



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
Câmpus de São José do Rio Preto

Airton Algozini Junior

**Diferentes Métodos de Resolução da Equação de Schrödinger
Independente do Tempo**

São José do Rio Preto

2019

Airton Algozini Junior

**Diferentes Métodos de Resolução da Equação de Schrödinger
Independente do Tempo**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular, do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto.

Financiadora: CAPES - DS

Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho

São José do Rio Preto

2019

A396d

Algozini, Airton Junior

Diferentes métodos de resolução da equação de schrödinger independente do tempo / Airton Junior Algozini. -- São José do Rio Preto, 2019
68f.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista (Unesp), Instituto de Biociências Letras e Ciências Exatas, São José do Rio Preto

Orientador: Elso Drigo Filho

1. Biologia molecular. 2. Poço duplo quadrado simétrico. 3. Tunelamento(Física). 4. Métodos aproximativos. 5. Potencial coulombiano. I. Título.

Airton Algozini Junior

**Diferentes Métodos de Resolução da Equação de Schrödinger
Independente do Tempo**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Biofísica Molecular, junto ao Programa de Pós-Graduação em Biofísica Molecular, do Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Campus de São José do Rio Preto.

Financiadora: CAPES - DS

Orientador: Prof. Dr. Elso Drigo Filho

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Elso Drigo Filho
UNESP – São José do Rio Preto
Orientador

Prof. Dr. Fernando Alves de Melo
UNESP – São José do Rio Preto

Prof^a. Dra. Glaucia Rosângela Peglow Borges de Castro
Fundação Educacional de Fernandópolis - FEF

São José do Rio Preto
23 de agosto de 2019

À esposa Marcia e minha amada filha Maria Julia, por me ensinarem a não desistir dos meus sonhos, por acreditarem em mim e por compartilharem de muitas das minhas angústias e conquistas.

AGRADECIMENTOS

Um agradecimento é sempre gesto de humildade e reconhecimento. Nesse caminho que percorri em mais esta etapa de minha vida intelectual e profissional, gostaria de agradecer:

Primeiramente a Deus por ter aberto as portas, por abençoar-me com a vida, a saúde e a família maravilhosa que tenho.

Aos meus queridos e amados pais, pela sabedoria em educar-me, por seus gestos solidários, pela sua espiritualidade, pelo amor e carinho e por ensinarem-me os limites da vida. Agradeço-os por terem investido e acreditado sempre na educação, incentivando-me a trilhar os caminhos do conhecimento, que é capaz de transformar as pessoas sempre para melhor.

A meu orientador Prof. Dr. Elso Drigo Filho, pelos ensinamentos, conselhos, atenção, paciência, confiança, dedicação e por sempre receber-me em sua sala para tirar dúvidas e, sem medir esforços, auxiliar-me nas dificuldades encontradas durante o dia a dia. Além de orientador, um grande amigo.

Ao programa de pós-graduação em Biofísica Molecular do IBILCE/UNESP e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, pela bolsa de mestrado concedida durante um ano.

Ao Prof. Dr. Fernando Alves de Melo e ao Prof. Dr. Sidney Jurado de Carvalho, que compuseram a banca do meu exame de qualificação e realizaram correções e sugestões, as quais auxiliaram no enriquecimento do meu trabalho.

Aos membros titulares e suplentes da banca examinadora, Prof. Dr. Elso Drigo Filho, Prof^a. Dra. Glaucia Rosângela Peglow Borges de Castro, Prof. Dr. Fernando Alves de Melo, Prof. Dr. Sidney Jurado de Carvalho e Prof^a. Dra. Regina Maria Ricotta, respectivamente, por aceitarem o convite e dedicarem um pouco do seu tempo para

ler e contribuir com seus conhecimentos e experiências para o enriquecimento do meu trabalho.

Aos meus amigos Prof. Me. Douglas Alexandre Leonel, Prof. André Botoni, Prof. Fábio Buzzo e à amiga Prof^a. Ma. Tatiane Bueno, pelo apoio e carinho sinceros de sempre.

Às minhas amigas e irmãs Denise e Elizandra, pela paciência e ensinamentos. Vocês estão em meu coração.

Agradeço ao Sr. Orivaldo, à Sra. Maria Elenir, cunhados, cunhadas e sobrinhas, por suas palavras, compreensão, amor e amizade.

Ao meu amigo, Prof. Dr. Alfredo Martins de Oliveira Filho e à amiga Prof.^a Dra. Wanda Aparecida Leonardo de Oliveira, pela paciência, compreensão e por sempre estarem ao meu lado, incentivando-me e apoiando nos meus estudos e nas minhas decisões. Obrigado por tornarem-me uma pessoa melhor a cada dia.

A todos os professores e professoras que, com toda paciência, sabedoria e dedicação ajudaram a construir a pessoa que sou, eu deixo esta homenagem e meu eterno agradecimento e respeito.

Por último, a todos aqueles que, de alguma forma contribuíram, direta ou indiretamente, para a consecução deste trabalho, o meu sincero reconhecimento.

RESUMO

Neste trabalho foram resolvidos, através da Equação de Schrödinger Independente do tempo, o potencial biestável para um sistema de dois níveis do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico, de forma exata e por métodos aproximativos. Também é apresentada a solução da equação radial para o *potencial coulombiano* usando um formalismo de operadores escada, através dos conceitos de supersimetria em mecânica quântica e *shape invariance*.

O tunelamento em um potencial biestável é proporcional à diferença entre os dois níveis de energia mais baixos. O presente estudo mostra os resultados dessa diferença obtida para três abordagens distintas para o poço quadrado biestável analisado.

Os primeiros resultados são obtidos por uma solução analítica para a Equação de Schrödinger Independente do tempo. Uma combinação linear das autofunções do estado fundamental dos poços individuais é usada também é usada, juntamente com o método variacional em uma segunda abordagem. Outra abordagem usada é a aproximação WKB.

A solução radial do problema coulombiano quântico é determinada de forma exata/analítica através dos operadores de criação e destruição.

Palavras-chave: Poço Duplo Quadrado Simétrico, Método Variacional, Tunelamento, Aproximação WKB e Supersimetria em Mecânica Quântica.

ABSTRACT

In this work, the bistable potential, through the time independent Schrödinger equation, was solved for a two-level system of the symmetrical one-dimensional double square well and by approximate methods. We also present the solution of the radial equation for the coulombian potential using a ladder operator formalism through the concepts of quantum mechanical supersymmetry and shape invariance.

Tunneling at bistable potential is proportional to the difference between the two lowest energy levels. This paper shows the results of this difference obtained for three different approaches to the bistable square well analyzed.

The first results are obtained by an analytical solution for the time independent Schrödinger equation. A linear combination of the ground state autofunctions of the individual wells is used together with the variational method in a second approach. Another approach used is the WKB approach.

The radial solution of the quantum coulombian problem is determined exactly / analytically through the creation and destruction operators.

Keywords: Symmetric One - Dimensional Square Double Well, Variational Method, Tunneling, WKB Approximation and Supersymmetry in Quantum Mechanics.

LISTA ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Representação do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico	14
Figura 2 – Representação do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico	32
Figura 3 – Representação da Região Clássica (Pontos de Retorno)	39
Gráfico 1 – Equação transcendental (2.31) em função da energia	64
Gráfico 2 – Equação transcendental (2.51b) em função da energia	66
Gráfico 3 – Equação transcendental (2.51b) em função de $E_1 = 0, 0.1 \dots .6$	67

SUMÁRIO

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO	11
CAPÍTULO II – POÇO DUPLO QUADRADO UNIDIMENSIONAL SIMÉTRICO	14
2.1 Solução Analítica	15
2.1.1 Energia total maior que a barreira de potencial	16
2.1.2 Energia total menor que a barreira de potencial	19
2.2.3 Uma partícula em um poço duplo quadrado unidimensional simétrico	23
CAPÍTULO III – MÉTODO VARIACIONAL	30
3.1 O método variacional	30
3.2 Diferença de energia ΔE dada por uma combinação simétrica e antissimétrica da função de onda dos poços simples (variacional)	32
CAPÍTULO IV – APROXIMAÇÃO WKB	37
4.1 Aproximação WKB aplicada à Equação de Schrödinger	38
CAPÍTULO V – SOLUÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO USANDO SUPERSIMETRIA: PARTE RADIAL	42
5.1 Metodologia	43
5.2 Separação de variáveis	47
5.3 A equação na coordenada radial	49
CAPÍTULO VI – CONCLUSÃO	54
REFERÊNCIAS	56
APÊNDICE A – Formalismo da supersimetria na resolução da equação de Schrödinger para uma partícula numa caixa unidimensional.	59

APÊNDICE B – Gráficos das equações transcendentais (2.31) e (2.51b) 64
em função da energia e desenvolvimento das equações
(2.50), (5.24) e (5.36).

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Na década de 1920, quando a física quântica ainda estava se estabelecendo, o austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961) surgiu como um dos principais nomes dessa nova área de pesquisa. A teoria de Schrödinger da mecânica quântica especifica quais leis do movimento ondulatório que as partículas de qualquer sistema microscópico obedecem. Para isto, cada sistema tem especificada a equação que controla o comportamento da função de onda, e também a relação entre esse comportamento e o comportamento da partícula.

Tal função é, em termos simples, uma expressão matemática do carácter ondulatório de uma partícula, sendo uma extensão do postulado de Broglie. Além disso, há uma relação íntima entre ela e a teoria de Newton para o movimento de partículas em sistemas macroscópicos [1].

Partindo desses pressupostos, o principal objetivo deste trabalho é apresentar diferentes métodos para resolução da equação de Schrödinger Independente do tempo. Para isso, são apresentados para o caso do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico os resultados exatos e aproximados de energia, e além disso, a diferença entre os dois níveis mais baixos de energia que são particularmente úteis para estudar o efeito túnel [2]. Também é mostrada a solução radial do problema coulombiano de forma analítica, explorando o uso de supersimetria em Mecânica Quântica, envolvendo aspectos ligados ao formalismo e sua aplicação na solução da equação de Schrödinger [3,4].

O tunelamento é um fenômeno quântico muito importante relacionado com barreiras de potencial e na descrição de vários fenômenos. Por exemplo, é bem conhecido, há muito tempo, que o tunelamento é responsável pela duplicação de certas bandas espectrais de amônia [5], o que faz com que tenha uma importância fundamental na compreensão dos processos de transferência de prótons [6] e de transferência de elétrons em proteínas [7].

A taxa de tunelamento para um potencial biestável, para um sistema de dois níveis, é proporcional à diferença entre os dois níveis de energia mais baixos (ΔE), e é usado para investigar vários sistemas químicos [8,9], físicos [2,10] e biológicos [7]. O cálculo desta diferença de energia pode ser feito de diferentes maneiras

como, por exemplo, através da resolução direta da equação de Schrödinger para o potencial do poço duplo quadrado unidimensional simétrico.

No entanto, para alguns potenciais, não é possível determinar esta solução exata. Nestes casos, o valor de ΔE é determinado numericamente. Neste contexto, é importante conhecer as características e limitações dos métodos aproximados. Um tratamento aproximado tradicional é usar uma combinação linear de funções de onda do estado fundamental dos poços individuais para calcular uma expressão para ΔE [11]. Se não for possível calcular essas funções de onda exatamente, pode-se usar a aproximação WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) para obtê-las [12].

Os métodos de aproximação são amplamente utilizados em várias aplicações da teoria quântica. Conforme indicado na referência [12], há um número restrito de sistemas para os quais a equação de Schrödinger pode ser analiticamente resolvida de forma exata. No entanto, a solução exata também pode ser útil para estudar e estabelecer limites de validade para diferentes soluções aproximadas.

A aproximação WKB [12] determina as funções de onda como uma expansão em potências de \hbar e está conectada com as regras de quantização da antiga teoria quântica [11]. Desta forma, esse tratamento também é chamado de método de aproximação semi-clássico. Para um potencial biestável, uma outra aproximação para a função de onda é obtida usando uma combinação linear de autofunções para os poços simples, como sugerido, por exemplo, na referência [11].

No Capítulo II, há a resolução do poço duplo quadrado unidimensional simétrico (PDQUS), determinando-se a solução da Equação de Schrödinger Independente do tempo [13] desse sistema. São encontrados os autovalores do operador hamiltoniano [13] e as correspondentes funções de onda [13].

Em seguida, no Capítulo III, é feito um tratamento aproximado tradicional, que consiste em realizar uma combinação linear de funções de onda do estado fundamental dos poços individuais para calcular uma expressão para ΔE juntamente com o método variacional [11,14].

No Capítulo IV, é mostrado a solução da Equação de Schrödinger Independente do tempo em uma dimensão por meio da aproximação WKB. Este tipo de aproximação é relativamente simples para potenciais do tipo duplo poço, uma vez que a condição de contorno natural do sistema é a função de onda

transmitida se anular no infinito. Devido ao seu lugar de destaque no contexto da Mecânica Quântica, a equação de Schrödinger Independente do tempo tem sido largamente estudada em seu aspecto físico e matemático. Textos iniciais de Mecânica Quântica [12,15] apresentam a solução dessa equação em coordenadas esféricas para potenciais de força central.

Na sequência, no Capítulo V, apresentamos a solução radial do problema coulombiano quântico de forma analítica. O tratamento envolvendo a supersimetria em Mecânica Quântica pode ser visto como generalização do método de fatorização [3,4]. Neste sentido, são introduzidos os operadores que fatorizam a equação de Schrödinger. Assim, ao invés de resolver uma equação diferencial de segunda ordem, resolvemos uma equação diferencial de primeira ordem, conhecida como equação de Riccati [16]. Por fim, na última parte, é apresentada a conclusão deste trabalho.

CAPÍTULO II

POÇO DUPLO QUADRADO UNIDIMENSIONAL SIMÉTRICO

Poços de potenciais quadrados têm sido muito explorados, tanto do ponto de vista de aplicação como na introdução didática à Mecânica Quântica. Existem poucos potenciais desse tipo que são tratados analiticamente na literatura, embora várias geometrias envolvendo esses poços de potenciais possam ser construídas.

O poço duplo quadrado unidimensional simétrico (PDQUS) [13] possui cinco diferentes regiões representadas na figura 1. A região III desta figura é uma barreira central de potencial V_0 que separa os poços mais profundos das regiões II e IV, em que o potencial é considerado nulo. Nas extremidades opostas deste poço, regiões I e V, o potencial é infinito. O objetivo deste capítulo é resolver o PDQUS obtendo os autovalores em especial quando $0 < E < V_0$ do operador hamiltoniano e as correspondentes funções de onda.

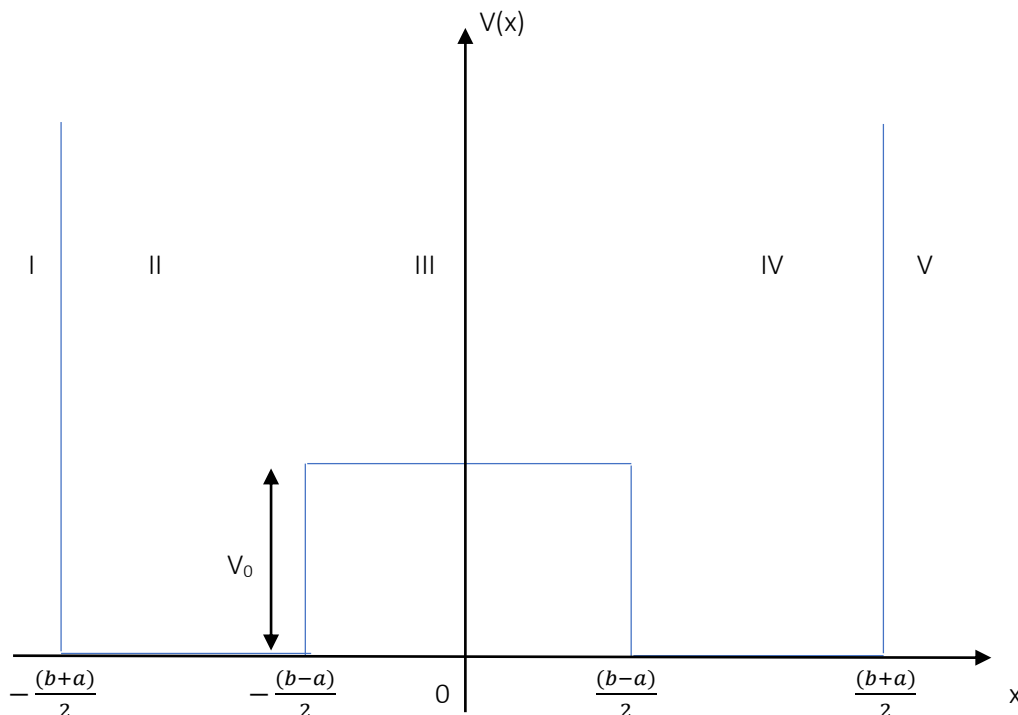


Figura 1 – Representação do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico

2.1 Solução Analítica

O potencial $V(x)$ a ser estudado é descrito por:

$$V(x) = \left[\begin{array}{lll} \infty & x < -\frac{(b+a)}{2} & \text{região (I)} \\ 0 & -\frac{(b+a)}{2} < x < -\frac{(b-a)}{2} & \text{região (II)} \\ V_0 & -\frac{(b-a)}{2} < x < \frac{(b-a)}{2} & \text{região (III)} \\ 0 & \frac{(b-a)}{2} < x < \frac{(b+a)}{2} & \text{região (IV)} \\ \infty & x > \frac{(b+a)}{2} & \text{região (V)} \end{array} \right. \quad (1.1)$$

Os algarismos romanos indicam as regiões espaciais que o potencial é constante, como representado na Figura 1.

A equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo possui a seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.2)$$

e pode ser aplicada nas regiões da seguinte forma:

$$\text{Regiões II e IV: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x). \quad (1.3)$$

$$\text{Região III: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.4)$$

2.1.1 Energia total maior que a barreira de potencial

Considerando o sistema como sendo uma partícula sujeita ao poço de potencial e a energia total do sistema maior que a barreira de potencial ($E > V_0$), pode-se determinar as autofunções de cada região; ou seja:

$$\text{Região I: } \psi_I(x) = 0 \quad (2.5)$$

$$\text{Região II: } \psi_{II}(x) = A\text{sen}(Kx) + B\text{cos}(Kx) \quad (2.6)$$

$$\text{Região III: } \psi_{III}(x) = C\text{sen}(\beta x) + D\text{cos}(\beta x) \quad (2.7)$$

$$\text{Região IV: } \psi_{IV}(x) = F\text{sen}(Kx) + G\text{cos}(Kx) \quad (2.8)$$

$$\text{Região V: } \psi_V(x) = 0 \quad (2.9)$$

Nesse caso, temos definidos:

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2.10)$$

$$\text{e } \beta^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \quad (2.11)$$

Nas equações (2.6), (2.7) e (2.8) A, B, C, D, F e G são constantes.

Nas regiões I e V a função de onda é nula devido ao potencial ser infinito. Isso significa que nas fronteiras externas dos poços, $\psi(x)$ satisfaz as seguintes condições de contorno:

$$\psi\left[-\frac{(b+a)}{2}\right] = \psi\left[\frac{(b+a)}{2}\right] = 0. \quad (2.12)$$

Aplicando estas condições na solução da região II, a equação (2.6), implica em que:

$$\psi \left[-\frac{(b+a)}{2} \right] = A \operatorname{sen}\left\{K \left[-\frac{(b+a)}{2} \right]\right\} + B \operatorname{cos}\left\{K \left[-\frac{(b+a)}{2} \right]\right\} = 0, \quad (2.13)$$

E na solução da região IV, da equação (2.8) obtêm-se:

$$\psi \left[\frac{(b+a)}{2} \right] = F \operatorname{sen}\left\{K \left[\frac{(b+a)}{2} \right]\right\} + G \operatorname{cos}\left\{K \left[\frac{(b+a)}{2} \right]\right\} = 0. \quad (2.14)$$

Para que as equações (2.13) e (2.14) sejam iguais a zero nas fronteiras externas do poço é necessário que uma das opções a seguir seja obedecida:

$$\text{Opção 1: } A = F = 0, \quad (2.15)$$

e

$$\psi(x) = B \operatorname{cos}\left\{K \left[x + \frac{\pi}{2} + \frac{(b+a)}{2} \right]\right\}, \text{ (região II)} \quad (2.16)$$

$$\psi(x) = G \operatorname{cos}\left\{K \left[x + \frac{\pi}{2} - \frac{(b+a)}{2} \right]\right\}. \text{ (região IV)} \quad (2.17)$$

Uma outra possibilidade para obter as equações (2.13) e (2.14) é:

$$\text{Opção 2: } B = G = 0, \quad (2.18)$$

e

$$\psi(x) = A \operatorname{sen}\left\{K \left[x + \frac{(b+a)}{2} \right]\right\}, \text{ (região II)} \quad (2.19)$$

$$\psi(x) = F \operatorname{sen}\left\{K \left[x - \frac{(b+a)}{2} \right]\right\}. \text{ (região IV)} \quad (2.20)$$

As duas opções descritas acima levam a solução do problema. Trabalhando com a opção 2, o próximo passo é aplicar a continuidade nas funções de onda e suas derivadas nos pontos $x = \pm \frac{(b-a)}{2}$. Então, para $x = -\left(\frac{b-a}{2}\right)$, tem se:

$$A \operatorname{sen}(Ka) = -C \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] + D \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \quad (2.21)$$

e

$$AK \cos(Ka) = C \beta \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] + D \beta \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \quad (2.22)$$

Por outro lado, para $x = \left(\frac{b-a}{2}\right)$, tem-se:

$$-F \operatorname{sen}(Ka) = C \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] + D \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \quad (2.23)$$

e

$$FK \cos(Ka) = C \beta \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] - D \beta \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right]. \quad (2.24)$$

As equações (2.21) e (2.23) correspondem à continuidade das funções de onda nos dois pontos considerados, enquanto (2.22) e (2.24) representam a continuidade das derivadas destas funções nos pontos em questão. Isolando A na equação (2.21) e substituindo em (2.22), obtém-se:

$$\frac{C}{D} = \frac{-K \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \cot(Ka) + \beta \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right]}{-K \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \cot(Ka) - \beta \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right]}. \quad (2.25)$$

Isolando F na equação (2.23) e substituindo em (2.24), obtém-se:

$$\frac{C}{D} = \frac{-\beta \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] + K \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \cot(Ka)}{\beta \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] - K \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \cot(Ka)}. \quad (2.26)$$

Igualando as equações (2.25) e (2.26), tem-se:

$$\beta \operatorname{sen}\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] = K \cos\left[\beta \left(\frac{b-a}{2}\right)\right] \cot(Ka). \quad (2.27)$$

que nos dá a equação transcendental:

$$\beta \tan \left[\frac{\beta(b-a)}{2} \right] = K \cot(Ka). \quad (2.28)$$

A equação (2.26) pode ser reescrita como:

$$\frac{C}{D} = \frac{+\beta \operatorname{sen}[\beta(\frac{b-a}{2})] - K \cos[\beta(\frac{b-a}{2})] \cot(Ka)}{+\beta \cos[\beta(\frac{b-a}{2})] + K \operatorname{sen}[\beta(\frac{b-a}{2})] \cot(Ka)}. \quad (2.29)$$

Igualando as equações (2.25) e (2.29), obtém-se:

$$\beta \cos[\beta(\frac{b-a}{2})] = -K \operatorname{sen}[\beta(\frac{b-a}{2})] \cot(Ka). \quad (2.30)$$

resultando a equação transcendental:

$$-K \cot(Ka) = \beta \cot[\beta(\frac{b-a}{2})]. \quad (2.31)$$

Com as equações transcendentais (2.28) e (2.31) é possível determinar os autovalores de energia acima da barreira central ($E > V_0$) através de uma análise gráfica, apresentada no Apêndice B.1, localizando o ponto de intersecção entre as curvas dessas equações em função da energia.

2.1.2 Energia total menor que a barreira de potencial

Da mesma forma que foi realizado para energia maior que o valor da barreira V_0 , a solução do problema pode ser encontrada para energia total menor que a barreira de potencial ($E < V_0$). Quando a energia do sistema é menor que a barreira de potencial V_0 , a solução do problema nas respectivas regiões espaciais é dada por:

$$\text{Região I: } \psi_1(x) = 0. \quad (2.32)$$

$$\text{Região II: } \psi_{\text{II}}(x) = A \text{sen}(Kx) + B \text{cos}(Kx). \quad (2.33)$$

$$\text{Região III: } \psi_{\text{III}}(x) = C e^{\beta x} + D e^{-\beta x}. \quad (2.34)$$

$$\text{Região IV: } \psi_{\text{IV}}(x) = F \text{sen}(Kx) + G \text{cos}(Kx). \quad (2.35)$$

$$\text{Região V: } \psi_{\text{V}}(x) = 0. \quad (2.36)$$

Nas expressões acima, as equações (2.32) a (2.36), adotou-se:

$$K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2.37)$$

e

$$\beta^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}. \quad (2.38)$$

Nas equações (2.33), (2.34) e (2.35) A, B, C, D, F e G são constantes.

O mesmo procedimento feito para a função de onda nas fronteiras externas do poço para a energia maior que a barreira de potencial, é realizado neste caso. Como a função de onda permanece a mesma nas regiões II e IV o resultado desta análise é o mesmo já discutido anteriormente. Considerando $B = G = 0$, tem-se:

$$\text{Região II: } \psi_{\text{II}}(x) = A \text{sen}\left\{K \left[x + \frac{(b+a)}{2}\right]\right\}, \quad (2.39)$$

$$\text{Região IV: } \psi_{\text{IV}}(x) = F \text{sen}\left\{K \left[x - \frac{(b+a)}{2}\right]\right\}. \quad (2.40)$$

O próximo passo é aplicar a continuidade nas funções de onda e suas derivadas nos pontos $x = \pm \frac{(b-a)}{2}$. Então, para $x = -\frac{(b-a)}{2}$ tem-se:

$$A \text{sen}(Ka) = C e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}} + D e^{\frac{\beta(b-a)}{2}} \quad (2.41)$$

e

$$AK\cos(Ka) = C\beta e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}} - D\beta e^{\frac{\beta(b-a)}{2}}. \quad (2.42)$$

Para $x = \frac{(b-a)}{2}$, tem-se:

$$-F\sin(Ka) = Ce^{\frac{\beta(b-a)}{2}} + De^{-\frac{\beta(b-a)}{2}} \quad (2.43)$$

e

$$FK\cos(Ka) = C\beta e^{\frac{\beta(b-a)}{2}} - D\beta e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}}. \quad (2.44)$$

As equações (2.41) e (2.43) correspondem à continuidade da função de onda nos pontos indicados acima. As equações (2.42) e (2.44) correspondem à continuidade da derivada da função de onda nesses pontos.

Isolando A da equação (2.41) e substituindo em (2.42), obtém-se:

$$\frac{C}{D} = \frac{[\beta + K\cot(Ka)]e^{\frac{\beta(b-a)}{2}}}{[\beta - K\cot(Ka)]e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}}}. \quad (2.45)$$

O valor da constante F pode ser obtido seguindo o mesmo raciocínio. Isolando F da equação (2.43) e substituindo na equação (2.44), tem-se:

$$\frac{C}{D} = \frac{[\beta - K\cot(Ka)]e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}}}{[\beta + K\cot(Ka)]e^{\frac{\beta(b-a)}{2}}}. \quad (2.46)$$

O mesmo procedimento pode ser realizado para a opção 1, obtendo os seguintes resultados:

$$\frac{C}{D} = \frac{\{\beta - K\tan[K(a + \frac{\pi}{2})]\}e^{\frac{\beta(b-a)}{2}}}{\{\beta + K\tan[K(a + \frac{\pi}{2})]\}e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}}}, \quad (2.47)$$

e

$$\frac{C}{D} = \frac{[\beta - K \tan K(-a + \frac{\pi}{2})] e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}}}{[\beta + K \tan K(-a + \frac{\pi}{2})] e^{\frac{\beta(b-a)}{2}}}. \quad (2.48)$$

Sabendo que $\cot(Ka) = -\tan[K(a + \frac{\pi}{2})] = \tan[K(-a + \frac{\pi}{2})]$, conclui-se que a equação (2.45) é igual a (2.47) e a equação (2.46) é equivalente a (2.48). Portanto, as opções 1 e 2 levam ao mesmo resultado. Igualando as equações (2.45) e (2.46), obtemos:

$$\left\{ \frac{[\beta + K \cot(Ka)]}{[\beta - K \cot(Ka)]} \right\} = \sqrt{e^{-2\beta(b-a)}}, \quad (2.49)$$

ou seja,

$$\frac{[\beta + K \cot(Ka)]}{[\beta - K \cot(Ka)]} = \pm e^{-\beta(b-a)}. \quad (2.50)$$

Com um desenvolvimento algébrico, que é apresentado no Apêndice B.2, a relação acima pode ser reescrita em termos de funções hiperbólicas, cujo resultado é consistente ao obtido na referência [13]. Assim, a equação (2.50) passa a ser escrita por duas expressões:

$$K \cot(Ka) = -\beta \tanh \frac{\beta(b-a)}{2}, \quad (2.51a)$$

e

$$K \cot(Ka) = -\beta \coth \frac{\beta(b-a)}{2}. \quad (2.51b)$$

Com essas equações transcendentais, equação (2.51a) e (2.51b), é possível obter os autovalores de energia dentro do poço, através da interseção das curvas dessas equações em função da energia, como apresentado no Apêndice B.3.

2.1.3 Uma partícula em um poço duplo quadrado unidimensional simétrico

Consideramos o seguinte modelo simples de uma molécula diatômica (unidimensional), consistindo de dois poços potenciais (ver figura 2.1); aqui, o potencial é dado por ($a < b$) [13]. O mesmo procedimento feito para energia menor que o valor da barreira V_0 e para as funções de onda do poço duplo, secção 2.2.2, é realizado neste caso.

As funções de onda devem ser contínuas; em particular, nós devemos ter $\psi_I \left[-\frac{(b \pm a)}{2} \right] = \psi_{II} \left[\frac{(b \pm a)}{2} \right] = 0$, etc. Além disso, a sua derivada deve ser contínua para $x = \pm \frac{(b-a)}{2}$. Assim sendo, nós temos que unir as diferentes soluções de forma adequada, o que só será possível para certas energias $E(\sim K, \beta)$.

A condição de contorno nos pontos $x = \pm \frac{(b+a)}{2}$ acarreta de imediato,

$$\psi_{II}(x) = A \operatorname{sen} K \left[x + \frac{(b+a)}{2} \right] \quad (2.52)$$

e

$$\psi_{IV}(x) = F \operatorname{sen} K \left[x - \frac{(b-a)}{2} \right]. \quad (2.53)$$

Neste momento, ainda temos quatro condições de contorno [13]:

$$C e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}} + D e^{\frac{\beta(b-a)}{2}} = A \operatorname{sen}(Ka), \quad (2.54)$$

$$C \beta e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}} - D \beta e^{\frac{\beta(b-a)}{2}} = AK \cos(Ka), \quad (2.55)$$

$$C e^{\frac{\beta(b-a)}{2}} + D e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}} = -F \operatorname{sen}(Ka), \quad (2.56)$$

$$C \beta e^{\frac{\beta(b-a)}{2}} - D \beta e^{-\frac{\beta(b-a)}{2}} = FK \cos(Ka), \quad (2.57)$$

ou

$$2(C + D)\cosh\frac{\beta(b-a)}{2} = (A - F)\text{sen}(Ka), \quad (2.58)$$

$$2(C - D)\beta\cosh\frac{\beta(b-a)}{2} = (A + F)K\cos(Ka), \quad (2.59)$$

$$-2(C - D)\text{senh}\frac{\beta(b-a)}{2} = (A + F)\text{sen}(Ka), \quad (2.60)$$

$$-2(C + D)\beta\text{senh}\frac{\beta(b-a)}{2} = (A - F)K\cos(Ka). \quad (2.61)$$

As equações acima, são quatro (relativamente separadas) para as variáveis $C + D, C - D, A + F$ e $A - F$ que não podem sumir simultaneamente e $\frac{\beta(b-a)}{2}$ é sempre diferente de zero; conseqüentemente podemos dividir pelas funções hiperbólicas,

$$C + D = \frac{\text{sen}(Ka)}{2\cosh\frac{\beta(b-a)}{2}} (A - F) = -\frac{K\cos(Ka)}{2\beta\text{senh}\frac{\beta(b-a)}{2}} (A - F), \quad (2.62)$$

$$C - D = \frac{-\text{sen}(Ka)}{2\text{senh}\frac{\beta(b-a)}{2}} (A + F) = \frac{K\cos(Ka)}{2\beta\cosh\frac{\beta(b-a)}{2}} (A + F). \quad (2.63)$$

Assim sendo,

$$A_1: A - F = C + D = 0$$

ou

$$A_2: \frac{1}{K}\tan(Ka) = -\frac{1}{\beta}\coth\frac{\beta(b-a)}{2} \text{ e } C + D = \frac{\text{sen}(Ka)}{2\cosh\frac{\beta(b-a)}{2}} (A - F) \quad (2.64)$$

e

$$A_3: A + F = C - D = 0$$

ou

$$A_4: \frac{1}{K} \tan(Ka) = -\frac{1}{\beta} \tanh \frac{\beta(b-a)}{2} \text{ e } C - D = \frac{-\operatorname{sen}(Ka)}{2\operatorname{senh} \frac{\beta(b-a)}{2}} (A - F) \quad (2.65)$$

As proposições A_1 a A_4 não podem ser ao mesmo tempo verdadeiras ou falsas, além disso, não existe a possibilidade de uma terceira situação diferente de verdadeiro ou falso. Portanto, abreviamos as proposições acima usando conectivos (\wedge significa "e" e \vee significa "ou") lógicos:

$$(A_1 \vee A_2) \wedge (A_3 \vee A_4) = \textit{verdadeiras};$$

Expandindo resulta:

$$(A_1 \wedge A_3) \vee (A_1 \wedge A_4) \vee (A_2 \wedge A_3) \vee (A_2 \wedge A_4) = \textit{verdadeiras}.$$

Primeiramente, foi mostrado que as proposições $(A_1 \wedge A_3)$ e $(A_2 \wedge A_4)$ não podem ser verdadeiras:

$$(A_1 \wedge A_3) = \textit{verdadeira, se e somente se, } A = C = D = F = 0. \quad (2.66)$$

Como as variáveis não podem desaparecer, temos:

$$(A_1 \wedge A_3) = \textit{falsa}$$

e

$$(A_2 \wedge A_4) = \textit{verdadeira} \Rightarrow \tanh \frac{\beta(b-a)}{2} = \operatorname{coth} \frac{\beta(b-a)}{2}. \quad (2.67)$$

A última equação é verdadeira somente se $\beta = 0$; este caso também foi excluído anteriormente. Logo, $(A_2 \wedge A_4)$ é falsa também. Então, nossa equação lógica é limitada a:

$(A_1 \wedge A_4) \vee (A_2 \wedge A_3)$ são *verdadeiras*.

Inserindo as definições, obtemos o seguinte sistema de equações [13]:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 - F_1 = C_1 + D_1 = 0, \\ \frac{1}{K_1} \tan(K_1 a) = -\frac{1}{\beta_1} \tanh \frac{\beta_1(b-a)}{2}, \\ C_1 = \frac{-\operatorname{sen}(K_1 a)}{2 \operatorname{senh} \frac{\beta_1(b-a)}{2}} A_1, \end{array} \right\} \quad (2.68)$$

ou

$$\left\{ \begin{array}{l} A_2 + F_2 = C_2 - D_2 = 0, \\ \frac{1}{K_2} \tan(K_2 a) = -\frac{1}{\beta_2} \coth \frac{\beta_2(b-a)}{2}, \\ C_2 = \frac{-\operatorname{sen}(K_2 a)}{2 \operatorname{cosh} \frac{\beta_2(b-a)}{2}} A_2 \end{array} \right\}. \quad (2.69)$$

As duas equações centrais (2.68) e (2.69) fornecem os autovalores $E_1^{(i)}$ e $E_2^{(i)}$, respectivamente, como as soluções de uma equação difícil,

$$\{K_i = \sqrt{\frac{2mE_i}{\hbar^2}} \text{ e } \beta_i = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E_i)}{\hbar^2}}\} \quad (2.70)$$

Descartando o índice superior, que contém as diferentes soluções, obtemos as seguintes funções de onda nas regiões II, III e IV [13]:

$$\begin{aligned} \text{II: } \psi_1(x) &= A_1 \operatorname{sen} K_1 \left[x + \frac{(b+a)}{2} \right], \\ \psi_2(x) &= A_2 \operatorname{sen} K_2 \left[x + \frac{(b+a)}{2} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{III: } \psi_1(x) &= 2C_1 \operatorname{senh}(\beta_1 x), \\ \psi_2(x) &= 2C_2 \operatorname{cosh}(\beta_2 x), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{IV: } \psi_1(x) &= A_1 \operatorname{sen} K_1 \left[x - \frac{(b+a)}{2} \right], \\ \psi_2(x) &= -A_2 \operatorname{sen} K_2 \left[x - \frac{(b+a)}{2} \right]. \end{aligned} \quad (2.71)$$

As funções de onda não serão normalizadas, uma vez que, pertencentes a diferentes autovalores, são certamente ortogonais. Observamos que $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ são autofunções do operador de paridade: $\psi_1(x)$ possui paridade negativa e $\psi_2(x)$ possui paridade positiva. No caso de amplas distâncias ($b \rightarrow \infty$), ou seja, dois átomos distintos, as duas equações que determinam a energia tornam-se iguais,

$$\tan(Ka) = -\frac{K}{\beta} \text{ ou } \tan\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right) = -\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}. \quad (2.72)$$

Se examinarmos o caso extremo $V_0 \rightarrow \infty$, obtemos dois átomos separados por uma barreira de potencial muito alta e, conseqüentemente, também independentes. Daí, temos $\tan\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2mE}\right) = 0$ [13].

O próximo passo é derivarmos uma relação aproximada para as diferenças de energia $E_1 - E = \Delta_1$ e $E_2 - E = \Delta_2$. E é a energia para dois átomos completamente separados ($b \rightarrow \infty, V_0 < \infty$); E_i ($i = 1, 2$) é a energia para dois átomos a uma distância finita e extensa b . Para obter os menores autovalores no limite de elevada barreira, assumimos que $\beta(b-a) \gg 1$.

Para simplificar, adotamos $\alpha = \frac{(b-a)}{2}$; portanto, $\beta_i \alpha \gg 1$. K e β possuem o mesmo significado acima ($b \rightarrow \infty$). Com o auxílio da fórmula de Taylor, segue-se que [13]:

$$K_i = K\left(1 + \frac{\Delta_i}{2E}\right),$$

$$\beta_i = \beta\left(1 - \frac{\Delta_i}{2(V_0-E)}\right), \quad (2.73)$$

Se desconsiderarmos expressões contendo $\Delta_i^2, \Delta_i \cdot e^{-2\beta\alpha} e - e^{-4\beta\alpha}$; utilizando $\tan(Ka) = -\frac{K}{\beta}$ e as seguintes aproximações $y \gg 1$: $\tanh y \cong 1 - 2e^{-2y}$ e $\coth y \cong 1 + 2e^{-2y}$, obtemos:

$$\begin{aligned}
\tan(K_i a) &= \tan\left(Ka + Ka \frac{\Delta_i}{2E}\right) = \tan(Ka) + \frac{1}{\cos^2(Ka)} Ka \frac{\Delta_i}{2E} = \\
&\cong -\frac{K}{\beta} + \left(1 + \frac{K^2}{\beta^2}\right) Ka \frac{\Delta_i}{2E} = -\frac{K}{\beta} + \left[1 + \frac{\frac{2mE}{\hbar^2}}{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}\right] \frac{Ka\Delta_i}{2E} \\
&= -\frac{K}{\beta} + \left[1 + \frac{E}{(V_0 - E)}\right] \frac{Ka\Delta_i}{2E} = \\
&= -\frac{K}{\beta} + \frac{KaV_0}{2E(V_0 - E)} \Delta_i, \tag{2.74}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tanh\beta_1 \alpha &= \tanh\left[\beta\alpha - \beta\alpha \frac{\Delta_1}{2(V_0 - E)}\right] = \tanh\beta\alpha - \frac{1}{\cosh^2\beta\alpha} \beta\alpha \frac{\Delta_1}{2(V_0 - E)} = \\
&= 1 + \frac{\sinh\beta\alpha - \cosh\beta\alpha}{\cosh\beta\alpha} = 1 - 2e^{-2\beta\alpha}, \tag{2.75}
\end{aligned}$$

$$\coth\beta_2 \alpha = \coth\beta\alpha = 1 + 2e^{-2\beta\alpha}. \tag{2.76}$$

Consequentemente,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{K_i} \tan K_i a &= \frac{1}{K} \left(1 - \frac{\Delta_i}{2E}\right) \left[-\frac{K}{\beta} + \frac{KaV_0}{2E(V_0 - E)} \Delta_i\right] = -\frac{1}{\beta} + \left[\frac{1}{2\beta E} + \frac{aV_0}{2E(V_0 - E)}\right] \Delta_i = \\
&= -\frac{1}{\beta} + \frac{V_0(1+a\beta) - E}{2\beta E(V_0 - E)} \Delta_i, \\
-\frac{1}{\beta_1} \tanh\beta_1 \alpha &= -\frac{1}{\beta} \left[1 + \frac{\Delta_1}{2(V_0 - E)}\right] (1 - 2e^{-2\beta\alpha}) = -\frac{1}{\beta} + \frac{2}{\beta} e^{-2\beta\alpha} - \frac{\Delta_1}{2\beta(V_0 - E)}, \\
-\frac{1}{\beta_2} \coth\beta_2 \alpha &= -\frac{1}{\beta} - \frac{2}{\beta} e^{-2\beta\alpha} - \frac{\Delta_2}{2\beta(V_0 - E)}. \tag{2.77}
\end{aligned}$$

Então, a equação de autovalor para E_1 é,

$$-\frac{1}{\beta} + \frac{V_0(1+a\beta) - E}{2\beta E(V_0 - E)} \Delta_1 = -\frac{1}{\beta} + \frac{2}{\beta} e^{-2\beta\alpha} - \frac{\Delta_1}{2\beta(V_0 - E)}, \tag{2.78}$$

com a resolução,

$$\Delta_1 = 4 \frac{E(V_0 - E)}{V_0(1+a\beta)} e^{-\beta(b-a)} \tag{2.79}$$

e a equação de autovalor para E_2 é,

$$-\frac{1}{\beta} + \left[\frac{V_0(1+a\beta)-E}{2\beta E(V_0-E)} \right] \Delta_2 = -\frac{1}{\beta} - \frac{2}{\beta} e^{-2\beta\alpha} - \frac{\Delta_2}{2\beta(V_0-E)} =$$

$$\Delta_2 V_0(1+a\beta) - \Delta_2 E = -4E(V_0-E)e^{-2\beta\alpha} - \Delta_2 E, \text{ obtendo:}$$

$$\Delta_2 = -\frac{4E(V_0-E)e^{-\beta(b-a)}}{V_0(1+a\beta)}. \quad (2.80)$$

Assim sendo, $\Delta_2 = -\Delta_1$. A energia E_1 excede a energia de um único átomo; a energia E_2 , no entanto, é menor.

Adotando,

$\beta = \frac{\sqrt{[2m(V_0-E)]}}{\hbar}$, $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ e por simplicidade $a = \hbar = 2m = 1$; por meio da equação (2.79) obtemos:

$$E_1 - E = \Delta_1$$

$$E_1 = \frac{4E(V_0-E)}{V_0(1+a\beta)} e^{-\beta(b-a)} + E$$

$$E_1 = \pi^2 \left[1 + \frac{4\beta^2}{V_0(1+\beta)} e^{-\beta(b-1)} \right] \quad (2.81)$$

Da mesma forma através da equação (2.80), chegamos a:

$$E_2 = \pi^2 \left[1 - \frac{4\beta^2}{V_0(1+\beta)} e^{-\beta(b-1)} \right] \quad (2.82)$$

CAPÍTULO III

MÉTODO VARIACIONAL

O método variacional e outros métodos aproximativos, como a perturbação, possibilitam obter uma solução aproximada da equação de Schrödinger de alguns hamiltonianos [12].

Mesmo que esse método não seja capaz de fornecer todas as autofunções e energias dos autoestados do sistema, as informações obtidas podem ser suficientes para o problema tratado. Muitas vezes, a informação que necessitamos se resume à energia do estado fundamental, o que o método variacional é capaz de fornecer com certa segurança desde que façamos uso de funções teste adequadas, como será discutido a seguir.

3.1 O método variacional

Com a finalidade de desenvolver o método variacional vamos considerar uma função de onda ψ normalizada, ou seja, $\int |\psi|^2 dx = 1$. Já que as autofunções (desconhecidas) de H formam um conjunto completo, podemos expandir essa função em uma série de autofunções de energia, ou seja:

$$\psi = \sum_n A_n \psi_n. \quad (3.1)$$

Recordando que ψ_n é uma autofunção, ela deve satisfazer a equação de Schrödinger:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (3.2)$$

Nestas condições, o valor esperado da Hamiltoniana H para a função ψ é dado por:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \psi^* H\psi dx = \sum_n \sum_m A_n^* \left(\int \psi_n H\psi_m dx \right) A_m = \\ &= \sum_n \sum_m A_n^* A_m E_m \int \psi_n \psi_m. \end{aligned} \quad (3.3)$$

A exigência de ortonormalidade indica que para $n \neq m$ temos $\int \psi_n \psi_m = 0$ e para $n = m$ tem-se $\int \psi_n \psi_m = 1$, então, a equação (3.3) é reduzida a:

$$\langle H \rangle = \sum_n E_n |A_n|^2. \quad (3.4)$$

Em seguida substituímos cada autovalor E_n em (3.4) pelo autovalor de mais baixa energia, E_0 , obtendo assim a seguinte desigualdade:

$$\langle H \rangle \geq \sum_n E_0 |A_n|^2 = E_0 \sum_n |A_n|^2. \quad (3.5)$$

Uma vez que $\sum_n |A_n|^2 = 1$, pois a função de onda é normalizada, chega-se a seguinte expressão:

$$E_0 \leq \langle H \rangle = \int \psi^* H \psi dx. \quad (3.6)$$

No caso em que ψ não é normalizada [12], pode-se reescrever (3.6) como:

$$E_0 \leq \frac{\int \psi^* H \psi dx}{\int |\psi|^2 dx}. \quad (3.7)$$

Este método é utilizado para calcular um limite superior para o autovalor de energia do estado fundamental. Nesse caso, a função ψ é construída como sendo dependente de um certo número de parâmetros, a minimização da integral em (3.7) em relação a esses parâmetros fornece uma estimativa para E . Assim, quanto mais próxima a função estiver do que seria a função de onda real melhor será o resultado obtido.

O método variacional geralmente é aplicado ao estado fundamental, ainda que não haja restrição formal ao seu uso para estados excitados [12].

3.2 Diferença de energia ΔE dada por uma combinação simétrica e antissimétrica da função de onda dos poços simples (variacional)

A energia potencial $V(x)$ consiste de dois poços de potencial simétricos, separados por uma barreira. Na figura abaixo os poços são as regiões II e IV, e a barreira tem altura V_0 . Se a barreira fosse impenetrável, haveria níveis de energia relativos ao movimento da partícula em um ou outro dos dois poços, ou seja, duas famílias de níveis iguais, uma em cada poço. O fato de que o tunelamento através da barreira em mecânica quântica faz com que cada um dos níveis relativos ao movimento em um dos poços se separe em dois níveis próximos, correspondendo agora a estados da partícula em que ela está nos dois poços.

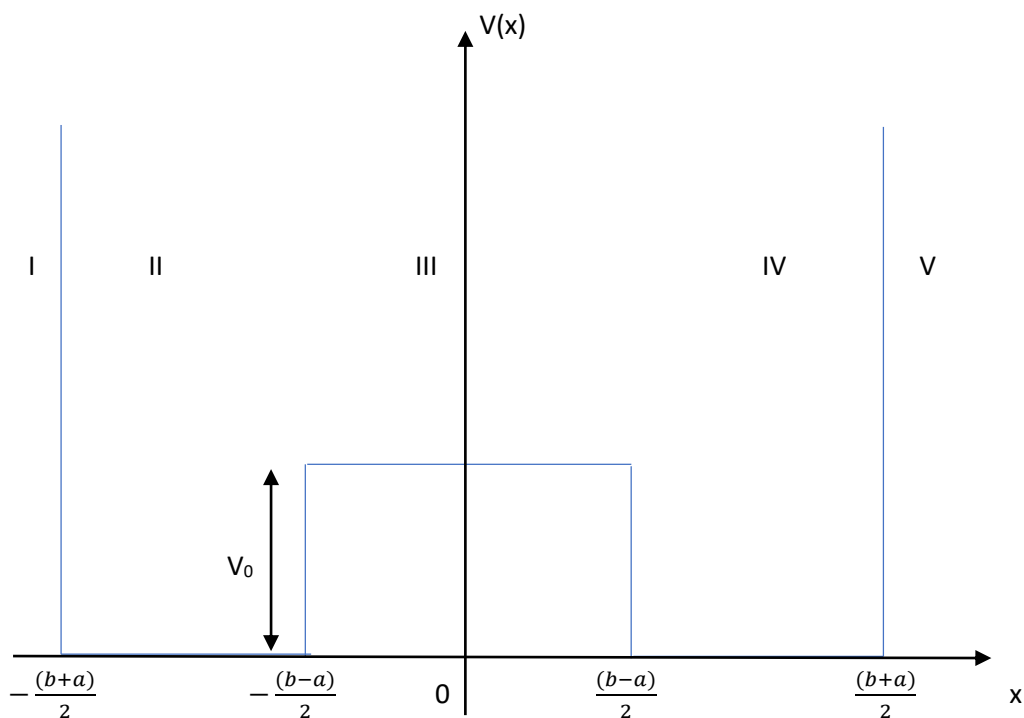


Figura 2 – Representação do Poço Duplo Quadrado Unidimensional Simétrico

Uma solução aproximada da equação de Schrödinger para $V(x)$, desconsiderando a possibilidade de passagem pela barreira, pode ser desenvolvida com a função de onda do estado fundamental dada por $\psi_0(x)$ e por uma combinação simétrica e antissimétrica da função de onda $\psi_0(x)$ dos poços simples [11,14]. Tomando esta função de onda do estado fundamental dada por

$\psi_0(x)$, que descreve o movimento com uma certa energia E_0 em um dos poços (por exemplo, poço IV).

Sendo $\psi_0(x)$ normalizada, temos satisfeita a equação de Schrödinger:

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E_0 - V(x)]\psi_0(x) = 0 \quad (3.8)$$

O produto $\psi_0(x) \cdot \psi_0(-x)$, para $x > 0$, é desprezível e o potencial como um todo é simétrico, então:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi(x) = 0 \quad (3.9)$$

Permanece válida quando se troca x por $-x$. Portanto, se $\psi(x)$ é uma função de onda, $\psi(-x)$ também é, para o mesmo valor de E .

As autofunções do sistema são funções pares ou ímpares de x . Isto é uma consequência de que $V(x) = V(-x)$. As duas funções de onda mais baixas do poço duplo, são obtidas construindo, a partir de ψ_0 , as funções ψ_1 , simétrica, e ψ_2 , antissimétrica:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) + \psi_0(-x)] \quad (3.10)$$

e

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) - \psi_0(-x)] \quad (3.11)$$

Como os níveis dos poços simples não são degenerados, devemos ter energias diferentes para $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$. Portanto,

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - V(x)]\psi_1(x) = 0 \quad (3.12)$$

é a equação de Schrödinger para $\psi_1(x)$, e

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E_2 - V(x)]\psi_2(x) = 0 \quad (3.13)$$

é a equação de Schrödinger para $\psi_2(x)$.

Multiplicando (3.8) por $\psi_1(x)$ e (3.12) por $\psi_0(x)$ e subtraindo, obtemos:

$$\psi_1(x)\psi_0''(x) - \psi_0(x)\psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - E_1)\psi_0(x)\psi_1(x) = 0 \quad (3.14)$$

ou

$$\frac{d}{dx} [\psi_1(x)\psi_0'(x) - \psi_0(x)\psi_1'(x)] = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_0)\psi_0(x)\psi_1(x) \quad (3.15)$$

Integrando de 0 a ∞ :

$$\int_0^\infty \frac{d}{dx} [\psi_1(x)\psi_0'(x) - \psi_0(x)\psi_1'(x)] dx =$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_0) \int_0^\infty \psi_0(x)\psi_1(x) dx \quad (3.16)$$

$$[\psi_1(x)\psi_0'(x) - \psi_0(x)\psi_1'(x)]_0^\infty =$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_0) \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty \psi_0(x)[\psi_0(x) + \psi_0(-x)] dx = \quad (3.17)$$

$$\approx \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_0) \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty \psi_0^2(x) dx \quad (3.18)$$

em que desprezamos $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ por ser muito pequeno. Recordando que as funções que aparecem no primeiro membro se anulam no infinito, temos:

$$\psi_0(0)\psi_1'(0) - \psi_1(0)\psi_0'(0) = \frac{\sqrt{2}m}{\hbar^2} (E_1 - E_0) \quad (3.19)$$

Utilizando a equação (3.10), obtemos:

$$\psi_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(0) + \psi_0(0)] = \sqrt{2}\psi_0(0) \quad (3.20)$$

enquanto,

$$\psi'_1(0) = 0 \quad (3.21)$$

Substituindo (3.20) e (3.21) em (3.19), teremos:

$$E_1 - E_0 = -\frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi'_0(0) \quad (3.22)$$

Repetindo os cálculos com $\psi_2(x)$ e $\psi_0(x)$, obtemos ao longo dos mesmos passos,

$$E_2 - E_0 = \frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi'_0(0) \quad (3.23)$$

A subtração de (3.23) e (3.22) nos leva a:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi'_0(0) \quad (3.24)$$

Por simplicidade, usaremos $a = \hbar = 2m = 1$ para calcular ΔE , uma vez que a função de onda do estado fundamental do único poço é bem conhecida [17] e é dada pela função:

$$\psi_{(x)} = C e^{[-\beta(x+(b-a))/2]} \quad (3.25)$$

em que C é uma constante de normalização e β é o mesmo definido anteriormente. Na origem esta função obtém o valor

$$\psi_{(0)} = C e^{[-\frac{\beta(b-a)}{2}]} \quad (3.26)$$

e a primeira derivada é

$$\psi'_{(0)} = -C\beta e^{\left[-\frac{\beta(b-a)}{2}\right]} \quad (3.27)$$

Substituindo as equações (3.26) e (3.27) na equação (3.24), resulta:

$$\Delta E = -4C^2\beta e^{-\beta(b-1)} \quad (3.28)$$

A quantidade ΔE , é geralmente pequena e difícil de calcular numericamente, especialmente quando a barreira interna é grande, isto é, existe uma grande extensão da região clássica entre os dois mínimos. No presente trabalho, admite-se que o estado de energia fundamental (E_0) para um único poço é menor que a energia máxima da barreira (V_0), $E_0 \ll V_0$.

É importante salientar que, em casos gerais, há muitas maneiras de dividir um poço duplo na soma dos poços individuais.

Assim, para calcular ΔE usando a expressão (3.24) é necessário ter a função de onda $\psi_0(x)$ no estado fundamental e sua derivada $\psi'_0(x)$ ambas calculadas na origem ($x = 0$).

Se o único poço que combina para formar o poço duplo simétrico não tiver uma solução exata para seu estado fundamental, uma maneira possível é usar a aproximação WKB, que será abordado na próxima seção.

CAPÍTULO IV

APROXIMAÇÃO WKB

Nesta parte, apresentamos o método de aproximação WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) e está conectado com as regras de quantificação da antiga teoria quântica [11]. Desta forma esse tratamento também é chamado de método de aproximação semi-clássico.

Usualmente, como se sabe, o método WKB é adequado para os casos em que o comprimento de onda da partícula é pequeno comparado com a distância sobre a qual o potencial varia apreciavelmente. A aproximação WKB é uma técnica utilizada para encontrar soluções aproximadas da equação de Schrödinger, independente do tempo em uma dimensão [18]. Podemos aplicar a mesma ideia básica da aproximação WKB para encontrar soluções de outros tipos de equações diferenciais e para resolver a parte radial da equação de Schrödinger em três dimensões.

A aproximação é útil para cálculo de energias de estados ligados e taxas de tunelamento por barreiras de potenciais.

4.1 Aproximação WKB aplicada à Equação de Schrödinger

A fim de obtermos uma solução aproximada para a equação de Schrödinger através do método WKB, vamos partir da equação de Schrödinger Independente do tempo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (4.1)$$

Reescrevendo a equação (4.1) da seguinte forma,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{[p(x)]^2}{\hbar^2}\psi(x) \quad (4.2)$$

com $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$ que é a fórmula clássica para o momento de uma partícula com energia total E e energia potencial $V(x)$. Por agora, nos

restringiremos a energias $E > V(x)$, de forma que $p(x)$ é real [18]. Nesse sistema em geral as funções de onda são funções complexas, assim podemos escrevê-la em coordenadas polares, contendo uma amplitude $A(x)$ e uma fase $\phi(x)$, ambos números reais:

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}. \quad (4.3)$$

Substituindo essa função na equação de Schrödinger obtemos um sistema de equações acoplados em termos de $A(x)$ e $\phi(x)$. Utilizando uma apóstrofe para indicar a derivada em relação a x encontramos:

$$\frac{d\psi}{dx} = A'(x)e^{i\phi(x)} + A(x)i\phi'(x)e^{i\phi(x)} = [A'(x) + iA(x)\phi'(x)]e^{i\phi(x)}, \quad (4.4)$$

e

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \{A''(x) + 2iA'(x)\phi'(x) + iA(x)\phi''(x) - A(x)[\phi'(x)]^2\}e^{i\phi(x)}. \quad (4.5)$$

Substituindo a equação (4.5) na equação (4.2), resulta:

$$A''(x) + 2iA'(x)\phi'(x) + iA(x)\phi''(x) - A(x)[\phi'(x)]^2 = -\frac{p(x)^2}{\hbar^2}A, \quad (4.6)$$

que equivale a duas equações, uma para a parte real e outra para a parte imaginária:

$$A''(x) = A(x)\{[\phi'(x)]^2 - \frac{p(x)^2}{\hbar^2}\}, \text{ ou } A''(x) = A(x)[\phi'(x)]^2 - \frac{p(x)^2}{\hbar^2}, \quad (4.7)$$

e

$$2A'(x)\phi'(x) + A(x)\phi''(x) = 0, \text{ ou } [A^2(x)\phi'(x)]' = 0 \quad (4.8)$$

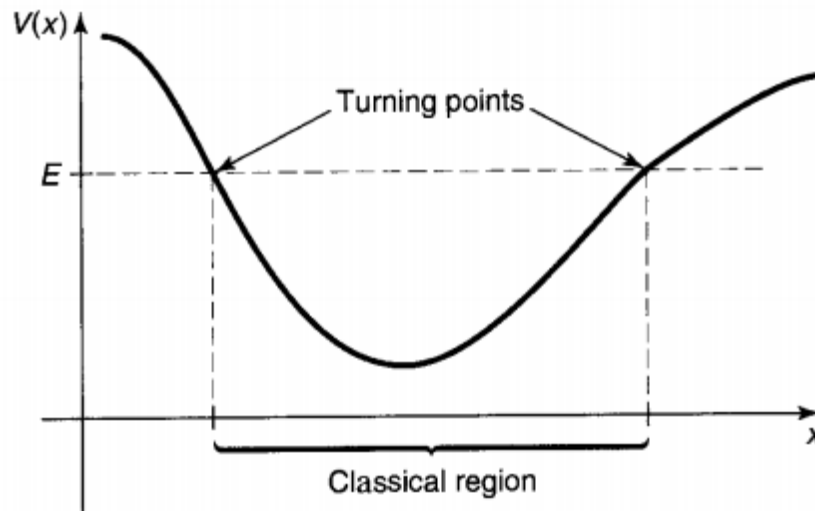


Figura 3 - Classicamente, a partícula está limitada à região em que $E \geq V(x)$.

As equações (4.7) e (4.8) são completamente equivalentes à equação de Schrödinger. A equação (4.8) é de fácil solução,

$$A^2(x)\phi'(x) = C^2, \text{ ou } A = \frac{C}{\sqrt{\phi'(x)}}, \quad (4.9)$$

sendo C uma constante real. Não podemos dizer, a mesma coisa a respeito da resolução da equação (4.7). Para resolvê-la vamos fazer a aproximação do método WKB, assumindo que A varia lentamente, assim o termo $A''(x) \rightarrow 0$. Fazendo essa aproximação podemos reescrever a equação (4.7) da seguinte maneira:

$$[\phi'(x)]^2 = \frac{p(x)^2}{\hbar^2}. \quad (4.10)$$

Resolvendo esta última expressão obtemos duas soluções linearmente independentes, $\phi' = \pm \frac{p(x)}{\hbar}$. Assim obtemos, a expressão para o $\phi(x)$:

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx. \quad (4.11)$$

Escrevemos essa integral indefinida porque o termo constante pode ser absorvido pela constante C , que pode se tornar complexa. Finalmente obtemos a expressão para a função de onda na aproximação WKB:

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \quad (4.12)$$

Também construímos a expressão para quando a energia E da partícula é menor que o potencial $V(x)$ (região classicamente proibida), só que agora $p(x)$ é imaginário:

$$\psi(x) = \frac{c}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx} \quad (4.13)$$

Usando a aproximação WKB para calcular $\psi_0(x)$ e $\psi'_0(x)$ na região clássica proibida ($x = 0$ pertence a esta região), $\psi_0(x)$ é dado por [12],

$$\psi_0(x) = \frac{N}{2\sqrt{|p(x)|}} e^{(-\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx)} \quad (4.14)$$

em que a constante de normalização é dada por $N = \sqrt{\frac{2\omega m}{\pi}}$ e $p(x) = \sqrt{2m[V(x) - E_0]}$ [11].

Usando a equação (4.14) e sua primeira derivada, obtém-se depois de alguma álgebra,

$$\psi_0(0)\psi'_0(0) = \frac{m\omega}{2\pi\hbar} e^{(-\frac{1}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} |p(x)| dx)} \quad (4.15)$$

em que x_0 e $-x_0$ são os pontos de mudança clássicos na barreira interna. A substituição da eq. (4.15) na equação (3.24) leva a:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{\hbar\omega}{\pi} e^{(-\frac{1}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m[V(x) - E_0]} dx)} \quad (4.16)$$

Aplicando (4.16) ao poço duplo, implica que:

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{\pi} e^{\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\frac{(b-a)}{2}}^{\frac{(b-a)}{2}} \sqrt{2m[V_0 - E_0]} dx\right)} \quad (4.17)$$

e considerando

$$\beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_0)}}{\hbar}, E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \text{ e por simplicidade } a = \hbar = 2m = 1,$$

temos:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{\omega}{\pi} e^{-\beta(b-1)} \quad (4.18)$$

Assim, trabalhando nesta aproximação, basta especificar a forma do potencial $V(x)$ para ter a diferença de energia E entre os dois níveis mais baixos do poço duplo simétrico.

CAPÍTULO V

SOLUÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO USANDO SUPERSIMETRIA: PARTE RADIAL

Na obtenção da solução radial, são explorados os limites assintóticos e com a variável tendendo a zero, o restante da solução é determinada por uma expansão em série de potências.

A presente seção tem como objetivo trabalhar com um método de obtenção da solução da equação de Schrödinger por uma metodologia distinta daquela explorada tradicionalmente em livros e textos didáticos. A abordagem seguida aqui envolve a fatorização das equações diferenciais e construção das autofunções através da generalização dos operadores escada.

A versão moderna da metodologia empregada se enquadra no contexto da Mecânica Quântica Supersimétrica (MQS) [3-19]. A abordagem tratada nesse texto se restringe a potenciais com soluções exatas/analíticas, embora extensões para outros sistemas através de métodos aproximativos podem ser utilizadas. Exemplos dessas abordagens são a aproximação WKB [20,21] e método variacional [3,22-23].

O sistema físico estudado nesse texto é o átomo de hidrogênio, ou seja, uma partícula sujeita a um potencial de força central proporcional a $-1/r$. Como usual, esse problema é tratado em coordenadas esféricas. Com a abordagem usando a superálgebra, normalmente, apenas a parte radial dessa equação é analisada.

Isso é compreensível, uma vez que os autovalores de energia emergem da equação radial. Assim, vários trabalhos que se propõem a tratar o átomo de hidrogênio usando o formalismo de fatorização têm se restringido a trabalhar apenas com a parte dependente da variável r [3,15,24].

Também há trabalhos que calculam a função de onda azimutal (correspondente à variável angular θ) [25,26]. Neste trabalho, como estamos interessados na obtenção dos níveis de energia, apenas a parte radial da equação de Schrödinger é analisada.

A metodologia seguida aqui implica que o Hamiltoniano usado para descrever o sistema seja fatorizado por um par de operadores supersimétricos. A inversão da ordem desses operadores permite identificar o Hamiltoniano

companheiro supersimétrico do original. A exploração dessa propriedade leva à construção de uma cadeia de Hamiltonianos relacionados entre si através dos operadores supersimétricos que é conhecida como hierarquia de Hamiltonianos [3-19].

O caminho seguido aqui é apropriado para potenciais quânticos que são invariantes na sua forma funcional por transformações de supersimetria (*shape invariance*) [3,27-28]. Para esses potenciais, é possível obter a solução do problema através da construção de operadores de criação e destruição que atuam simultaneamente na coordenada espacial e no parâmetro relacionado à *shape invariance*. Uma vantagem da construção desses operadores escada é que eles permitem determinar estados coerentes para os sistemas analisados [3,29-30].

No Apêndice A, o formalismo é usado na resolução da equação de Schrödinger Independente do tempo para uma partícula numa caixa unidimensional.

5.1 Metodologia

Uma revisão recente do formalismo matemático utilizado neste trabalho pode ser encontrada no artigo de *Batael et al* [30]. Entretanto, apresentamos os pontos principais da metodologia para tornar o texto mais compreensível e didático.

O passo inicial para aplicação do formalismo utilizado é identificar o Hamiltoniano que emerge da equação de Schrödinger para um potencial $V(x)$, usado para descrever o sistema sob estudo. De forma geral, esse Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (5.1)$$

Nota-se que não há restrição sobre a natureza da coordenada x , ela pode ser cartesiana ou não. Foi adotado, por simplicidade, $\hbar = 2\mu = 1$, sendo μ a massa reduzida do sistema. Essa simplificação não altera a apresentação dos conceitos, mas ajuda a não sobrecarregar a notação.

Os operadores bosônicos, A^+ e A^- , são definidos pelas expressões:

$$A^+ = -\frac{d}{dx} + W(x; a), \quad (5.2)$$

$$A^- = \frac{d}{dx} + W(x; a), \quad (5.3)$$

em que $W(x; a)$ é chamado de superpotencial. É importante notar que os operadores A^\pm , em geral, não comutam entre si, o que faz com que a ordem em que esses operadores são aplicados seja importante. O superpotencial, no caso geral, é dependente da variável espacial e de um ou mais parâmetros $\{a\}$ presentes no potencial.

Os operadores bosônicos, equações (5.2) e (5.3), são utilizados para fatorizar o Hamiltoniano H , dado pela equação (5.1), da seguinte forma:

$$H = A^+ A^- + E_0, \quad (5.4)$$

em que E_0 é o autovalor do nível mais baixo de energia do Hamiltoniano H .

Usando os operadores bosônicos na ordem estipulada para fatorizar H , reescrevemos a equação (5.4) como:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x; a) - \frac{d}{dx} W(x; a) + E_0. \quad (5.5)$$

Observa-se que no superpotencial $W(x; a)$, é indicado de forma explícita a dependência na variável x , e de um conjunto de parâmetros $\{a\}$. Não há restrição ao número de parâmetros a serem introduzidos. Entretanto, para melhor compreensão do processo vamos restringir o formalismo ao uso de apenas um parâmetro.

Além disso, um parâmetro é suficiente para trabalhar o problema sob análise. Usando a equação (5.5) e a definição de H , equação (5.1), obtemos a seguinte equação diferencial:

$$V(x) - E_0 = W^2(x; a) - \frac{d}{dx} W(x; a), \quad (5.6)$$

que é um caso particular da equação de Riccati [16]. A resolução da equação (5.6) permite identificar o superpotencial $W(x; a)$ e o autovalor E_0 do menor nível de energia do Hamiltoniano H , o estado fundamental.

Uma vez obtido o superpotencial, podemos definir dois operadores Hamiltonianos, H^+ e H^- , que são chamados de Hamiltonianos companheiros supersimétricos:

$$H^+ = A^+ A^- = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x; a) - \frac{d}{dx} W(x; a) = -\frac{d^2}{dx^2} + V^+(x; a), \quad (5.7)$$

$$H^- = A^- A^+ = -\frac{d^2}{dx^2} + W^2(x; a) + \frac{d}{dx} W(x; a) = -\frac{d^2}{dx^2} + V^-(x; a). \quad (5.8)$$

A construção indicada para os dois Hamiltonianos acima pode ser estendida para encontrar toda uma família de Hamiltonianos (hierarquia), relacionados entre si pela supersimetria [3,4,31].

Para a construção dos operadores escada, é necessário identificar a condição de *shape invariance* [3-19] do potencial estudado usando a definição dos Hamiltonianos companheiros supersimétricos, equações (5.7) e (5.8).

O sistema é dito *shape invariant* se a diferença entre Hamiltonianos H^+ e H^- for independente da coordenada espacial e obedecer a seguinte relação:

$$R(a_1) = H^- - H^+ = V^-(x; a_0) - V^+(x; a_1). \quad (5.9)$$

Os principais potenciais de interesse físico e que são *shape invariant* possuem parâmetros relacionados entre si por uma translação [32,33]. Assim, os parâmetros a podem ser relacionados pela adição de uma constante de translação η , ou seja, $a_1 = a_0 + \eta$. Por construção, a álgebra utilizada permite estender a relação entre os parâmetros para outros membros da hierarquia de Hamiltonianos, *i.e.*, $a_2 = a_1 + \eta$, $a_3 = a_2 + \eta$, etc.

Dessa construção, podemos obter a relação entre um dado parâmetro a_k e o parâmetro inicial observando todas as k vezes em que o parâmetro foi transladado. Seguindo esse raciocínio, obtemos de forma direta a relação entre os parâmetros:

$$a_k = a_0 + k\eta. \quad (5.10)$$

Além disso, para potenciais *shape invariant*, cujos parâmetros são relacionados através de uma translação, podemos definir operadores-escada generalizados através de uma translação nos parâmetros e do uso dos operadores bosônicos, dados pelas equações (5.2) e (5.3), da seguinte forma:

$$B^+(a_0) = A^+(a_0) T^+(a_0) = A^+(a_0) e^{\eta \frac{\partial}{\partial a_0}}, \quad (5.11)$$

$$B^-(a_0) = T^-(a_0) A^-(a_0) = e^{-\eta \frac{\partial}{\partial a_0}} A^-(a_0). \quad (5.12)$$

Esses operadores, equações (5.11) e (5.12), obedecem a estrutura algébrica necessária para identificá-los como operadores-escada [32-34], podendo ser associados com uma generalização dos operadores de criação e destruição utilizados em soluções algébricas do oscilador harmônico [6].

Seguindo o tratamento usual, o operador de destruição aplicado ao estado fundamental permite a obtenção da função de onda deste estado fundamental ψ_0 . Nesse caso, temos:

$$B^-(a_0) \psi_0(x; a_0) = T^-(a_0) A^-(a_0) \psi_0(x; a_0) = 0. \quad (5.13)$$

Uma vez que o operador de translação atua apenas no espaço de parâmetros da função de onda, para a igualdade da equação (5.13) ser verdadeira é suficiente que $A^-(a_0) \psi_0(x; a_0) = 0$.

Assim, somos conduzidos ao resultado [4,32]:

$$\psi_0(x; a_0) = N \exp \left[- \int_{\bar{x}} W(\bar{x}; a_0) d\bar{x} \right] \quad (5.14)$$

sendo que, N é a constante de normalização.

O uso dos operadores-escada generalizados, equações (5.11) e (5.12), permite obter as autofunções e os autovalores de energia para os Hamiltonianos

que possuem a propriedade de *shape invariance*. Isso é feito, em linhas gerais, usando as relações [3-19,30]:

$$\psi_n(x; a_0) = [B^+(a_0)]^n \psi_0(x; a_0), \quad (5.15)$$

$$E_n = E_0 + \sum_{i=1}^n R(a_i), \quad (5.16)$$

em que E_0 é a constante subtraída do Hamiltoniano original ao fatorizarmos em termos dos operadores bosônicos, equação (5.4); e correspondem ao autovalor de energia do estado fundamental do sistema quântico estudado. O termo $R(a_i)$ é o resíduo que surge devido à propriedade de *shape invariance*, equação (5.9), com a translação no parâmetro dada pela equação (5.10). A autofunção do estado fundamental é determinada pela equação (5.14). Assim, identificando o superpotencial $W(x; a_0)$ e o resíduo $R(a_i)$ é possível resolver o problema quântico sob análise. O formalismo apresentado não se restringe a sistemas unidimensionais, como a partícula em uma caixa [3], mas também a problemas tridimensionais como desenvolvido na sequência.

5.2 Separação de variáveis

A Equação de Schrödinger Independente do tempo é uma equação diferencial de segunda ordem que pode ser escrita como [12-15]:

$$-\nabla^2 \psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z). \quad (5.17)$$

Lembrando que adotamos $\hbar=2\mu=1$. E é o autovalor da equação e corresponde a energia do sistema no estado descrito pela autofunção ψ .

Para sistemas que possuem simetria esférica, em que o potencial é função apenas da distância da origem do sistema de coordenadas até um certo ponto em r (potenciais de força central), como é o caso do átomo de hidrogênio, convém transformar as coordenadas espaciais do sistema cartesiano para o sistema esférico. Com essa mudança, o laplaciano ∇^2 toma a forma [35]:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (5.18)$$

Substituindo a equação (5.18) na equação (5.17), obtemos a equação de Schrödinger Independente do tempo em coordenadas esféricas:

$$- \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] \psi(r, \theta, \varphi) +$$

$$V(r)\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi). \quad (5.19)$$

O potencial usado para descrever o átomo de hidrogênio é o potencial coulombiano que vamos adotar aqui como sendo $V(r) = -\frac{1}{r}$. Novamente, as constantes são adotadas como sendo iguais a 1, para não carregar a notação, embora a forma completa $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ possa ser usada.

A equação (5.19) permite separação de variáveis, como é encontrado em diversos livros introdutórios de Mecânica Quântica (vide, por exemplo, [12] e [18]).

O processo de separação de variáveis se inicia com a definição da função $\psi(r, \theta, \varphi)$ como sendo o produto de funções em cada uma das variáveis, $R(r)$, $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$, ou seja,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = NR(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi), \quad (5.20)$$

sendo que N é a constante de normalização. O resultado da separação de variáveis leva a três equações diferenciais:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) + \left\{ [E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R(r) = 0, \quad (5.21)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta(\theta) \right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = 0, \quad (5.22)$$

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2}{d\varphi^2} \Phi(\varphi) = -m^2. \quad (5.23)$$

Como usual, três números quânticos são introduzidos, m , l e n , relacionados com as constantes de separação das equações. Em particular, o número quântico n está relacionado com a energia do sistema E_n como indicado mais à frente.

As equações (5.21), (5.22) e (5.23) podem ser resolvidas de maneira tradicional, como encontrado nos livros [12-15]. Entretanto, exploramos uma abordagem alternativa, seguindo a metodologia mostrada anteriormente para resolver a parte radial da equação geral (5.21).

5.3 A equação na coordenada radial

A equação diferencial radial para o átomo de hidrogênio é dada pela equação (5.21). Lembrando que a letra l corresponde ao número quântico do momento angular, já discutido na seção anterior.

Introduzindo uma nova função $f(r)$, tal que $R(r) = \frac{f(r)}{r}$, a derivada primeira pode ser eliminada da equação (5.21). Esta equação pode ser reescrita como:

$$\frac{d^2}{dr^2} f + V_{ef}(r)f = Ef, \quad (5.24)$$

em que o potencial efetivo, $V_{ef}(r)$, inclui o termo coulombiano e o termo de barreira de potencial:

$$V_{ef}(r) = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (5.25)$$

O desenvolvimento da equação (5.24), resultando na equação (5.25) é realizada no Apêndice B.5.

Assim, o Hamiltoniano original relacionado com a coordenada radial é escrito como:

$$H = -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (5.26)$$

O superpotencial, neste caso, é obtido através da fatorização do Hamiltoniano original [3,36] o que leva a necessidade de resolver a equação de Riccati, equação (5.6). Para esse problema específico, o superpotencial é conhecido [3] e dado por:

$$W(r; l) = \frac{1}{2(l+1)} - \frac{l+1}{r}. \quad (5.27)$$

Com este superpotencial, o Hamiltoniano (5.26) é fatorizado, equação (5.7), fornecendo:

$$H^+ = A^+ A^- = -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{4(l+1)^2} = H - E_0^{(l)}. \quad (5.28)$$

A fim de verificar se esse potencial é *shape invariant*, obtemos o companheiro supersimétrico do Hamiltoniano H^+ , equação (5.28), usando a definição de H^- indicada na equação (5.8).

Desse modo, temos:

$$H^- = -\frac{d^2}{dr^2} + W^2(r; l) + \frac{d}{dr} W(r; l) =$$

$$H^- = -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} + \frac{1}{4(l+1)^2}. \quad (5.29)$$

Portanto, obtemos:

$$V^+(r) = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{4(l+1)^2} \quad (5.30)$$

e

$$V^-(r) = -\frac{1}{r} + \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} + \frac{1}{4(l+1)^2}. \quad (5.31)$$

Comparando a estrutura dos potenciais dos companheiros supersimétricos, equações (5.30) e (5.31), podemos identificar o número quântico l como sendo o

parâmetro da *shap invariance*. Seguindo essa linha, introduzimos a notação $a_0 = l_0$.

Assim, a condição de invariância da forma, equação (5.9), para a equação radial usando o potencial coulombiano fornece:

$$R(l_1) = V^-(r; l_0) - V^+(r; l_1) =$$

$$R(l_1) = \frac{(l_0+1)(l_0+2)}{r^2} + \frac{1}{4(l_0+1)^2} - \frac{l_1(l_1+1)}{r^2} - \frac{1}{4(l_1+1)^2}. \quad (5.32)$$

Para que $R(l_1)$ seja independente da coordenada r , a equação (5.32) fornece $l_1 = l_0+1$ e o resíduo $R(l_1)$ acima é reescrito como:

$$R(l_1) = \frac{1}{4(l_0+1)^2} - \frac{1}{4(l_1+1)^2}. \quad (5.33)$$

Outra possibilidade seria fazer $l_1 = -l_0 - 1$, mas essa condição leva a uma autofunção não normalizável e deve ser descartada. Desta forma, usando a relação $l_1 = l_0 + 1$ e equação (5.10), com $k = 1$, obtemos o valor do parâmetro de translação $\eta = 1$.

A expressão do resíduo, equação (5.33), pode ser generalizada para k translações. Usando a equação (5.10) com $\eta = 1$ obtemos $l_k = l_0 + k$. O resíduo, neste caso, é escrito:

$$R(l_k) = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{(l_{k-1}+1)^2} - \frac{1}{(l_k+1)^2} \right] = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{(l_0+k)^2} - \frac{1}{(l_0+k+1)^2} \right]. \quad (5.34)$$

Os autovalores de energia são encontrados usando a equação (5.16).

Lembrando que a energia do estado fundamental $E_0^{(l)}$ é dado pelo termo constante na definição do primeiro Hamiltoniano, companheiro supersimétrico, equação (5.28), o que conduz a:

$$E_0^{(l)} = -\frac{1}{4(l+1)^2}. \quad (5.35)$$

Na sequência, podemos encontrar os níveis de energia substituindo na equação (5.16) as equações (5.34) e (5.35):

$$E_n^{(l)} = E_0^{(l)} + \sum_{k=1}^n R(l_k) = - \frac{1}{4(l+n+1)^2}, \quad (5.36)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$

Para chegar a esse resultado, basta abrir a somatória e observar que todos os termos se cancelam, exceto o primeiro e o último, como mostrado no Apêndice B.5, o que conduz ao resultado mostrado na equação (5.36).

Em seguida obtemos os operadores-escada generalizados de acordo com as equações (5.11) e (5.12). Para o problema radial do potencial de coulomb que são:

$$B^+(l) = \left[-\frac{d}{dr} + \frac{1}{2(l+1)} - \frac{(l+1)}{r} \right] \exp\left(\frac{\partial}{\partial l}\right) \quad (5.37)$$

e

$$B^-(l) = \exp\left(-\frac{\partial}{\partial l}\right) \left[\frac{d}{dr} + \frac{1}{2(l+1)} - \frac{(l+1)}{r} \right]. \quad (5.38)$$

As autofunções dos níveis de mais baixa energia para cada valor de l são obtidas aplicando-se o operador destruição (5.38) como indicado na relação (5.13) ou, da mesma forma substituindo-se o superpotencial (5.27) na relação (5.14), o que fornece:

$$\psi_0^{(l)}(r) \propto r^{l+1} e^{-\frac{r}{2(l+1)}}. \quad (5.39)$$

As outras autofunções, para $n \geq 1$, são calculadas pela ação do operador de criação (5.37) aplicado na autofunção dada pela equação (5.39). Por exemplo, para $n = 1$ obtemos as seguintes autofunções:

$$\psi_1^{(l)}(r) \propto B^+(l)\psi_0^{(l)}(r) = \left\{ \left[\frac{1}{l+2} + \frac{1}{l+1} \right] r - 2l - 3 \right\} r^{l+1} e^{-\frac{r}{2(l+2)}}. \quad (5.40)$$

A expressão exibida na equação (5.40) é a mesma encontrada usando o método de Frobenius [9-17] para $n = 1$ e l podendo variar para qualquer número inteiro maior ou igual a 1.

De forma geral, os resultados obtidos aqui, autovalores e autofunções para a parte radial da equação de Schrödinger, são os mesmos obtidos por outros métodos [12-15]. Vale salientar que no problema coulombiano, o número quântico principal normalmente utilizado para descrever um estado quântico é $N = n + l + 1$.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

Para o problema do duplo potencial simétrico, a diferença entre o primeiro e o segundo níveis de energia é apresentada. A quantidade ΔE geralmente é pequena e difícil de calcular numericamente, especialmente quando a barreira interna é grande, isto é, quando há grande extensão da região clássica entre os dois mínimos.

Admite-se que o estado fundamental de energia para um único poço (E_0) seja menor do que a energia máxima das barreiras (V_0), $E_0 \ll V_0$. Nem sempre é uma única partícula e uma barreira bem definida que estão envolvidas, já que a barreira pode ser simplesmente um arranjo de todo um conjunto de átomos e moléculas cuja energia potencial é maior que a energia total disponível no sistema. O fenômeno do tunelamento é caracterizado pela probabilidade não nula de que uma partícula (ou de que um conjunto de partículas), com uma certa massa e energia, atravesse uma região, proibida classicamente, de uma barreira de potencial.

Apresentamos diferentes métodos de resolução da Equação de Schrödinger Independente do tempo para obter a diferença entre o primeiro e segundo níveis de energia aplicado ao poço duplo quadrado unidimensional simétrico. Essa diferença é determinada por soluções analíticas da equação de Schrödinger e por métodos aproximativos, WKB e variacional. Para grandes distâncias entre os poços, observamos que os resultados aproximados convergem para os analíticos, no referido potencial estudado.

A melhor solução é sempre a exata, no entanto, existem apenas alguns potenciais (duplos ou simples) que permitem uma solução exata para a equação de Schrödinger. É uma forte restrição usar métodos para que essas soluções sejam necessárias. Por outro lado, a aproximação WKB sempre pode ser usada para o potencial de duplo poço.

No capítulo 5, foi introduzido o conceito de supersimetria em Mecânica Quântica e como este pode ser útil para resolver a equação de Schrödinger. Sobre este tema, há uma série de aplicações que remontam desde a resolução analítica dessa equação, quando possível, até o aperfeiçoamento de métodos aproximativos

das soluções. Este tratamento permite muitas vantagens no que concerne à interpretação física dos resultados e elegância do formalismo.

Obtemos as autofunções e autovalores da equação de Schrödinger radial para o potencial coulombiano.

A abordagem adotada envolve a identificação de operadores de criação e destruição usando o formalismo da supersimetria em mecânica quântica e a propriedade de shape invariance. Os autovalores podem ser comparados com aqueles obtidos por outros métodos. Além disso, autofunções também podem ser diretamente comparadas; para tanto deve-se observar que, para cada valor de l , tem-se toda uma superfamília [3].

Portanto, o objetivo deste trabalho foi alcançado, sendo apresentado diferentes métodos de resolução da equação de Schrödinger Independente do tempo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Eisberg, R. e Resnick, R., Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas, Rio de Janeiro, Editora Campus (1979).
- [2] Cohen- Tannoudji C, Diu B and Laloë F 1977 Quantum Mechanics (Canada: John Wiley & Sons).
- [3] E. Drigo Filho, Supersimetria Aplicada à Mecânica Quântica: Estudo da Equação de Schrödinger (Editora UNESP, São Paulo, 2009).
- [4] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, Phys. Rep. **251**, 267 (1995).
- [5] Dennison D M and Uhlenbeck G E 1932 Phys. Rev. **41** 313.
- [6] Somorjai R L and Hornig D F 1962 J. Chem. Phys. **36** 1980; Flanigan M C and De La Veja J R 1974 J Chem. Phys. **61** 1882.
- [7] Devault D 1984 Quantum-Mechanical tunneling in biological systems (New York: Cambridge University Press).
- [8] Harmony M D 1971 Chem. Phys. **10** 337.
- [9] Bell R P 1980 The Tunnel Effect in Chemistry (New York: Great Britain atn the University Press).
- [10] Batista M, Lakner M. and Peternelj J 2004 Eur. J. Phys. **25** 145.
- [11] Landau L and Lifshitz E 1985 Quantum Mechanics (Moscow: Publishing Mir).
- [12] Schiff L I 1968 Quantum Mechanics (Tokyo: McGraw – Hill).
- [13] Greiner W 1994 Quantum Mechanics (Germany: Verlag).
- [14] J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (Addison-Wesley, New York 1994).
- [15] A. S. Davydov and D. ter Haar, Quantum Mechanics: International Series in Natural Philosophy, 2nd ed. (Pergamon, Massachusetts, 1968).

- [16] S. Bittanti, A.J. Laub and J.C. Willems, *The Riccati Equation* (Springer – Verlag, New York, 2012).
- [17] Johnson C S and Pedersen L G 1986 *Quantum Chemistry and Physics* (New York: Dover Publications).
- [18] D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Pearson Prentice Hall, New Jersey, 2004).
- [19] G. Junker, *Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics* (Springer International Publishing, Switzerland, 1996).
- [20] D. DeLaney and M.M. Nieto, *Phys. Lett. B* **247**, 301 (1990).
- [21] J. Bougie, A. Gangopadhyaya, and C. Rasinariu, *J. Phys. A: Math. Theor.* **51**, 375202 (2018).
- [22] J.C.B. de Araujo, G.R. Borges and E. Drigo Filho, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **28**, 41 (2006).
- [23] A. Vega and J. Flores, *Pramana*, **87**, 73 (2016).
- [24] J.O. Rosas-Ortiz, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 10163 (1998).
- [25] R. Dutt, A. Gangopadhyaya and U.P. Sukhatme, *Am. J. Phys.* **65**, 400 (1997).
- [26] D. Bazeia and A. Das, *Phys. Lett. B* **715**, 256 (2012).
- [27] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, *Phys. Rep.* **251**, 267 (1995).
- [28] A. Ganguly and L.M. Nieto, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, 7265 (2007).
- [29] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1997).
- [30] H.O. Batael, J.F. da Silva, A.N. da Silva, S.F.M. dos Santos e E. Drigo Filho, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **40**, e2305 (2018).
- [31] C.V. Sukumar, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18**, 2917 (1985).
- [32] A.B. Balantekin, *Phys. Rev. A* **57**, 4188 (1998).
- [33] E. Drigo Filho and M.A. Cândido, *Physica Scripta* **64**, 548 (2001).

- [34] T. Fukui and N. Aizawa, Phys. Lett. A **180**, 308 (1993).
- [35] M. Boas, Mathematical Methods in the Physical Sciences, 2nd ed. (Wiley, New York, 1983).
- [36] J.M.C. Monteiro, A. Algozini Jr. e E. Drigo Filho, Rev. Bras. Ens. Fís. **41**. n^o.4 (2019).
- [37] E. Drigo Filho and M.R. Ricotta, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 10057 (2004).
- [38] E. Drigo Filho, Rev. Bras. Ens. Fis. **20**, 258 (1990).
- [39] L. Infeld and T.E. Hull, Ver. Mod. Phys. **23**, 21 (1951).

APÊNDICE A

Formalismo da supersimetria na resolução da equação de Schrödinger para uma partícula numa caixa unidimensional.

O formalismo desenvolvido no Apêndice A pode ser aplicado a qualquer potencial quântico que seja *shape invariant*. Um caso mais simples é o oscilador harmônico em que o parâmetro de translação é nulo [37].

Um exemplo mais elaborado do uso do método dos operadores-escada para determinar os resultados da equação de Schrödinger é o sistema de uma partícula confinada numa caixa unidimensional [37], este sistema é bastante explorado em livros introdutórios de Mecânica Quântica [12], e seu potencial é dado por:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x > \frac{\pi}{2} \\ 0, & \text{se } -\frac{\pi}{2} < x < \frac{\pi}{2}, \\ \infty, & \text{se } x < -\frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

do qual, os extremos do poço em $-\frac{\pi}{2}$ e $\frac{\pi}{2}$ foram escolhidos por simplicidade de cálculo, ainda que qualquer valor possa ser utilizado.

Para esse sistema, o Hamiltoniano no interior da caixa é dado por:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad (\text{A.2})$$

em que H é o Hamiltoniano original.

Para a estruturação da hierarquia de Hamiltonianos, é necessária a fatorização do Hamiltoniano original [38]. Deste modo, obtemos o primeiro termo constituinte da hierarquia,

$$H_0 = H - E_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0(x), \quad (\text{A.3})$$

sendo E_0 o autovalor do estado fundamental do problema.

Neste caso, o superpotencial obtido de maneira à fatorizar o Hamiltoniano H_0 é conhecido [37,38] e dado por:

$$W(x) = tg(x). \quad (\text{A.4})$$

Com este superpotencial, os operadores bosônicos são

$$A^\pm = \mp \frac{d}{dx} + tg(x). \quad (\text{A.5})$$

A partir das equações (A.4) e (A.5) a fatorização do Hamiltoniano é escrita como:

$$H_0 = H - E_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + tg^2(x) - sec^2(x). \quad (\text{A.6})$$

Substituindo a relação trigonométrica $tg^2(x) - sec^2(x) = -1$ na equação (A.6), concluímos que:

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} - 1, \quad (\text{A.7})$$

o que nos concede o autovalor de energia do estado fundamental do sistema, $E_0 = 1$.

A fim de verificar se o potencial é *shape invariant* obtemos o companheiro supersimétrico de H_0 que é dado por:

$$H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} - V_1(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{\cos^2(x)} - 1. \quad (\text{A.8})$$

Este problema é particularmente interessante, pois em uma primeira investigação, as formas obtidas para os companheiros supersimétricos, H_0 e H_1 , indicam que este potencial não é *shape invariant*, uma vez que $V_0 = -1$ e $V_1 = \frac{2}{\cos^2(x)} - 1$. No entanto, uma análise mais profunda permite identificar uma invariância escondida [37] neste caso.

Construindo a forma geral do superpotencial na hierarquia de hamiltonianos [37,38] obtemos:

$$W_n(x) = n \operatorname{tg}(x), \quad (\text{A.9})$$

em que n é um número natural diferente de zero, ($n = 1, 2, 3, \dots$). A hierarquia fornece o n -ésimo termo da superfamília de potenciais e que $E_n^1 = n^2$,

$$V_n - E_0^{(n)} = \frac{n(n-1)}{\cos^2(x)} - n^2. \quad (\text{A.10})$$

Para comprovar a *shape invariance* oculta neste problema é necessário evidenciar a dependência dos potenciais com os parâmetros dos problemas. Assim, reescrevendo a hierarquia em função de um parâmetro a_0 , adquirimos um caso particular do potencial de Infeld-Hull do tipo E como discutido nas referências [37,39]:

$$W(x, a_0) = a_0 \operatorname{tg}(x). \quad (\text{A.11})$$

A fatorização com o superpotencial da equação (A.11) conduz ao Hamiltoniano:

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} - V_0(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{a_0(a_0-1)}{\cos^2(x)} - a_0^2. \quad (\text{A.12})$$

O companheiro supersimétrico de H_0 , é escrito então:

$$H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} - V_1(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{a_0(a_0+1)}{\cos^2(x)} - a_0^2. \quad (\text{A.13})$$

É importante observar que fazendo $a_0 = 1$ no hamiltoniano da equação (A.12), o hamiltoniano original (expressão (A.7)) é recuperada.

Após a aquisição dos companheiros supersimétricos, o próximo passo é usar a expressão (5.9) para verificar a *shape invariance* do potencial. Nesse caso temos que:

$$R(a_1) = \left[\frac{a_0(a_0+1)}{\cos^2(x)} - a_0^2 \right] - \left[\frac{a_1(a_1-1)}{\cos^2(x)} - a_1^2 \right]. \quad (\text{A.14})$$

Para que $R(a_1)$ seja independente de x , a seguinte relação precisa ser observada,

$$a_1 = a_0 + 1. \quad (\text{A.15})$$

Assim, da relação $a_n = a_0 + \eta n$, obtemos que $\eta = 1$. Deste modo, o resíduo obtido vale:

$$R(a_1) = a_1^2 - a_0^2 = 2a_0 + 1. \quad (\text{A.16})$$

Generalizando o resíduo (expressão (A.16)), estabelecendo $a_k = a_0 + \eta k$, encontramos:

$$\begin{aligned} R(a_k) &= a_k^2 - a_{k-1}^2 = (a_0 + k)^2 - [a_0 + (k-1)]^2 = \\ &= 2a_0 + 2k - 1, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

em que $\eta = 1$. Imediatamente, podemos determinar os níveis de energia usando a expressão $E_n = E_0 + \sum_{i=0}^n R(a_i)$:

$$E_n = E_0 + \sum_{k=1}^n R(a_k) = 1 + \sum_{k=1}^n (2a_0 + 2k - 1) = n^2 + 2a_0 n + 1, \quad (\text{A.18})$$

com $a_0 = 1$ como mostrado anteriormente. Esses autovalores são os mesmos obtidos por outros métodos [3]. Em seguida, obtemos os operadores-escada de acordo como foi apresentado nas equações (5.11) e (5.12):

$$B^+(a_0) = \left[-\frac{d}{dx} + tg(x) \right] \exp\left(\eta \frac{\partial}{\partial a_0}\right) \quad (\text{A.19})$$

e

$$B^-(a_0) = \exp\left(-\eta \frac{\partial}{\partial a_0}\right) \left[\frac{d}{dx} + tg(x) \right], \quad (\text{A.20})$$

as autofunções para este potencial podem ser obtidas usando os operadores das equações (A.19) e (A.20).

Aplicando o operador $B^-(a_0)$ equação (A.20) na função do estado fundamental, obtemos:

$$B^-(a_0)\psi_0(x, a_0) = 0, \quad (\text{A.21})$$

o que possibilita encontrar a autofunção para o estado fundamental de uma partícula confinada em uma caixa unidimensional ($\psi_0(x, a_0)$):

$$\psi_0(x, a_0) = N_0 \exp\left[-\int_x a_0 \operatorname{tg}(\bar{x}) d\bar{x}\right] = N_0 \cos^{a_0}(x), \quad (\text{A.22})$$

sendo N_0 a constante de normalização.

Para o caso em que $a_0 = 1$, temos:

$$\psi_0(x) = N_0 \cos(x). \quad (\text{A.23})$$

Para o primeiro estado excitado e $a_0 = 1$, a seguinte autofunção é obtida:

$$\psi_1(x) = N_1 \cos(2x), \quad (\text{A.24})$$

sendo N_1 a constante de normalização para este estado.

Finalmente, utilizando as equações (5.15), (A.19) e (A.22) obtém-se a função de onda para o n -ésimo estado excitado:

$$\psi_n(x, a_0) \propto \left[\left(-\frac{d}{dx} + \operatorname{tg}(x) \right) \exp\left(\eta \frac{\partial}{\partial a_0} \right) \right]^n \cos^{a_0} \Big|_{a_0=1}, \quad (\text{A.25})$$

e os autovalores de energia são dados pela equação (A.18),

$$E_n = n^2 + (2a_0n + 1) \Big|_{a_0=1}. \quad (\text{A.26})$$

APÊNDICE B

Gráficos das equações transcendentais (2.31) e (2.51b) em função da energia e desenvolvimento das equações (2.50), (5.24) e (5.36)

Neste apêndice, são apresentadas as soluções gráficas das equações transcendentais (2.31) e (2.51b), buscando o ponto de intersecção para obtenção do valor de E . Também são desenvolvidas algebricamente algumas equações citadas anteriormente no texto.

B.1 Considerações sobre $\hbar^2 = 2m = a = V_0 = 1$ e $b = 2$, com a qual o seguinte gráfico referente a equação (2.31)

$$f(E) := (\sqrt{E}) \cdot \cot(\sqrt{E})$$

$$h(E) := (\sqrt{E-1}) \cot\left(\frac{\sqrt{E-1}}{2}\right)$$

$$f(38.4\theta) = -75.857$$

$$h(38.4\theta) = -75.057$$

$$E := 30, 30.2, \dots, 39.2$$

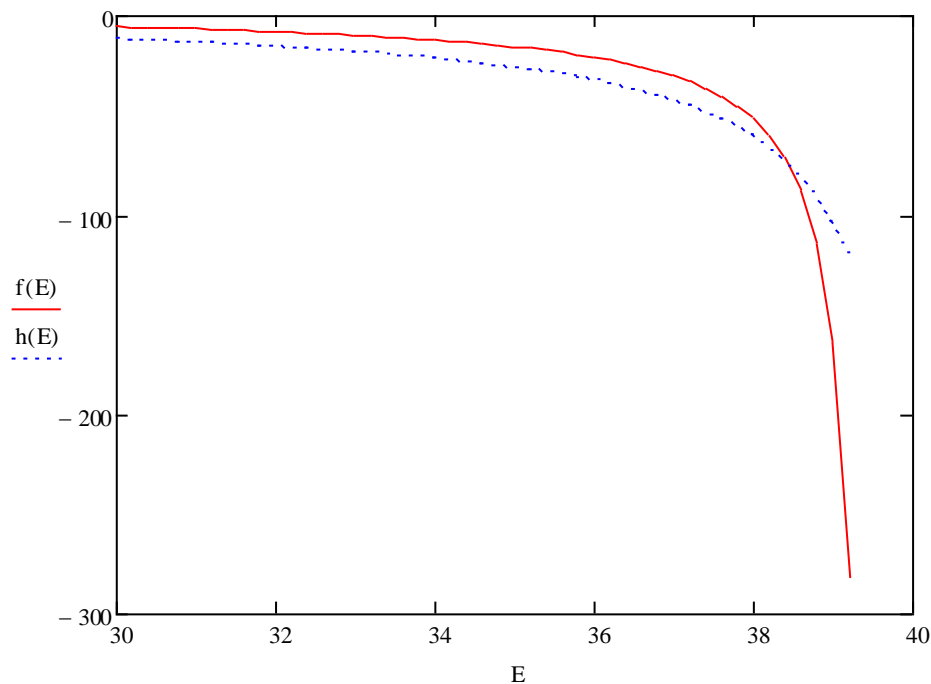


Gráfico 1 – Equação transcendental (2.31) em função da energia

B.2 Desenvolvimento algébrico da equação (2.50)

Sabendo que, $\tanh(x) = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}}$ e $\coth(x) = \frac{1 + e^{-2x}}{1 - e^{-2x}}$, temos:

$$\text{I) } \beta + K \cot(Ka) = [\beta - K \cot(Ka)] e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}}$$

$$\beta - \beta e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}} = -K \cot(Ka) - K \cot(Ka) e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}}$$

$$\frac{-\beta \left[1 - e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}} \right]}{\left[1 + e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}} \right]} = K \cot(Ka)$$

$$K \cot(Ka) = -\beta \tanh \frac{\beta(b-a)}{2} \quad (2.51a)$$

$$\text{II) } \beta + K \cot(Ka) = -[\beta - K \cot(Ka)] e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}}$$

$$\beta \left[1 + e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}} \right] = -K \cot(Ka) \left[1 - e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}} \right]$$

$$\frac{-\beta \left[1 + e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}} \right]}{\left[1 - e^{-2\beta \frac{(b-a)}{2}} \right]} = K \cot(Ka)$$

$$K \cot(Ka) = -\beta \coth \frac{\beta(b-a)}{2} \quad (2.51b)$$

B.3 Gráficos referente à equação (2.51b), adotando $\hbar^2 = 2m = a = V_0 = 1$ e $b = 2$.

$$f(E) := (E)^{0.5} \cdot \cot(E)$$

$$h(E) := -(1 - E)^{0.5} \cdot \coth\left[\left(\frac{1}{2}\right) \cdot (1 - E)^{0.5}\right]$$

$$E := 2.1, 2.11, 2.7$$

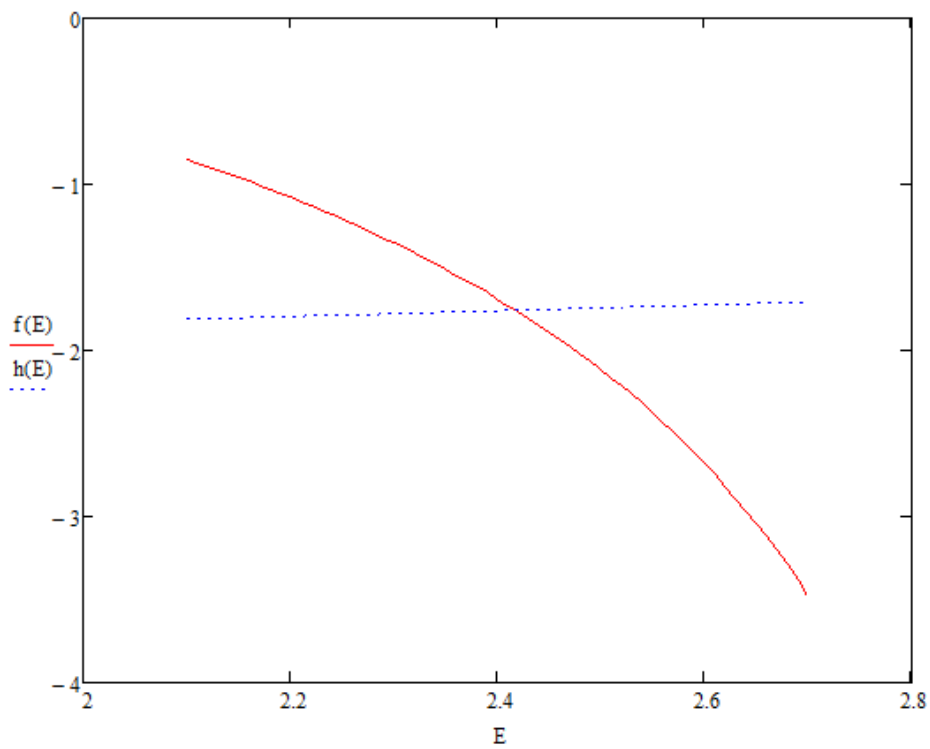


Gráfico 2 – Equação transcendental (2.51b) em função da energia

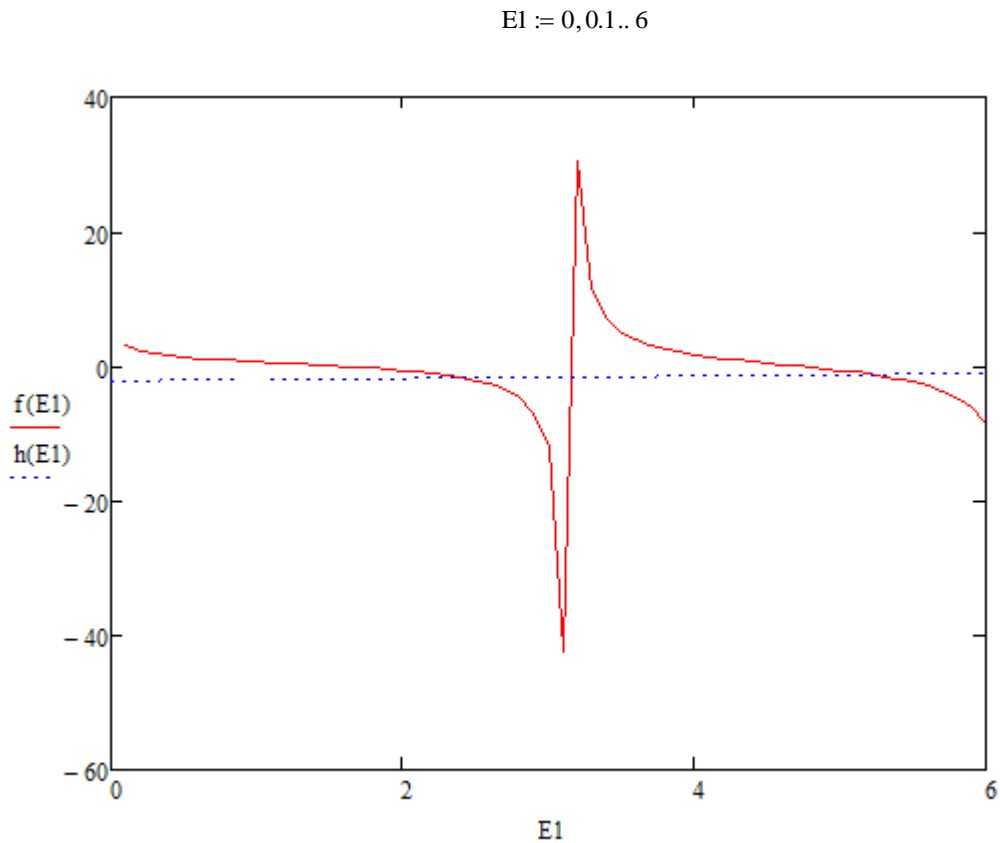


Gráfico 3 – Equação transcendental (2.51b) em função de $E_1 = 0, 0.1 \dots 6$

B.4 Desdobramento da equação (5.24) à equação (5.25)

Com $R = \frac{f}{r}$ e realizando alguns cálculos, consegue-se:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R + V(r)R = ER$$

$$\frac{d}{dr} R = \frac{d}{dr} \frac{f}{r} = \frac{f'}{r} - \frac{f}{r^2}$$

$$r^2 \frac{dR}{dr} = r^2 \left(\frac{f'}{r} - \frac{f}{r^2} \right) = f'r - f$$

$$\frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR}{dr} \right] = f''r + f' - f' = r f''$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR}{dr} \right] = \frac{f''}{r}$$

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} f + V(r) \frac{f}{r} = E \frac{f}{r}$$

$$\frac{d^2}{dr^2} f + V(r) f = E f$$

em que o potencial $V(r)$ é dado por:

$$V(r) = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}$$

B.5 Resolução da equação (5.36)

$$E_n^{(l)} = E_0^{(l)} + \sum_{k=1}^n R(l_k)$$

$$E_n^{(l)} = -\frac{1}{4(l+1)^2} + \frac{1}{4} \left\{ \left[\frac{1}{(l+1)^2} + \frac{1}{(l+2)^2} + \frac{1}{(l+3)^2} + \frac{1}{(l+4)^2} + \dots + \frac{1}{(l+n-2)^2} + \frac{1}{(l+n-1)^2} + \frac{1}{(l+n)^2} \right] - \left[\frac{1}{(l+2)^2} + \frac{1}{(l+3)^2} + \frac{1}{(l+4)^2} + \dots + \frac{1}{(l+n-3+1)^2} + \frac{1}{(l+n-2+1)^2} + \frac{1}{(l+n-1+1)^2} + \frac{1}{(l+n+1)^2} \right] \right\}$$

$$E_n^{(l)} = -\frac{1}{4(l+n+1)^2}$$