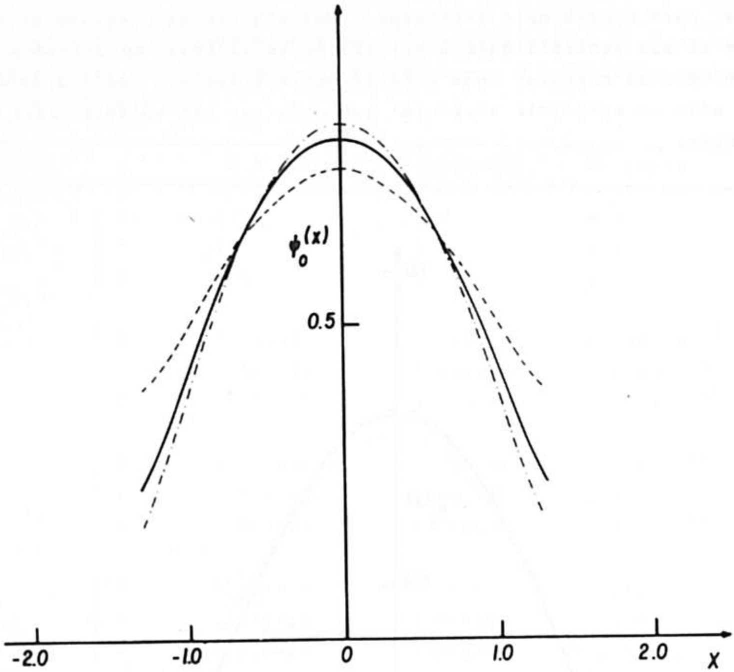

Figura 3 - Função de onda do estado fundamental (ψ_0) para ν=8 usando os valores exato (-.-.-), de Turschner (——) e W.K.B. (----) para a energia. [Fazemos a unidade de comprimento no eixo x, a=1 e o valor do passo, H = 0.05].

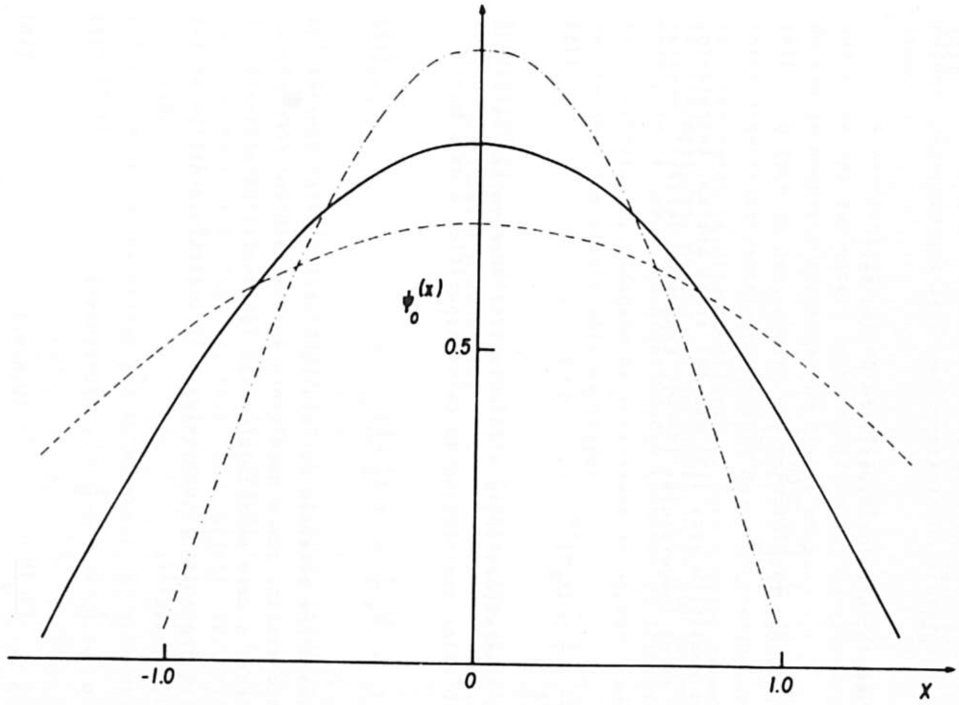

Figura 4 - Função de onda do estado fundamental (ψ_0) para $\nu \to \infty$ usando os valores exato (-.-.-), de Turschner (——) e W.K.B. (----) para a energia. [Fazemos a unidade de comprimento no eixo x, $\underline{a}=1$ e o valor do passo, $H = 0.05$].

3. O CALOR ESPECÍFICO

As propriedades térmicas do sistema podem ser conhecidas a partir da função de partição definida por:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n(\nu)/K_B T} \quad . \tag{13}$$

Assim, por exemplo, o calor específico é dado por:

$$C = K_B \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \frac{\partial \ell n Z}{\partial} \right] \quad . \tag{14}$$

Uma expressão analítica para (13) não foi ainda obtida. Entretanto, no limite de altas temperaturas ($T \to \infty$), expansões feitas[3] mostraram que:

$$\frac{C}{K_B} - \frac{1}{\lambda} \sim (K_B T)^{-\alpha} \quad ; \quad \alpha > 0 \quad . \tag{15}$$

Duas observações sobre a fórmula (15) merecem ser feitas:

(i) O valor assintótico do calor específico é dado por:

$$C = K_B \frac{1}{\lambda} = K \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu}\right) \quad . \tag{16}$$

Esta expressão é uma extensão do resultado obtido pelo teorema da equipartição clássico, que é geralmente apresentado em livros textos básicos para o caso particular $\nu=2$ (potencial harmônico).

(ii) O expoente $\underline{\alpha}$, determina a 1ª correção quântica ao valor clássico, e vale[3]:

$$\alpha = \frac{2}{\lambda} = 1 + \frac{2}{\nu} \quad \text{(Turschner)} \tag{17}$$

$$\alpha = \frac{2 + 3\nu}{\nu} \quad \text{(W.K.B.)} \quad . \tag{18}$$

Cálculos realizados para $\nu=4$[3] mostram ser (17) o valor correto.

4. CONCLUSÕES

Acreditamos que uma exposição pedagógica destas aproximações para uma classe de potenciais bastante comum em Física, tem como utilidade principal, familiarizar o estudante a trabalhos com resultados não exatos, e a estabelecer comparações entre diferentes aproximações, situação que será uma constante no trabalho de pesquisa futuro.

A apresentação da aproximação de Turschner, também é necessária, de vez que embora superior à W.K.B., ao contrário desta, ainda não se encontra acessível em livros textos.

O fato de que, apesar das aproximações citadas, somente diferem significativamente nos níveis de menor energia, e apesar disto, predizerem resultados diferentes para o calor específico a altas temperaturas, mostra que ao contrário do que um raciocínio apressado poderia supor, as propriedades térmicas do sistema mesmo a altas temperaturas, dependem da totalidade do espectro energético, e não somente dos níveis mais excitados.

AGRADECIMENTO: Agradecemos ao Prof. Constantino Tsallis pelas valiosas sugestões e comentários.

REFERÊNCIAS

[1] Ver por exemplo: L. Landau e E. Lifschitz, "Mécanique Quantique", ed. MIR (1966).

[2] H. Turschner, J. Phys. A12, 451 (1979).

[3] A.M. Mariz e C. Tsallis, Phys. Rev. A29(5), 2871 (1984).

[4] P. Murilo Oliveira e S. Costa Ribeiro, Rev. Ens. Fis. 3(2), 3 (1981).

[5] F.T. Hioe, D. MacMillen e E.W. Montroll, J. Mat. Phys. 17, 1320 (1976).