

UNESP

Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá

Guaratinguetá
2002



1110000528



*"Espectro Analítico
Aproximado para Sistemas
Sob Condições de Contorno
Não - Triviais"*

VANESSA GAYEAN DE CASTRO SALVADOR DOS SANTOS

182





**ESPECTRO ANALÍTICO APROXIMADO
PARA SISTEMAS SOB CONDIÇÕES DE
CONTORNO NÃO-TRIVIAIS**

**CARGO LEITOR NÃO
RISQUE O LIVRO**

VANESSA GAYEAN DE CASTRO SALVADOR DOS SANTOS

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia
de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista,
para a obtenção do título de Mestre em Física.

**FACULDADE DE ENGENHARIA
DE GUARATINGUETÁ
BIBLIOTECA**

Orientador: Prof. Dr. Alvaro de Souza Dutra

UNESP - Campus de Guaratinguetá

Setembro de 2002

528

528

Data: 24/7/03
Valor: R\$20,00
C/D/T: D

ESPECTRO ANALÍTICO APROXIMADO
PARA SISTEMAS SOB CONDIÇÕES DE
CONTORNO NÃO-TRIVIAIS

CASO LEVITON NÃO
ENQUILTO O LUGAR

VANESSA GAYEAN DE CASTRO SALVADOR DOS SANTOS

Investigação apresentada à Faculdade de Engenharia
de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista,
para a obtenção do título de Mestre em Física.

dos Santos, Vanessa Gayean de Castro Salvador
S237e Espectro analítico aproximado para sistemas sob condições não triviais
/ Vanessa Gayean de Castro Salvador dos Santos . – Guaratinguetá : [s.n.],
2002
97f.: il.

Bibliografia: f. 94-97
Inclui apêndice
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de
Engenharia de Guaratinguetá, 2002
Orientador: Prof. Dr. Alvaro de Souza Dutra

1. Mecânica Quântica I. Título

CDU 543.42

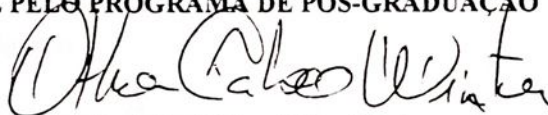
**“ESPECTRO ANALÍTICO APROXIMADO PARA SISTEMAS
SOB CONDIÇÕES DE CONTORNO NÃO-TRIVIAIS”**

VANESSA GAYEAN DE CASTRO SALVADOR DOS SANTOS

**ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
“MESTRE EM FÍSICA”**

ESPECIALIDADE: FÍSICA

APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO



Prof. Dr. Othon Cabo Winter
Coordenador

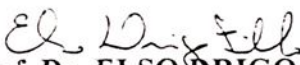
BANCA EXAMINADORA:



Prof. Dr. ÁLVARO DE SOUZA DUTRA
Orientador / UNESP-FEG



Prof. Dr. CARLOS FARINA DE SOUZA
UFRJ



Prof. Dr. ELSON DRIGO FILHO
UNESP-IBILCE

Setembro de 2002

DADOS CURRICULARES

VANESSA GAYEAN DE CASTRO SALVADOR DOS SANTOS

NASCIMENTO 21.11.1975 - GUARATINGUETÁ /SP

FILIAÇÃO Antonio Carlos de Castro
Nancy Aparecida Gayean de Castro

1995/1999 Curso de Graduação
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá - UNESP

2000/2002 Curso de Pós Graduação em Física, nível de Mestrado,
/ na Universidade Estadual Paulista.



*À minha mãe, a Esequiel e
Elias razões da minha vida.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus que me deu a oportunidade e a alegria de compartilhar com meus amigos o nascimento de meu filho e a conclusão deste trabalho.

Um agradecimento especial ao meu orientador Alvaro por todo apoio, compreensão, amizade e orientação.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

Aos professores do grupo de Física de Partículas e Campus, desta instituição e aos colegas da Pós-Graduação .



“Esse trabalho contou com o apoio financeiro da FAPESP (processo número 99/11936-8)”



“Até aqui Deus tem me ajudado” (Atos 16-31)

Índice

Lista de Figuras	10
Lista de Tabelas	11
Resumo	12
Abstract	13
1 INTRODUÇÃO	14
2 Partícula livre no poço de potencial	17
2.1 Partícula livre no poço de potencial infinito unidimensional . . .	17
2.2 Partícula livre no poço de potencial quadrado	21
3 Aproximação analítica para o oscilador harmônico em uma caixa	29
3.1 O potencial do oscilador harmônico simples	29
3.2 Oscilador harmônico em uma caixa	31
4 Potenciais esfericamente simétricos	40
4.1 Separação de variáveis em coordenadas esféricas	40
4.2 Partícula no poço quadrado tridimensional	45
4.3 Estudo do espectro analítico para o potencial de Coulomb confi- nado em uma esfera	50
4.4 Partícula carregada na presença de um campo magnético homogê- neo sob condições de contorno não triviais	59



4.4.1	Partícula carregada na presença de um campo magnético uniforme no calibre de Landau	60
-------	--	----

5 Susceptibilidade magnética 72

5.1	Susceptibilidade magnética com condições de contorno triviais . .	72
5.2	Susceptibilidade magnética com condições de contorno finitas . . .	76

6 CONCLUSÃO 78

A Bandas de Energia 80

A.1	Modelo do elétron quase livre	81
A.2	Origem das bandas de energia	83
A.3	Magnitude das bandas de energia	84
A.4	Funções de Bloch	85
A.5	Modelo de Kronig-Penney	86
A.6	Modelo Kronig-Penney no espaço recíproco periódico . . .	89

Bibliografia 93



Listas de Figuras

2.1 Partícula livre no poço de potencial infinito unidimensional	18
2.2 Comportamento da diferença percentual versus o potencial	28
2.3 Dependência da energia para o estado fundamental	28
3.1 Gráfico da função de onda para $n_f = 0$	32
3.2 Gráfico da função de onda para $n_f = 1$	33
3.3 Gráfico da função de onda para $n_f = 2$ e $n = 1$	33
3.4 Gráfico da função de onda para $n_f = 3$ e $n = 2$	33
3.5 Gráfico da função de onda para $n_f = 4$ e $n = 3$	33
3.6 Gráfico da função de onda para $n_f = 5$ e $n = 4$	34
3.7 Gráfico da energia versus a frequência para o oscilador harmônico na caixa	34
3.8 Gráfico do comportamento esperado da função g contra a frequência	37
3.9 Gráfico da diferença percentual versus a frequência para o oscilador harmônico na caixa	39
4.1 Poço de potencial finito em coordenadas esféricas	46
4.2 Gráfico típico da dependência da energia em g	54
4.3 Gráfico da diferença percentual contra g para o potencial de Coulomb	55
4.4 Esquema pictórico do espaçamento dos níveis e da degenerescência	58
A.1 Poço de potencial quadrado periódico	86
A.2 Exemplo típico do aparecimento das bandas de energia na equação de banda	88
A.3 Gráfico da energia, com o aparecimento das bandas de energia	89

Lista de Tabelas

3.1	Tabela dos autovalores do potencial do oscilador harmônico . . .	31
3.2	Tabela das raízes do oscilador harmonico e seus erros percentuais	38
4.1	Tabela dos coeficientes do potencial de Coulomblabeltabela 3 . . .	53
4.2	Tabela do parâmetro g e erros percentuais do potencial de Coulomb	54

dos Santos, V. G. C. S. *Espectro Analítico Aproximado para Sistemas sob Condições de Contorno Não-Triviais*. Guaratinguetá, 2002, 97 p. Dissertação (Mestrado em Física) – Faculdade de Engenharia, Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista.

RESUMO

Nesta dissertação estudamos sistemas quânticos não-relativísticos, sujeitos a condições de contorno não-triviais, ou seja, problemas em que as funções de onda se anulam em um ponto finito do espaço ou estão sujeitas a determinados vínculos. Particularmente deveremos tratar sistemas sujeitos a interações eletromagnéticas, a fim de buscar subsídios para melhor entender o mecanismo de simetrias de calibre sob tais condições.

PALAVRAS CHAVE: Espectro, condições de contorno, interações eletromagnéticas, simetrias, calibre.



dos Santos, V. G. C. S. *Approximate Analytical Spectrum for Systems under of Non-Trivial Boundary Conditions*. Guaratinguetá, 2002, 97 p. Dissertação (Mestrado em Física) – Faculdade de Engenharia, Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista.

ABSTRACT

In this dissertation we studied non-relativistic quantum systems, subjects to non-trivial boundary conditions, problems in that the wave functions are annulled in a finite point of the space or they are subject to certain bonds. Particularly we treated of systems subject to electromagnetic interactions, in order to look for subsidies for best to understand the mechanism of gauge symmetries under such conditions.

KEYWORDS: spectrum, boundary conditions, electromagnetic interactions, symmetries, gauge.



Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Nesta dissertação estudamos sistemas quânticos não relativísticos, sujeitos a condições de contorno finitas, os quais tem sido pouco discutidos na literatura.

Sistemas quânticos sob condições de contorno não-triviais, correspondem a sistemas que incluem barreiras penetráveis ou impenetráveis, cuja presença pode simular o efeito de átomos ou moléculas vizinhas sobre uma dada partícula a um dado sistema atômico em consideração. A dependência dos autovalores em relação ao tamanho da caixa permite definir o efeito da pressão sobre o sistema, ou seja, como a energia depende do tamanho da caixa, assim se pressionarmos ou traçarmos a caixa, a energia muda. Alguns exemplos seriam o da transformação próton-déuteron como fonte de energia em estrelas densas [1], a determinação da taxa de escape de aglomerados galácticos e globulares [2], e o entendimento do deslocamento de linhas espectrais sob pressão [3]. Uma lista de fenômenos associados a este tipo de sistema físico é apresentada em [4]. Recentemente, a fabricação de “quantum dots” na física de semicondutores renovou o interesse neste tipo de problema [5],[6]. Um outro exemplo de aplicação de tal tipo de sistema é o efeito Casimir que ocorre quando colocamos duas placas metálicas descarregadas no vácuo e elas se atraem [7]. Em 1948 Casimir [8] calculou a troca de um ponto de energia nula na presença de duas placas conduzindo, cada placa permanece a uma pequena distância da outra de forma que o efeito da extremidade possa ser desprezado, ou ainda, a energia de Casimir para um campo escalar massivo

confinado entre duas placas paralelas com condições de contorno de Dirichlet [9].

Estes sistemas são tratados pela imposição da evanescência da função de onda em um ponto finito, uma vez que a partícula está confinada em uma região finita do espaço, ou mesmo pela imposição de alguma condição sobre a função de onda, de modo que teremos como solução geral um polinômio vezes uma exponencial onde esse polinômio tem grau infinito; o qual normalmente é tomado como finito no caso de condições de contorno triviais (no infinito).

Neste caso porém a exponencial não garante que a função de onda se anule no contorno, o que implica na imposição que o polinômio se anule nas paredes da caixa. Desta condição vem a equação para a obtenção do espectro.

Em nosso procedimento insistimos, na utilização de polinômios finitos (polinômios ortogonais), de modo que a energia já tenha uma dependência conhecida com os parâmetros do potencial. Assim a equação vinda da imposição de que a função de onda se anule na fronteira, acaba implicando em uma restrição sobre os valores dos parâmetros do potencial, desta forma o procedimento utilizado nos leva a um método que se assemelha ao utilizado no caso dos chamados potenciais quase-exatamente solúveis.

Em seguida substituímos estes parâmetros na expressão da energia, a fim de obter a energia exata para o valor particular do parâmetro do potencial encontrado.

Finalmente procuramos determinar uma expressão analítica aproximada para a energia em função dos parâmetros do potencial, ajustando os dados obtidos pelo método descrito acima.

Neste processo procuramos, na medida do possível, garantir os limites físicos adequados para cada caso.

Por outro lado, um tratamento numérico deste problema tem a desvantagem de dificultar a análise qualitativa e a realização de estimativas, devido à necessidade de calcular a energia para cada novo valor do parâmetro do potencial. Na literatura vemos outros exemplos onde as condições de contorno levam a soluções diferentes para uma mesma equação diferencial [10], [11], [12] e outros. Outra possibilidade de estudar estes sistemas é aplicar a teoria de perturbação

de Rayleigh-Schroedinger [13], [14], métodos perturbativos [15], [16] ou alguma aproximação de semiclássica [17]. Recentemente era aplicado a aproximação de expansão de acoplamento para este tipo de problema [18], e considerava-se o caso da pressão mostrado por uma pilha de membranas ao incluir paredes [19], [20], foi tratado o caso de uma única membrana particularmente [21], [22].

Estudamos inicialmente o caso da partícula livre no poço de potencial finito e infinito. No caso específico do poço finito não nos aprofundamos muito, pois demos preferência aos outros casos de confinamento desta dissertação.

Estudamos também o caso de partículas carregadas em campos eletromagnéticos em regiões confinadas, a fim de tentar entender o mecanismo de liberdade de calibre sob tais condições. Em particular é fácil demonstrar que uma partícula carregada em um campo magnético homogêneo pode ser mapeada, dependendo do calibre escolhido, em um problema de partícula livre em uma direção e oscilador harmônico na outra, ou mesmo em um oscilador bidimensional.

Vimos, também que no problema de partículas carregadas sob o efeito de campos magnéticos homogêneos, sob condições de contorno de não-triviais, uma dependência do calibre é observada e também a necessidade da procura por novas soluções que dependem de cada novo tipo de condição de contorno. Vimos então que existe uma relação destas soluções com o tipo de operador escolhido para formar uma base comum com a Hamiltoniana.



Capítulo 2

Partícula livre no poço de potencial

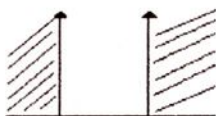
2.1 Partícula livre no poço de potencial infinito unidimensional

Vamos estudar esse problema bastante discutido na literatura [11], [12], [23], porque iremos utilizá-lo no caso do oscilador harmônico no poço de potencial finito e unidimensional, pois como veremos em capítulos posteriores um dos limites do oscilador harmônico é a partícula livre no poço de potencial infinito e também começamos por este problema porque esse é o caso mais simples onde a partícula está confinada em uma região finita e o espectro de energia é discreto e não contínuo como na mecânica clássica.

O poço de potencial infinito é escrito como

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } |x| > a/2 \\ 0 & \text{se } |x| < a/2 \end{cases} \quad (2.1)$$

Ele tem a característica de ser capaz de confinar uma partícula de forma que esta tenha apenas certos valores da energia total finita $E \geq 0$. Na mecânica clássica, qualquer energia é possível, mas na mecânica quântica apenas certos autovalores discretos E_n são possíveis. Ele está ilustrado na figura a seguir:



partícula livre no poço de potencial infinito unidimensional

Na região dentro do poço, a solução geral da equação de Schroedinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V_0 \Psi(x) = E \Psi(x)$$

pode ser escrita como a onda estacionária:

$$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (2.2)$$

onde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Deve-se impor que $\Psi(x)$ tenha valor zero nas regiões fora do poço, o que implica que a densidade de probabilidade tem que ser zero nestas regiões, pois a partícula está necessariamente confinada ao poço de potencial por suas paredes infinitamente altas. Em particular, nos limites do poço

$$\Psi(x_{contorno}) = 0. \quad (2.3)$$

Aplicando a condição de contorno acima em $x = +a/2$, temos

$$A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0, \quad (2.4)$$

e em $x = -a/2$, obtém-se:

$$-A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0. \quad (2.5)$$

Somando as equações (2.4) e (2.5), obtemos

$$2B \cos \frac{ka}{2} = 0. \quad (2.6)$$

Subtraindo-as, temos

$$2A \sin \frac{ka}{2} = 0. \quad (2.7)$$

Tanto (2.6) quanto (2.7) devem ser satisfeitas. Neste caso $\Psi(x)$ e $d\Psi(x)/dx$ serão finitas e unívocas em todos os pontos e $\Psi(x)$ será contínua em todos os pontos e $d\Psi(x)/dx$ será descontínua em $x = \pm a/2$.

Não há nenhum valor do parâmetro k que faça $\cos(ka/2)$ e $\sin(ka/2)$ simultaneamente nulos. E certamente não queremos satisfazer as duas equações colocando tanto A quanto B iguais a zero, pois neste caso $\Psi(x) = 0$ em todos os pontos e a autofunção não nos interessaria, pois a partícula associada não estaria na caixa. No entanto, podemos satisfazer a essas equações escolhendo k de tal forma que $\cos(ka/2)$ seja zero e fazendo A igual a zero, ou escolhendo k de tal forma que $\sin(ka/2)$ seja zero e fazendo B igual a zero. Isto é, tomamos

$$A = 0 \quad \cos(ka/2) = 0 \quad (2.8)$$

ou

$$B = 0 \quad \sin(ka/2) = 0 \quad (2.9)$$

Portanto há dois tipos de solução com paridades definidas. Para o primeiro tipo,

$$\Psi_n = B_n \cos(k_n x), \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (2.10)$$

e para o segundo tipo,

$$\Psi_n = A_n \sin(k_n x), \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.11)$$

onde $k_n = n\pi/a$, como consequência da imposição de que $\Psi(\pm a/2) = 0$.

Utilizando a relação $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ de (2.2) e a expressão $k_n = n\pi/a$ de (2.10) e (2.11) para os valores possíveis de n , obtemos

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad (2.12)$$

$n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$

Concluimos então que apenas certos valores discretos da energia total E_n são possíveis. A energia total de uma partícula livre em uma caixa é então quantizada [11].

Normalização da função de onda

Para normalizar uma função de onda, tendo que

$$\Psi(x, t) = A\varphi(x); \quad (2.13)$$

e

$$\int_{-a/2}^{+a/2} \Psi^* \Psi dx = |A|^2 \int_{-a/2}^{+a/2} \varphi^* \varphi dx = 1 \quad (2.14)$$

então obtemos o valor de A para que a integral acima seja igual a um. Esse processo é chamado de *normalização* de uma função de onda. Vimos que há dois tipos de solução (2.10) e (2.11) para a partícula livre na caixa infinita unidimensional. Para normalizá-las temos que encontrar os valores de A_n e B_n .

A diferença essencial entre os dois tipos de autofunções do tipo onda estacionária especificadas por (2.10) e (2.11). As autofunções que tem nenhum ou somente um número par de nós são funções pares de x , isto é,

$$\Psi(-x) = +\Psi(x) \quad (2.15)$$

Já as autofunções que tem um número ímpar de nós são funções ímpares de x ; isto é

$$\Psi(-x) = -\Psi(x) \quad (2.16)$$

As autofunções têm paridade definida, ou positiva ou negativa, porque escolhemos a origem do eixo x de tal forma que o poço de potencial simétrico $V(x)$ é uma função par de x . Observe que se redefinirmos a origem do eixo x como sendo, digamos, o ponto $x = -a/2$, as autofunções não terão mais paridade definida.

Estes resultados são obtidos para a partícula livre no poço de potencial infinito, e para qualquer outro potencial simétrico, já que grandezas mensuráveis que descrevem o movimento de uma partícula em estados *ligados* de tais potenciais também devem ser simétricos em torno do ponto de simetria do potencial (caso o mesmo seja simétrico).

2.2 Partícula livre no poço de potencial quadrado

Nós estudamos este problema porque ele é o exemplo mais simples da aplicação do método utilizado na nossa tese.

Desenvolvemos aqui a solução analítica geral para a equação de Schroedinger independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V_0\Psi(x) = E\Psi(x)$$

para os estados ligados de um poço de potencial quadrado de profundidade finita. O poço de potencial quadrado finito é escrito como

$$V = \begin{cases} V_0, & \text{se } |x| > a/2 \\ 0, & \text{se } |x| < a/2 \end{cases} \quad (2.17)$$

Sendo $V_0 > 0$, a descrição do movimento clássico de uma partícula em um estado ligado em um poço quadrado sugere que seria mais apropriado procurar soluções para a equação de Schroedinger na forma de ondas estacionárias.



Assim consideramos como uma solução geral para a equação de Schroedinger independente do tempo na região onde $V(x) = 0$, a autofunção [11]:

$$\Psi(x) = A \sin k_I x + B \cos k_I x \quad (2.18)$$

onde $k_I = \sqrt{2mE}/\hbar$ para $|x| < +a/2$.

Nas regiões $|x| < +a/2$ a equação de Schroedinger independente do tempo tem as soluções gerais dadas por

$$\Psi(x) = C e^{k_{II}x} + D e^{-k_{II}x} \quad x < -a/2 \quad (2.19)$$

$$\Psi(x) = F e^{k_{II}x} + G e^{-k_{II}x} \quad x > +a/2 \quad (2.20)$$

onde $k_{II} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ com $E < V_0$.

Para determinar as constantes arbitrárias, inicialmente fazemos a exigência de que as autofunções permaneçam finitas para todo x . Consideremos (2.19) no limite $x \rightarrow -\infty$. É evidente que essa exigência obriga que

$$D = 0. \quad (2.21)$$

De forma análoga, é necessário fazer

$$F = 0, \quad (2.22)$$

para que (2.20) se mantenha finita no limite $x \rightarrow +\infty$. Fazemos agora a exigência de que as autofunções e suas primeiras derivadas sejam contínuas em $x = -a/2$ e $x = +a/2$. Neste caso são obtidas quatro equações,

$$-A \sin(k_I a/2) + B \cos(k_I a/2) = C e^{-k_{II} a/2}, \quad (2.23)$$

$$Ak_I \cos(k_I a/2) + Bk_I \operatorname{sen}(k_I a/2) = Ck_{II} e^{-k_{II} a/2}, \quad (2.24)$$

$$A \operatorname{sen}(k_I a/2) + B \cos(k_I a/2) = G e^{-k_{II} a/2}, \quad (2.25)$$

$$Ak_I \cos(k_I a/2) - Bk_I \operatorname{sen}(k_I a/2) = -Gk_{II} e^{-k_{II} a/2}. \quad (2.26)$$

Subtraindo (2.23) de (2.25), obtém-se

$$2A \operatorname{sen}(k_I a/2) = (G - C) e^{-k_{II} a/2}. \quad (2.27)$$

Somando (2.23) e (2.25), chega-se a

$$2B \cos(k_I a/2) = (G + C) e^{-k_{II} a/2}. \quad (2.28)$$

Subtraindo (2.26) de (2.24), obtemos

$$2Bk_I \operatorname{sen}(k_I a/2) = (G + C)k_{II} e^{-k_{II} a/2}. \quad (2.29)$$

Finalmente somando (2.24) e (2.26), obtemos

$$2Ak_I \cos(k_I a/2) = -(G - C)k_{II} e^{-k_{II} a/2}. \quad (2.30)$$

Se $B \neq 0$ e $(G + C) \neq 0$, podemos dividir (2.29) por (2.28), e obter

$$k_I \tan(k_I a/2) = k_{II}. \quad (2.31)$$

Já se $A \neq 0$ e $(G - C) \neq 0$, podemos dividir (2.303) por (2.27), obtendo

$$k_I \cot(k_I a/2) = -k_{II}. \quad (2.32)$$

É fácil ver que (2.31) e (2.32) não podem ser satisfeitas simultaneamente. Caso fosse possível, a equação obtida ao somarmos estas duas

$$k_I \tan(k_I a/2) + k_I \cot(k_I a/2) = 0, \quad (2.33)$$

seria válida. Multiplicando esta expressão por $\tan(k_I a/2)$, a equação fica

$$k_I \tan^2(k_I a/2) + k_I = 0, \quad (2.34)$$

Isto porém não pode ser válido, pois tanto k_I quanto $a/2$ são reais. Portanto, é possível apenas satisfazer a (2.31) e não satisfazer a (2.32), ou o contrário. As autofunções do poço de potencial quadrado finito são de dois tipos. Para o primeiro tipo, de paridade par da equação (2.18), tem-se:

$$k_I \tan(k_I a/2) = k_{II}, \quad A = 0, \quad G - C = 0 \quad (2.35)$$

então (2.25) fica sendo dada por

$$B \cos(k_I a/2) = G e^{-k_{II} a/2}, G = B \cos(k_I a/2) e^{k_{II} a/2} = C, \quad (2.36)$$

e as autofunções são

$$\Psi(x) = \left\{ \begin{array}{ll} B \cos(k_I a/2) e^{k_{II} a/2} e^{k_{II} x} & x < -a/2, \\ B \cos(k_I x) & |x| < a/2, \\ B \cos(k_I a/2) e^{k_{II} a/2} e^{-k_{II} x} & x > a/2. \end{array} \right\} \quad (2.37)$$

Para o caso de paridade ímpar da equação (2.18)

$$k_I \cot(k_I a/2) = -k_{II}, \quad B = 0, \quad G + C = 0, \quad (2.38)$$

então (2.25) adquire a forma

$$Asen(k_I a/2) = Ge^{-k_{II} a/2}, \quad G = Asen(k_I a/2) = -C, \quad (2.39)$$

e as autofunções são

$$\Psi(x) = \begin{cases} Asen(k_I a/2) e^{k_{II} a/2} e^{k_{II} x} & x < -a/2 \\ Asen(k_I x) & |x| < a/2 \\ Asen(k_I a/2) e^{k_{II} a/2} e^{-k_{II} x} & x > a/2 \end{cases} \quad (2.40)$$

Poderíamos também normalizar as funções de onda das equações (2.37) e (2.40). Não o faremos aqui por estarmos interessados primordialmente no espectro de energia.

Consideremos a equação de (2.31). Substituindo k_I e k_{II} , e multiplicando tudo por $a/2$, a equação fica

$$\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}} \tan\left(\sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{m(V_0 - E)a^2}{2\hbar^2}} \quad (2.41)$$

Para uma dada partícula de massa m e um dado poço de potencial com profundidade V_0 e largura a , essa equação possui uma única incógnita, E . Suas soluções são os possíveis valores da energia total da partícula - os autovalores para as autofunções do primeiro tipo. Podemos obter as soluções dessa equação transcendental apenas por métodos gráficos ou numéricos.

Aqui optamos por obter a solução dessa equação pelo método numérico utilizando o programa Maple e um programa de ajuste de curvas para o ajuste das funções analíticas, como veremos em seguida.

Partindo da equação de Schroedinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + V\Psi = E\Psi. \quad (2.42)$$

considerando as equações (2.17), (2.31) e as definições de k_I e k_{II} e definindo

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}, \quad \rho \equiv \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}}, \quad (2.43)$$

verificamos que

$$k_I = \frac{2\xi}{a} \text{ e } k_{II} = \frac{2\sqrt{\rho^2 - \xi^2}}{a}. \quad (2.44)$$

Substituindo (2.44) na equação (2.31), chegamos a:

$$p(\xi) = \xi \tan \xi = \sqrt{\rho^2 - \xi^2} = q(\xi). \quad (2.45)$$

Seguindo o mesmo raciocínio e usando a relação (2.32) também podemos verificar que:

$$-\xi \cot \xi = q(\xi), \quad (2.46)$$

fazendo o limite de $V_0 \rightarrow \infty$ e $\rho \rightarrow \infty$, obtemos o resultado esperado, ou seja:

$$E \rightarrow E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2. \quad (2.47)$$

que é o resultado para o poço de potencial infinito dado pela equação (2.12)

Considerando $\hbar = 1$ e $m = \frac{1}{2}$ na equação (2.42), temos então a equação de Schroedinger simplificada

$$-\Psi'' + V\Psi = E\Psi, \quad (2.48)$$

fazendo agora uma dilatação espacial dada por $x = \lambda y$, obtemos a equação de Schroedinger nas novas variáveis

$$-\varphi'' + \tilde{V}\varphi = \tilde{E}\varphi, \quad (2.49)$$

onde

$$\tilde{V} = \lambda^2 V, \quad (2.50)$$

e

$$\tilde{E} = \lambda^2 E. \quad (2.51)$$

Escolhendo

$$\lambda = \frac{a}{2}, \quad (2.52)$$

o novo potencial $\tilde{V}$ é dado por:

$$\tilde{V} = \begin{cases} 0 & |y| > 1 \\ \frac{a^2 V_0}{4} & |y| < 1 \end{cases} \quad (2.53)$$

assim vemos que podemos mudar o tamanho do poço a , a sua profundidade V_0 ou ambos ao mesmo tempo de tal maneira que $\tilde{V}$ permaneça constante e a nova energia $\tilde{E}$ fica escrita como:

$$\tilde{E} = \frac{a^2}{4} E, \quad (2.54)$$

vemos então que quando $\tilde{V}_0 \rightarrow \infty$, chega-se a:

$$E \rightarrow E_n = \frac{\pi^2}{a^2} n^2. \quad (2.55)$$

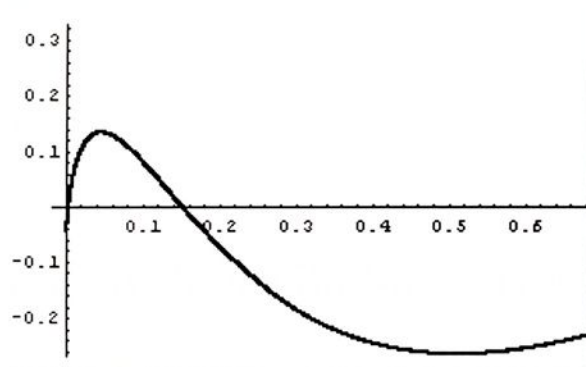
Logo a dependência no tamanho da caixa a é global ou ela está dentro de $\tilde{V}$.

A partir de agora nosso trabalho será achar as raízes, ou seja, onde as funções $p(\xi)$ e $q(\xi)$ interceptam-se para os dois tipos de autofunções (par e ímpar) desde o caso do poço finito até resultados do poço infinito para cada intervalo de E ou de ξ .

Procuramos então ajustar uma função analítica aproximada para o espectro obtido numericamente. Nestes cálculos numéricos foram gerados cerca de 150.000 autovalores, que agora estamos utilizando para terminar esta análise. Como exemplo apresentamos abaixo o caso do estado fundamental. Como se pode ver no gráfico abaixo da diferença percentual, como função da profundidade do poço, obtivemos uma função de ajuste, dada por:

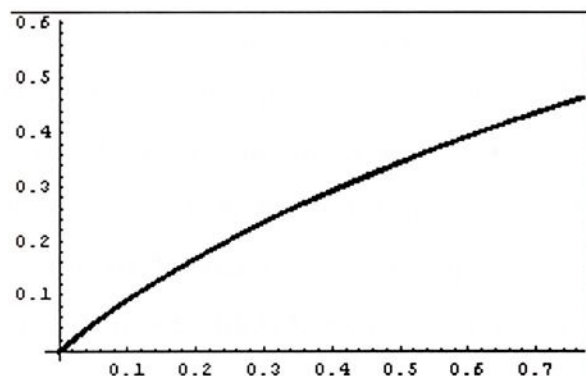
$$E_1 = V_0 [0,9995 + 1,07333V_0^{0,9523}]^{-\frac{1}{1,20671}}, \quad (2.56)$$

a qual possui uma excelente concordância com os valores exatos para a energia. Vê-se claramente que temos erros máximos da ordem de 0,3%.



comportamento da diferença percentual, conforme varia o potencial

Sendo que o gráfico da energia versus V_0 é a figura 2.3



dependência da energia para o estado fundamental

Atualmente estamos buscando estender este resultado para estados excitados de energia. Todavia, como salientamos no capítulo de introdução, não é esse o nosso objetivo principal nesta dissertação, de modo que priorizamos o estudo de outros sistemas que veremos mais adiante.

Capítulo 3

Aproximação analítica para o oscilador harmônico em uma caixa

3.1 O potencial do oscilador harmônico simples

Começamos discutindo este caso porque iremos utilizá-lo no caso do potencial do oscilador harmônico confinado e por motivo de completeza.

O oscilador harmônico simples é de tremenda importância na física, porque ele é o modelo básico para qualquer sistema que envolva oscilações. Por exemplo, é usado no estudo de vibrações de átomos em moléculas diatômicas, no estudo das propriedades térmicas e acústicas de sólidos que surgem das vibrações atômicas, propriedades magnéticas de sólidos que envolvem vibrações na orientação dos núcleos, e a eletrodinâmica de sistemas quânticos. De forma genérica, o oscilador harmônico pode ser utilizado para descrever quase todos os sistemas nos quais um ente está executando pequenas vibrações em torno de um ponto de equilíbrio estável.

Sabemos que o oscilador harmônico tem a energia potencial da seguinte forma:



$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad (3.1)$$

e os autovalores são dados por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (3.2)$$

onde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ e ω é a frequência angular de oscilação da partícula no potencial clássico. No problema quântico todos os autovalores são discretos, já que a partícula está confinada seja qual for o valor de sua energia.

As autofunções Ψ_n , correspondentes a alguns dos primeiros autovalores E_n , estão listadas na tabela 3.1, onde u está relacionado à coordenada x pela relação [11]

$$u = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} x \quad (3.3)$$

e as constantes A_n são determinadas pela condição de normalização:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \quad (3.4)$$

Na verdade, a solução geral do oscilador harmônico sob condições de contorno triviais é uma função envolvendo os polinômios de Hermite [12], [23].

$$\Psi_n(u) = A_n \exp(-u^2/2) H_n(u)$$

$$H(u) = c_0 \left(1 + \frac{c_2}{c_0} u^2 + \frac{c_4}{c_2} \frac{c_2}{c_0} u^4 + \frac{c_6}{c_4} \frac{c_4}{c_2} \frac{c_2}{c_0} u^6 + \dots \right) +$$

$$+ c_1 \left(u + \frac{c_3}{c_1} u^3 + \frac{c_5}{c_3} \frac{c_3}{c_1} u^5 + \frac{c_7}{c_5} \frac{c_5}{c_3} \frac{c_3}{c_1} u^7 + \dots \right)$$

Número quântico	Autofunções
0	$\Psi_0 = A_0 \exp(-u^2/2)$
1	$\Psi_1 = A_1 \exp(-u^2/2)$
2	$\Psi_2 = A_2(1 - 2u^2) \exp(-u^2/2)$
3	$\Psi_3 = A_3(3u - 2u^3) \exp(-u^2/2)$
4	$\Psi_4 = A_4(3 - 12u^2 + 4u^4) \exp(-u^2/2)$
5	$\Psi_5 = A_5(15u - 20u^3 + 4u^5) \exp(-u^2/2)$

Tabela 3.1: Tabela dos autovalores do potencial do oscilador harmônico

3.2 Oscilador harmônico em uma caixa

Mostraremos agora que a imposição que a função de onda se anule nas condições de contorno finitas, ou seja, se anule para valores finitos de x , implica que o potencial pode ser tratado de maneira similar a dos chamados potenciais quase exatamente solúveis [24]-[26].

Apresentaremos uma expressão analítica aproximada para o problema quântico de uma partícula sob a ação do potencial de um oscilador harmônico limitado a uma região finita do espaço. Além disso, nossa expressão tem todos os limites físicos corretos.

Trataremos do oscilador harmônico limitado em uma caixa simétrica unidimensional de comprimento a . Problemas semelhantes têm sido alvo de interesse [27]-[29], mas em geral são válidas somente soluções para um valor específico do potencial, e para se calcular o espectro de energia é necessário para cada novo valor do potencial repetir o cálculo numérico. Na realidade, usamos a mesma característica utilizada para lidar com o caso do oscilador anarmonico [30],[31].

Relembrando que a solução geral para a equação de Schroedinger do oscilador harmônico é dada por:

$$\Psi_n(x) = P_n(x) \exp(-\alpha x^2) \quad (3.5)$$

onde $P_n(x)$ é um polinômio de grau infinito (aquele que aparece nas funções parabólicas cilíndricas [32],[33]), que todavia é tomado finito (polinômios de Her-

mite) no caso de condições de contorno no infinito, a fim de obter uma função convergente. Aqui, de qualquer modo, a exponencial não garante que a função de onda se anule nas paredes e esta condição vai determinar o espectro de energia. No entanto, quando insistimos em usar polinômios finitos, que são os polinômios de Hermite, para os quais a energia é bem definida e dada por $E_n = \hbar\omega (n + 1/2)$ como vimos acima, encontramos uma equação para a frequência, que uma vez resolvida gera polinômios cujos zeros estão nas paredes da caixa. Tendo as frequências, as substituímos na expressão para a energia, e conseqüentemente obtemos a energia correspondente para o oscilador harmônico na caixa.

Para obter a frequência e a energia para um oscilador em uma caixa unidimensional com paredes em $-a/2$ e $+a/2$, usando a idéia acima, usamos a condição

$$H_n(\pm a/2) = 0 \quad (3.6)$$

Das figuras a seguir vemos que $H_0(\pm a/2) = 1$, não temos qualquer solução neste caso, o polinômio $H_2(\pm a/2)$ gera uma solução, $H_4(\pm a/2)$ duas soluções, e assim por diante. Note ainda que, observando as figuras a seguir, as soluções ímpares devem aparecer a partir de $H_3(\pm a/2)$.

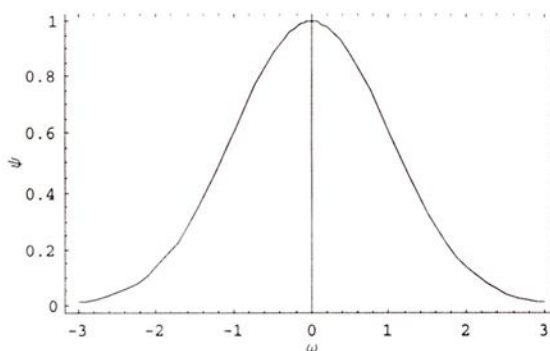


gráfico da função de onda para $n = 0$

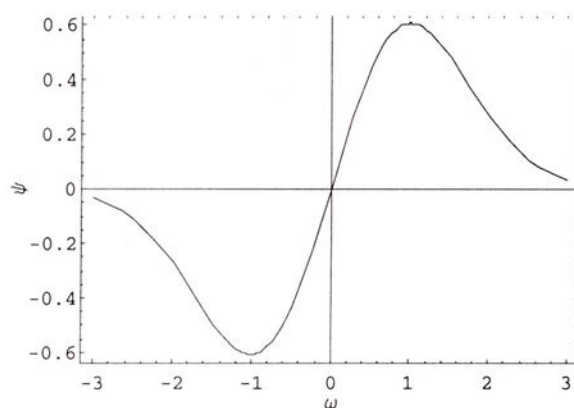


Figura 3.2: gráfico da função de onda para $nf = 1$

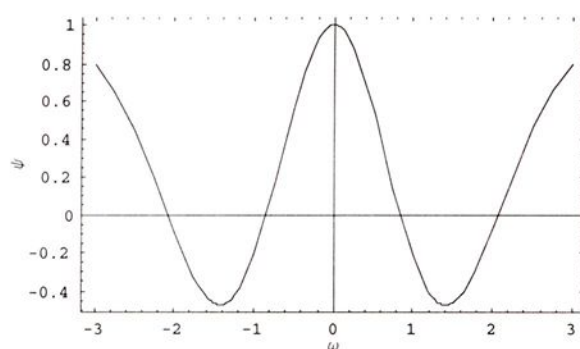


Figura 3.3 gráfico da função de onda para $nf = 2$ e $n = 1$

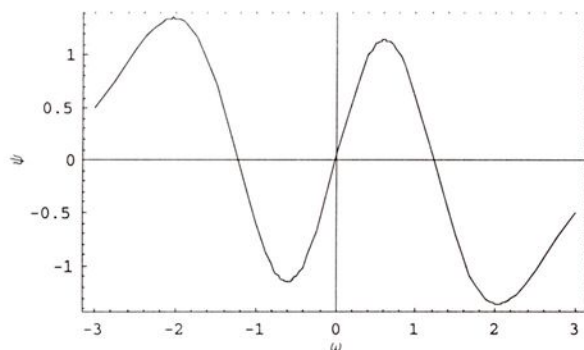


Figura 3.4 gráfico da função de onda para $nf = 3$ e $n = 2$

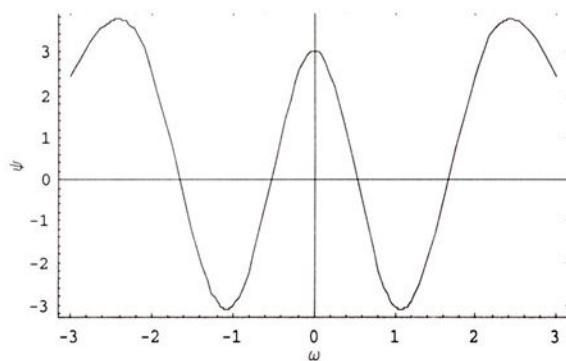


Figura 3.5 gráfico da função de onda para $nf = 4$ e $n = 3$

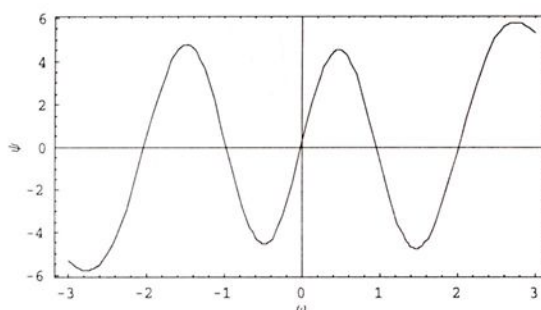


Figura 3.6 gráfico da função de onda para $nf = 5$ e $n = 4$

Coletamos, então, vários valores de E_0 para diversos valores de n e plotamos E_0 versus ω . Fizemos, então, o mesmo procedimento para E_1, E_2, E_3 , etc. Para melhor entendermos o comportamento da energia plotamos na figura 3.7 um exemplo de uma das energias (E) versus a frequência (ω).

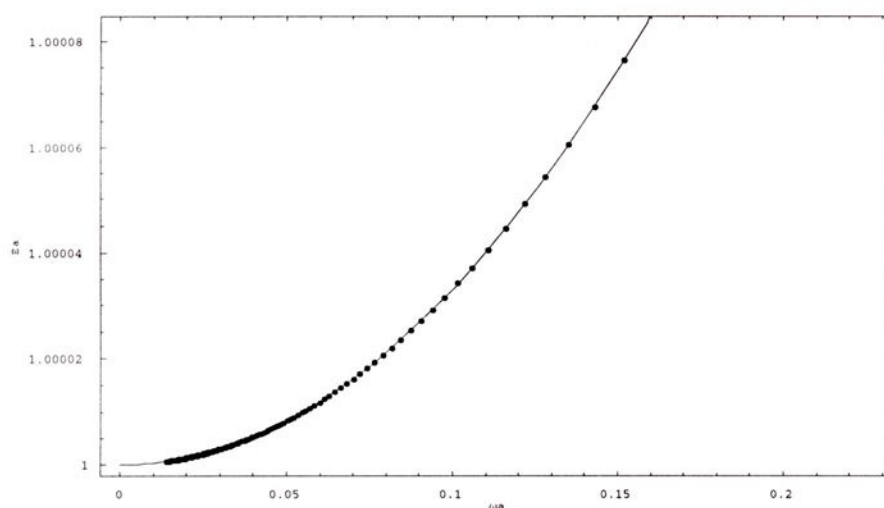


Figura 3.7 gráfico da energia versus a frequência para o oscilador harmônico na caixa

A primeira solução de cada polinômio par sempre corresponde ao estado fundamental, a segunda ao segundo estado excitado, etc. Analogamente, tomando as soluções ímpares, a solução de energia mais baixa corresponde ao primeiro estado excitado, e assim por diante. Todos com a mesma paridade. Todavia, antes de fazermos tal cálculo, vamos fazer uma transformação de variáveis.

Escolhendo

$$x = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_a}} y \quad (3.7)$$

e redefinindo a frequência e energia convenientemente, tal que:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \Psi}{dy^2} + \frac{1}{2} \omega_a^2 y^2 \Psi = E_a \Psi \quad (3.8)$$

onde as novas constantes em termos das antigas são dadas por:

$$\omega_a = \frac{m a^2}{\hbar} \omega, \quad E_a = \frac{m a^2}{4 \hbar^2} E \quad (3.9)$$

e agora precisamos encontrar os zeros de Ψ tal que $\Psi(\pm 1) = 0$.

Resolvendo um grande número de polinômios, podemos fazer um gráfico da energia como uma função da frequência para cada um dos níveis de energia, e em seguida tentar obter a relação funcional entre estes vários níveis. Também obtivemos uma expressão aproximada para a dependência na frequência, no comprimento da caixa e no número quântico.

Buscando uma expressão apropriada da energia, temos

$$E = E_{pc \text{ inf}} + E_{OHS} + g(\omega_a) \quad (3.10)$$

onde $E_{pc \text{ inf}}$ é a energia da partícula na caixa e E_{OHS} é a energia do oscilador harmônico simples.

Veremos que no limite de frequência zero a energia tende à energia da partícula na caixa. E quando o comprimento da caixa tende para infinito, temos o espectro do oscilador harmônico simples. Finalmente pode-se esperar que para grandes valores do número quântico principal, a energia seja dominada novamente pela energia da partícula em uma caixa. A função $g(\omega_a)$ então deve ter o seguinte limite apropriado

$$g(\omega_a \rightarrow 0) = 0, \quad g(\omega_a \rightarrow \infty) = 0.$$

Logo

$$E_n = \frac{\pi \hbar^2 n^2}{2ma^2} + \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_a + g(\omega_a) \quad (3.11)$$

$$\left(\frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2}\right) E_n = n^2 + k\omega_a + G(\omega_a) \quad (3.12)$$

$$k = \frac{8}{\pi^2} \left(n - \frac{1}{2}\right) \quad (3.13)$$

e

$$G(\omega_a) = g(\omega_a) \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\right) \quad (3.14)$$

Na equação (3.11) vemos que, quando $\omega_a \rightarrow 0$, a energia tende para

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (3.15)$$

que é a energia da partícula em uma caixa infinita. Por outro lado, quando $a \rightarrow \infty$, temos

$$E = \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (3.16)$$

ou seja, a energia do oscilador harmônico simples considerando $n = 1, 2, 3, \dots$

Escrevemos, então, a expressão para energia como

$$\varepsilon = \left(\frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2}\right) E_n = n^2 + k\omega_a + g(\omega_a) \quad (3.17)$$

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

Utilizamos o seguinte anzatz para $g_n(\omega_a)$:

$$g(\omega_a) = C_0(n) \omega_a \exp \left(- \sum_{j=1}^J C_j(n) \omega_a^j \right) \quad (3.18)$$

Para melhor entender esta hipótese tracemos na figura 3.8, por exemplo o caso particular $g(\omega_a) = \omega_a \exp(-\omega_a)$

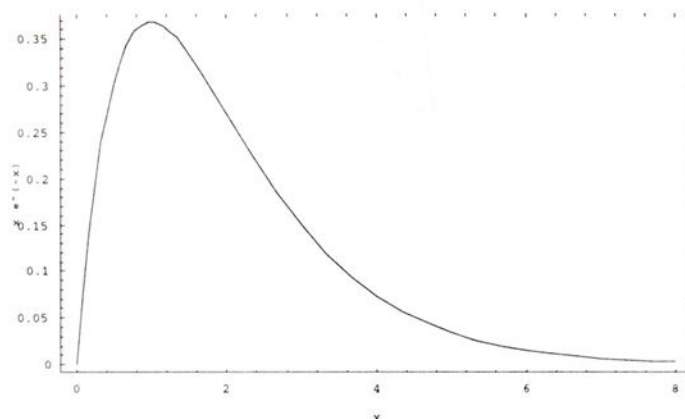


Figura 3.8 gráfico do comportamento esperado da função g contra a frequência

Depois de calcular as funções $g(\omega_a)$ necessárias verificamos que, de fato, esta função tem o comportamento esperado como suposto acima. Além de obter as raízes dos polinômios de Hermite até o grau 200, encontramos uma expressão aproximada para os coeficientes $C_j(n)$. Escolhendo $J=3$, obtivemos as expressões dadas abaixo:

$$c_0(n) = \frac{1}{0.405231 + 0.810579n}, \quad (3.19)$$

$$c_1(n) = \frac{0.0104832}{n} - \frac{0.00588616}{n^2} - \frac{0.00187449}{n^3}, \quad (3.20)$$

$$c_2(n) = 10^{-6} [-1.24 + 1.35 \cosh(0.1762n - 0.12)]^{-1}, \quad n > 1, \quad (3.21)$$

$$c_3(n) = 10^{-8} [-2.5 + 2.6 \cosh(0.086n - 0.278)]^{-1}, \quad n > 3, \quad (3.22)$$

No caso dos dois últimos coeficientes, os primeiros elementos foram separados para obter melhores ajustes. Nestes casos temos:

$$c_2(1) = 3.70973 \cdot 10^{-6}, \quad c_3(1) = -1.54146 \cdot 10^{-6},$$

$$c_3(2) = -8.78283 \cdot 10^{-7}, \quad c_3(3) = 4.56951 \cdot 10^{-8}. \quad (3.23)$$

n	$\omega_{a_{\max}}$	$D_{\max}$	n	$\omega_{a_{\max}}$	$D_{\max}$
1	2.0	9.0×10^{-5}	11	60.5	0.018
2	6.0	0.072	12	67.3	0.018
3	10.9	9.1×10^{-3}	13	74.1	0.017
4	16.3	0.02	14	81	0.017
5	22.1	0.016	15	87.9	0.016
6	28.1	9.3×10^{-5}	16	94.9	0.016
7	34.4	0.012	17	101.9	0.015
8	40.8	0.017	18	109	0.013
9	47.2	0.019	19	116.1	0.016
10	53.8	0.019	20	123.2	8.9×10^{-3}

Tabela 3.2: Tabela das raízes do oscilador harmonico e seus erros percentuais

Note que, realmente, os coeficientes se aproximam de zero para grandes valores de n . Estes cálculos foram realizados para $n \leq 20$. Todavia podemos esperar que para $n > 20$ apareçam bons resultados, pois quando os níveis de energia sobem a partícula sentirá cada vez menos a presença do oscilador harmônico e terá como influência predominante aquela de uma partícula livre na caixa com paredes impenetráveis.

A comparação da energia vem da aproximação analítica acima com valores numéricos, no caso de frequência arbitrárias, verificamos que o erro é menor que 0.07% na região de frequência considerada.

$$D = \left(\frac{E_{exato} - E_{aproximado}}{E_{exato}} \right) \cdot 100\% \tag{3.24}$$

onde E_{exato} são as raízes dos polinômios e $E_{aproximado}$ é dado expressão (3.10).

Ao longo da faixa dos parâmetros verificamos que, devido a razões técnicas, a precisão depende do nível de energia estudado e cresce para números quânticos mais altos, apresentamos uma tabela 3.2 com as raízes correspondentes e os seus erros percentuais de máximo respectivos para os primeiros vinte níveis.

Para melhor entendermos tracemos um gráfico na figura 3.9 da frequência (ω_a) contra o erro percentual (D)



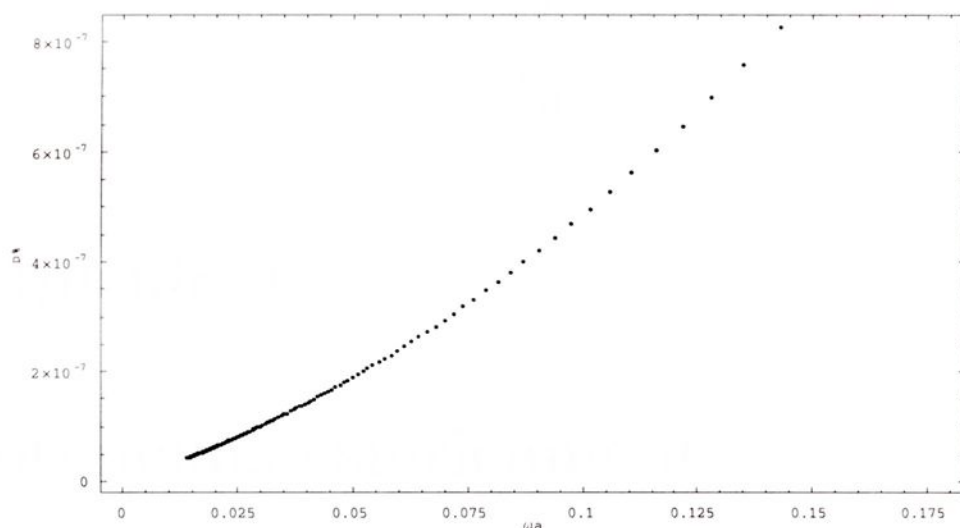


Figura 3.9 gráfico da diferença percentual contra a frequência para o oscilador harmônico na caixa

É interessante que o tipo de expressão de energia obtido aqui pode ser usado para estudar o aparecimento do caos de quântico nos casos de sistemas de potenciais anarmônicos [34], [35]. Isto acontece porque podem-se usar as expressões de energia que vêm desta aproximação para adquirir o número de níveis para uma determinada faixa de energia e os parâmetros relacionados correspondentes, usados para discutir o aparecimento do caos de quântico. Entretanto, espera-se que o comportamento caótico surja apenas em dimensões mais altas.

Capítulo 4

Potenciais esfericamente simétricos

4.1 Separação de variáveis em coordenadas esféricas

É geralmente impossível obter soluções analíticas da equação de onda tridimensional abaixo

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (4.1)$$

a menos que ela possa ser separada em equações diferenciais ordinárias em cada uma das três coordenadas espaciais. Para isto foi mostrado que há 11 sistemas de coordenadas no qual a equação de onda da partícula livre pode ser separada [23]. Um dos sistemas de coordenadas de maior importancia é o sistema de coordenadas esférico polar, em termos do qual as coordenadas cartesianas são determinadas por

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$z = r \cos \theta$$

Se a energia potencial possui simetria esférica, de forma que $V(\vec{r}) = V(r)$ uma função somente da magnitude r , a equação de onda sempre pode ser separada em coordenadas esféricas. Muitos problemas de interesse físico podem ser representados exatamente ou aproximadamente em termos de potenciais esfericamente simétricos de várias formas. Nesta seção efetuamos a separação e resolvemos as equações diferenciais ordinárias resultantes em θ e ϕ . Nas duas próximas seções vamos estudar a solução da equação radial para formas particulares de $V(r)$.

A equação (4.1) com uma energia potencial esfericamente simétrica pode ser escrita em coordenadas esféricas

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Psi + V(r) \Psi = E \Psi \quad (4.2)$$

Podemos encontrar soluções para a equação de Schroedinger independente do tempo acima, da forma

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

Isto é, mostraremos que existem soluções $\Psi(r, \theta, \varphi)$ para a equação (4.2) que se escrevem como produto de três funções, $R(r)$, $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$, cada uma delas dependendo somente de uma das coordenadas. A vantagem reside no fato de que essas três funções podem ser encontradas pela solução de equações diferenciais ordinárias. Vemos isso substituindo a forma produto, $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$, na equação de Schroedinger independente do tempo. Encontramos assim

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R \Theta \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial R \Theta \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 R \Theta \Phi}{\partial \phi^2} \right] \Psi + \quad (4.3)$$

$$+V(r) R\Theta\Phi = ER\Theta\Phi$$

Após algumas manipulações, obteremos

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -\frac{\sin^2}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\sin\theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 \sin^2\theta [E - V(r)] \quad (4.4)$$

Como o membro esquerdo dessa equação não depende de r ou θ , enquanto o direito não depende de φ , o valor comum de ambos não pode depender de nenhuma dessas variáveis. O valor comum deverá portanto ser uma constante, que por conveniência chamaremos de $-m_l^2$. Obteremos assim duas equações, escrevendo que cada um dos membros é igual a essa constante

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} = -m_l^2 \varphi \quad (4.5)$$

e

$$-\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \quad (4.6)$$

Transpondo termos podemos escrever a segunda equação como

$$-\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \quad (4.7)$$

Como temos aqui uma equação cujo membro esquerdo não depende de uma das variáveis e cujo membro direito não depende da outra variável, concluímos novamente que ambos os membros devem ser iguais a uma constante. É conveniente escrever essa constante como $l(l+1)$. Obteremos então, igualando ambos os membros a $l(l+1)$, duas outras equações

$$\frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \Theta \quad (4.8)$$

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [E - V(r)] = l(l+1) \frac{R}{r^2} \quad (4.9)$$

Vemos que a forma produto utilizada como solução é válida porque funciona! Vemos também que o problema foi reduzido a resolver as equações diferenciais ordinárias, (4.5), (4.8) e (4.9), para $R(r)$, $\Theta(\theta)$ e $\Phi(\varphi)$ [11].

Resolvendo essas equações, encontraremos que a equação para $\Phi(\varphi)$ só tem soluções aceitáveis para certos valores de m_l . Usando esses valores de na equação para $\Theta(\theta)$, ocorre que essa equação também só tem soluções aceitáveis para certos valores de l . Com esses valores de l na equação para $R(r)$, encontra-se que essa equação só tem soluções aceitáveis também para certos valores da energia total E ; isto é, a energia do átomo é quantizada.

Solução das equações

Considere (4.5) para $\Phi(\varphi)$. Derivando e substituindo, pode-se verificar que ele tem uma solução particular

$$\Phi(\varphi) = e^{im_l\varphi} \quad (4.10)$$

Aqui, pela primeira vez, deveremos considerar explicitamente a imposição de que as autofunções sejam unívocas. Isto obriga que a função $\Phi(\varphi)$ seja unívoca e esta exigência deve ser considerada explicitamente porque os ângulos azimutais $\varphi = 0$ e $\varphi = 2\pi$ são na verdade o mesmo ângulo. Devemos obrigar então que $\Phi(\varphi)$ tenha o mesmo valor a $\varphi = 0$ e $\varphi = 2\pi$, isto é,

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi) \quad (4.11)$$

Calculando a exponencial da solução particular, obtemos

$$e^{im_l 0} = e^{im_l 2\pi} \quad (4.12)$$

ou

$$1 = \cos m_l 2\pi + i \sin m_l 2\pi \quad (4.13)$$

Essa exigência só será satisfeita se o valor absoluto de m_l tiver um dos seguintes valores

$$|m_l| = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.14)$$

Em outras palavras, m_l só pode ser um inteiro, negativo ou positivo. O conjunto de funções que são soluções aceitáveis para (4.5) será então

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{im_l\varphi} \quad (4.15)$$

onde m_l tem um qualquer dos valores inteiro especificado por (4.14). O número quântico m_l é usado como índice para identificar a forma específica de uma solução aceitável.

Resolvendo (4.8) para funções $\Theta(\theta)$, o tratamento é quase o mesmo do utilizado para obter as soluções analíticas da equação de Schroedinger independente do tempo para o potencial do oscilador harmônico simples. Encontra-se soluções para (4.8) aceitáveis (permanecem finitas) somente se a constante l for igual a um dos inteiros.

$$l = |m_l|, |m_l| + 1, |m_l| + 2, |m_l| + 3, \dots \quad (4.16)$$

As soluções aceitáveis podem ser escritas

$$\Theta_{lm_l}(\theta) = \sin^{|m_l|} F_{lm_l}(\cos \theta) \quad (4.17)$$

os $F_{lm_l}(\cos \theta)$ são polinômios em $\cos \theta$, cujas equações dependem do número quântico l e do valor absoluto do número quântico m_l . É necessário usar, portanto, ambos os números quânticos para identificar as funções $\Theta_{lm_l}(\theta)$, soluções aceitáveis para a equação.

O tratamento usado na solução de (4.9) para as funções $R(r)$ é também muito semelhante ao usado para o potencial do oscilador harmônico simples. Deduz-se que só existem soluções de estado ligado aceitáveis (permanecem finitas) se a constante E (energia total) tiver um dos valores E_n , onde

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \quad (4.18)$$

Nesta expressão, o número quântico n é um dos inteiros

$$n = l + 1, l + 2, l + 3, \dots \quad (4.19)$$

As soluções aceitáveis são escritas de forma mais conveniente como

$$R_{nl}(r) = e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^l G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) \quad (4.20)$$

onde o parâmetro a_0 vale

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \quad (4.21)$$

Os $G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)$ são polinômios em $\frac{Zr}{a_0}$, com diversas formas para os diferentes valores de n e l . Ambos os números quânticos são necessários, portanto, para identificar as diferentes funções $R_{nl}(r)$, soluções aceitáveis para a equação. Mas os valores permitidos para a energia total E_n dependem somente do número quântico n .

4.2 Partícula no poço quadrado tridimensional

Mais uma vez estudamos este caso a fim de nos preparar para tratar o caso limite do potencial de Coulomb na “esfera infinita”.

Nesta seção apresentamos inicialmente o caso de uma partícula em um poço esfericamente simétrico finito. Queremos encontrar a energia do estado

fundamental que corresponde à escolha particular da energia potencial $V(r)$ e o número quântico associado ao momento angular l , resolvendo a equação radial

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R = 0 \quad (4.22)$$

Consideramos o poço de potencial de profundidade finita, $V(r) = -V_0$ para $r < a$ e $V(r) = 0$ para $r > a$, onde V_0 é positivo como pode ser visto na figura abaixo.

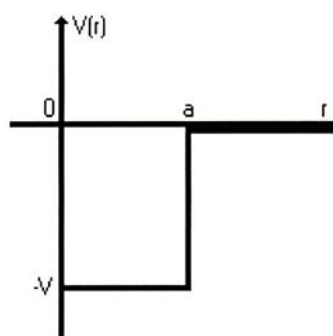


Figura 4.1: poço de potencial finito em coordenadas esféricas

Momento angular zero: Quando $l = 0$, é conveniente fazer $R(r) = X(r)/r$ e resolver a equação de onda na forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dr^2} - V_0 X = EX \quad r < a \quad (4.23)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dr^2} = EX \quad r > a \quad (4.24)$$

do que na forma da equação (4.22).

As soluções das equações (4.23) e (4.24) são

$$X(r) = A \sin(\alpha r) + B \cos(\alpha r), \quad \alpha = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad r < a \quad (4.25)$$

$$X(r) = C e^{-\beta r} \quad \beta = \left(\frac{2m|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad r > a \quad (4.26)$$

estamos interessados na energia do estado fundamental ($E < 0$). A necessidade de que $R(r)$ seja finito em $r = 0$ exige que escolhamos $B = 0$ na primeira das equações de (4.25). O nível de energia é obtido pela imposição de continuidade de $(1/X)(dX/dr)$ em $r = a$ (isto é equivalente a fazer $(1/R)(dR/dr)$ contínuo), e é dado pelas raízes da equação

$$\alpha \cot(\alpha a) = -\beta \quad (4.27)$$

Pode-se verificar que não existe nível de energia se $V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m$; há um estado se $\pi^2 \hbar^2 / 8m < V_0 a^2 \leq 9\pi^2 \hbar^2 / 8m$, etc [23].

Autofunções interiores para l arbitrário: Para valores não nulos de l , é mais conveniente trabalhar com a equação radial original (4.22) do que com a equação para X . Reescrevendo $\rho = \alpha r$, onde α foi definido em (4.26), a equação para $r < a$ torna-se

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (4.28)$$

A forte semelhança entre a equação acima e a equação de Bessel sugere que $R(r)$ possa ser expressa em termos das funções de Bessel. Se definirmos a função esférica de Bessel $j_l(\rho)$ [23] que é contínua para $\rho = 0$

$$j_l(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho} \right)^{1/2} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho), \quad (4.29)$$

onde J é uma função de Bessel de ordem $l + 1/2$, é fácil verificar que $j_l(\rho)$ satisfaz a equação (4.28). Da mesma maneira, a função esférica de Neumann é dada por

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2\rho} \right) J_{-l+\frac{1}{2}}(\rho), \quad (4.30)$$

e assim pode ser mostrado que $J_{l+\frac{1}{2}}$, onde l é um inteiro, é expresso como a soma de produtos de $\sin(r)$ e $\cos(r)$ com polinômios de ordem ímpar em $\rho^{-1/2}$. A fim de exemplificar apresentamos expressões para as primeiras funções de cada tipo:

$$\begin{aligned}
j_0 &= \frac{\text{sen} \rho}{\rho}, & n_0 &= -\frac{\cos \rho}{\rho}, \\
j_1 &= \frac{\text{sen} \rho}{\rho^2} - \frac{\text{sen} \rho}{\rho}, & n_1 &= -\frac{\text{sen} \rho}{\rho} - \frac{\cos \rho}{\rho^2}, \\
j_2 &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \text{sen} \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho, & n_2 &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \text{sen} \rho.
\end{aligned} \tag{4.31}$$

A imposição de que $R(r)$ seja finita em $r = 0$, para $r < a$ leva-nos a:

$$R(r) = A j_l(\alpha r). \tag{4.32}$$

Autofunções exteriores para l arbitrário: A equação de onda para $r > a$ pode ser colocada na forma (4.28) se redefinimos $\rho = i\beta r$, onde β foi definido em (4.25). A combinação linear de j_l e n_l pode ser escolhida para determinar a forma assintótica que cai exponencialmente para r grande. Isso nos leva a utilizar as funções esféricas de Hankel [23]

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho), \quad h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho), \tag{4.33}$$

que têm a forma assintótica

$$h_l^{(1)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} e^{i[\rho - \frac{1}{2}(l+1)\pi]}, \tag{4.34}$$

$$h_l^{(2)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} e^{-i[\rho - \frac{1}{2}(l+1)\pi]}. \tag{4.35}$$

Para $r > a$, então temos

$$R(r) = B h_l^{(1)}(i\beta r) = B [j_l(i\beta r) + in_l(i\beta r)]. \tag{4.36}$$

A título de exemplo os três primeiros casos destas funções são dados por:

$$h_0^{(1)}(i\beta r) = -\frac{1}{\beta r} e^{-\beta r} \tag{4.37}$$

$$h_1^{(1)}(i\beta r) = i \left(\frac{1}{\beta r} + \frac{1}{\beta^2 r^2} \right) e^{-\beta r} \quad (4.38)$$

$$h_2^{(1)}(i\beta r) = \left(\frac{1}{\beta r} + \frac{3}{\beta^2 r^2} + \frac{3}{\beta^3 r^3} \right) e^{-\beta r} \quad (4.39)$$

Os níveis de energia podem novamente ser obtidos pela exigência de que $(1/R)(dR/dr)$ seja contínua em $r = a$. Aplicando esta condição para solucionar o caso em que $l = 0$, obtivemos a equação (4.27). Isto pode ser escrito como

$$\xi \cot(\xi) = -\eta, \quad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (4.40)$$

onde $\xi = \alpha a$ e $\eta = \beta a$. A mesma condição utilizada para solucionar $l = 1$ se reduz, com a ajuda de (4.31) e (4.37 a 4.39), a

$$\frac{\cot(\xi)}{\xi} - \frac{1}{\xi^2} = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^2}, \quad \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \quad (4.41)$$

que pode ser resolvida numericamente ou graficamente. Em geral não há degenerescência entre os autovalores obtidos da solução das equações (4.40) e (4.41) para vários valores de l . Aliás, como veremos na próxima seção, esta é uma indicação de que no caso do potencial de Coulomb na esfera, haverá a quebra da chamada degenerescência acidental. Não existe nível de energia para $l = 1$ quando

$$V_0 a^2 \leq \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}, \quad (4.42)$$

Há um estado fundamental com $l = 1$ se $\pi^2 \hbar^2 < V_0 a^2 \leq 2\pi^2 \hbar^2/m$, etc. O menor valor de $V_0 a^2$ para que exista um estado fundamental com $l = 1$, é maior que o valor correspondente de $V_0 a^2$ para $l = 0$, o que é razoável do ponto de vista físico. A interpretação do termo contendo l na equação de onda radial como uma energia potencial adicional, que corresponde à força centrífuga, sugere que uma

partícula possuindo momento angular requer um potencial atrativo mais forte do que a mesma partícula sem momento angular [23].

Interessados no caso limite do potencial de Coulomb na “esfera infinita”, vamos agora discutir o caso em que o potencial é totalmente confinante, ou seja, exigimos que a partícula livre esteja confinada à esfera com raio a . Para isso impomos a condição:

$$\left[\frac{1}{R} \frac{dR}{dr} \right]_{r=a} = 0 \quad (4.43)$$

o que nos leva às equações:

$$\alpha \cot(\alpha a) = 0 \implies \cos(\alpha a) = 0 \quad (l = 0) \quad (4.44)$$

$$\frac{1}{j_l(\alpha r)} \frac{d}{dr} [j_l(\alpha r)]_{r=a} = 0 \quad (l \neq 0) \quad (4.45)$$

de modo que obtemos a partir disso o espectro de energia. Neste ponto, poderíamos continuar a implementar o método utilizado até agora. Entretanto pela maior relevância de casos a serem estudados em seções posteriores, e ainda por uma questão de tempo, não vamos nos aprofundar neste exemplo.

4.3 Estudo do espectro analítico para o potencial de Coulomb confinado em uma esfera

Nesta seção estudamos o caso de partículas carregadas sob a ação do potencial de Coulomb e confinadas em uma região finita do espaço. Fazemos um tratamento analítico aproximado para o potencial do átomo de hidrogênio que permitirá uma análise quantitativa e qualitativa, onde o método numérico certamente teria dificuldade.

Trabalhamos no caso do átomo de hidrogênio confinado em uma “esfera” de raio r_0 . Uma vez que vamos utilizar condições de contorno que possuem simetria esférica, a parte angular da equação de Schroedinger não se altera, e podemos

considerar apenas as modificações advindas das novas condições de contorno na variável radial.

A solução geral do átomo de hidrogênio é dada por [23]:

$$R(x) = R_n^*(x) \exp\left(-\frac{\mu\alpha r}{\hbar^2 m}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.46)$$

sendo $V(r) = -e^2/r$. Onde $R_n^*(x)$ é um polinômio de grau infinito, a princípio será finito para condições de contorno no infinito e infinito na “esfera”, nas condições de contorno usuais ele será é o polinômio de Laguerre. Usaremos polinômios finitos a fim de gerar soluções exatas simples, já que a energia para polinômios finitos é conhecida e dada por: $En = -\mu e^4/2\hbar^2 n^2$. Neste caso porém a exponencial não garante que a função de onda se anule no contorno, o que implica na imposição que o polinômio se anule na superfície (“parede”) da esfera.

Partindo da equação de Schroedinger independente do tempo para $R(r)$ [23],[11]:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r R(r) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \hbar^2 + V(r) R(r) = E R(r), \quad (4.47)$$

Definindo $R(r) = \frac{1}{r} u(r)$, temos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \hbar^2 + V(r) \right] u(r) = E u(r). \quad (4.48)$$

Mudando a variável radial para $\rho = \frac{\mu e^2}{\hbar^2} r$ e substituindo na equação anterior, vem que:

$$\left[C \left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right) - E \right] \nu(\rho) = 0, \quad (4.49)$$

onde $C = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$. Escolhendo o Ansatz $u(\rho) = \nu(\rho) e^{-a\rho}$ e substituindo na equação anterior, obtemos:

$$\left[C \left(-\frac{d^2}{d\rho^2} + 2a \frac{d}{d\rho} - a^2 + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right) - E \right] \nu(\rho) = 0. \quad (4.50)$$

Aplicando $\nu(\rho) = \rho^{l+1} \sum_0^n b_n \rho^n$ na equação anterior e fazendo $E = -Ca^2$, achamos a seguinte relação de recorrência:

$$b_{j+1} = \frac{2[1 - a(j+l+1)]}{l(l+1) - (j+l+2)(j+l+1)} b_j. \quad (4.51)$$

Considerando as condições de contorno do problema no infinito, devemos truncar a série em $j = N$ então b_N (N , inteiro e finito), para que a série seja finita, ficamos com $b_{N+1} = 0$, assim:

$$a_N = \frac{1}{n}, \quad n \equiv N + l + 1 \quad (4.52)$$

e se $E = -Ca_N^2$, chegamos à expressão:

$$E_n = -\frac{C}{n} = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n} \quad (4.53)$$

Podemos ainda utilizar a relação de recorrência a fim de obter uma forma mais geral, considerando as condições de contorno finitas, dada pela seguinte expressão:

$$\frac{b_j}{b_0} = \prod_{j=1}^n \frac{2(j+l)a_{j-1} - 1}{j(j+2l+1)}, \quad (4.54)$$

uma vez que neste caso a série terá infinitos termos.

A equação para $R(r)$, pode ser escrita em função dos polinômios de Laguerre:

$$R(r) = r^l e^{-kr} L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr), \quad (4.55)$$

onde $k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$. Fazendo $R(r = r_0) = 0$, obtemos:

$$L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2\mu Ze^2 r_0}{\hbar^2 n} \right) = L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{g}{n} \right) = 0, \quad (4.56)$$

onde $g = \frac{2\mu Ze^2 a}{\hbar^2}$. Utilizamos a expressão da energia

$n, l/m$	0	1	2	3
1, 0	-1.00421	0.502846	0.0152158	0.00487229
2, 0	-4.50591	0.918442	0.0402514	0.00162719
2, 1	-2.05892	0.384483	0.00167988	0.000448289
3, 0	-9.69984	0.938899	-0.0182804	0.000282908

Tabela 4.1: Tabela dos coeficientes do potencial de Coulomb

$$E_n = \frac{Z^2 \mu e^4}{2 \hbar^2 n^2} \quad \text{e} \quad \frac{g \hbar}{2 \mu a} = \frac{Z e^2}{\hbar};$$

$$E_n = -\frac{g^2 \hbar^2}{8 n^2 \mu r_0^2}. \tag{4.57}$$

Pela relação de recorrência, no caso do polinômio ser finito, obtemos os polinômios de Laguerre generalizados. Sendo que a primeira solução de cada polinômio corresponde sempre ao estado de menor energia, a segunda solução corresponde ao primeiro estado excitado, e assim por diante, analogamente ao que ocorreu no caso do oscilador harmônico.

Através de um programa algébrico (Mathematica), resolvemos polinômios de grau 100 obtendo 4 níveis de energia. Para cada nível de energia fizemos um gráfico de E_N versus g e obtivemos sua respectiva equação. Os coeficientes estão listados na tabela 4.1.

$$E = \sum_{m=0}^3 C_m^{(n,l)} g^m \tag{4.58}$$

Interpolamos funções analíticas entre pontos exatos, apresentando uma relação entre níveis de energia, as quais está indicada na figura 4.2.

n, l	$g_{\max}$	$g_{\min}$	$\delta \%_{\max}$
1, 0	2.0	1.8	4.7×10^{-5}
2, 0	7.1	6.15	4.3×10^{-3}
2, 1	6.0	5.0	6.2×10^{-4}
3, 0	15.5	12.9	9.4×10^{-3}

Tabela 4.2: Tabela do parâmetro g e erros percentuais do potencial de Coulomb

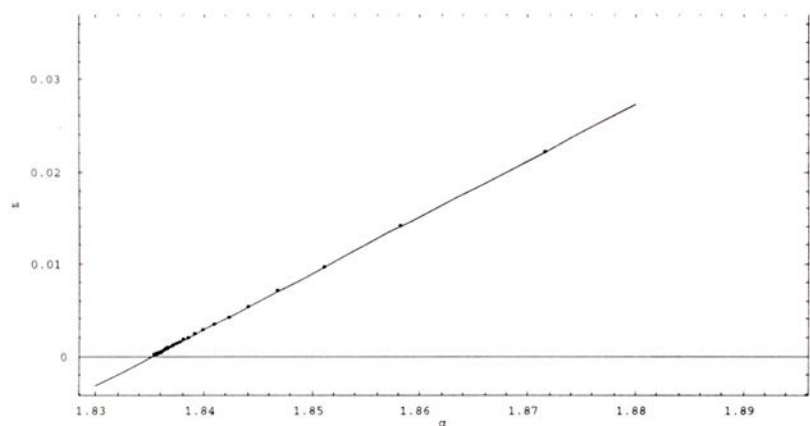


Figura 4.2 gráfico típico da dependência da energia em g

A expressão de energia que vem dos parâmetros anteriores apresenta uma boa concordância com os dados numéricos exatos e, como aconteceu no caso do oscilador harmônico, apresenta uma região crescente de validade conforme aumenta o número quântico principal, como pode ser visto em (4.2). Nestas regiões, o erro é bastante pequeno, aproximadamente $10^{-2}\%$.

Plotamos, então, um gráfico na figura 4.3 do parâmetro g contra o erro percentual D.

Analisando os dados, pode-se verificar que a região está limitada pelo polinômio máximo usado. Assim para aumentar a precisão e a região de validade, deveria-se usar graus mais altos para os polinômios de Laguerre.

Descobrimos também, com os resultados, que para momentos angulares diferentes a energia é diferente, isto é, a energia não é mais degenerada, como acontecia no caso de condições de contorno no infinito. Como a simetria esférica foi preservada pela condição de contorno utilizada, devemos procurar outra simetria quebrada. A quebra de simetria está associada à não conservação do vetor

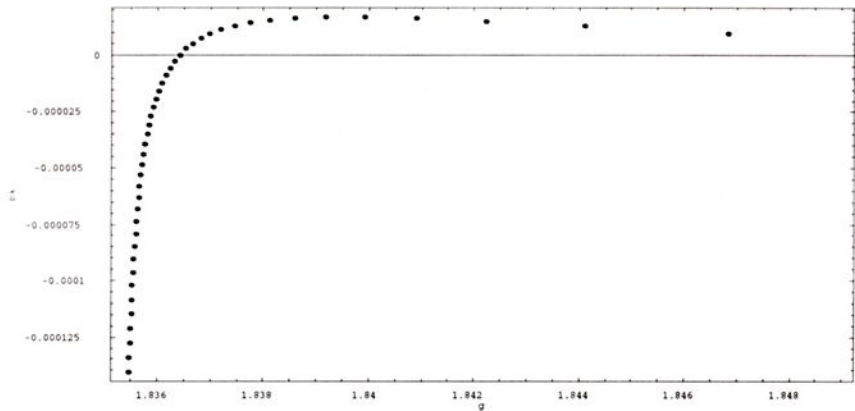


Figura 4.2: Figura 4.3 gráfico da diferença percentual contra g para o pontencial de Coulomb

de Runge-Lenz. Isto pode ser discutido lembrando que, classicamente o vetor de Runge-Lenz implica em órbitas elípticas com excentricidades diferentes para momentos angulares diferentes, algumas não poderão existir devido ao contorno finito. Por outro lado, do ponto de vista de uma transformação geométrica, pode-se usar o fato do comutador do vetor de Runge-Lenz com a coordenada radial gerar uma mudança nesta coordenada

$$r' = r + \{r, \alpha \cdot \mathbf{E}\}, \quad \{r, \alpha \cdot \mathbf{E}\} = \frac{1}{km} \frac{(\mathbf{r} \times \mathbf{L})}{r} \cdot \alpha, \tag{4.59}$$

onde $\mathbf{E}$ e α são respectivamente o vetor de Runge-Lenz e o parâmetro vetorial infinitesimal desta transformação de simetria. Da equação acima pode-se concluir que quando a partícula estiver próxima ao contorno, a transformação pode levá-la além do contorno, o que não é permitido à partícula logo esta simetria foi quebrada por esta condição de contorno. Deve ser interessante estudar a aplicação desta aproximação para mínimo, a hamiltoniana para o elétron é dada por [39]:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \tag{4.60}$$

onde e é o módulo da carga do elétron, c é a velocidade da luz e $\vec{A}$ é o potencial vetor. Podemos comprovar que a hamiltoniana acima é satisfatória através das equações de Hamilton

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}; \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \quad (4.61)$$

Obtemos, então, a equação de movimento correta partindo da hamiltoniana acima, ou seja

$$m \ddot{x} = \frac{e}{c} \left(\vec{v} \times \vec{B} \right)_x + \frac{e}{c} E_x, \quad (4.62)$$

que comprova o fato da hamiltoniana estar correta. Por outro lado, a equação de Schroedinger $H\Psi = E\Psi$ é invariante sob a transformação de calibre.

$$\vec{A}(\vec{r}) \rightarrow \vec{A}(\vec{r}) - \nabla\omega(\vec{r}), \quad (4.63)$$

$$\Psi(\vec{r}) \rightarrow \exp\left(-\frac{ie\omega(\vec{r})}{\hbar c}\right) \Psi(\vec{r}), \quad (4.64)$$

onde $\omega(\vec{r})$ é uma função contínua diferenciável arbitrária

Consideremos agora um campo magnético externo uniforme $\vec{B}$ apontando ao longo do eixo z , e escolhendo o potencial vetor $\vec{A}$, tal que [40] $A_x = -By$, $A_y = A_z = 0$, obtemos

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \left[p_x - \left(\frac{eB}{c} \right) y \right]^2 + p_y^2 + p_z^2 \right\}. \quad (4.65)$$

Resolvemos a equação de Schroedinger neste calibre supondo uma função de onda da forma

$$\Psi(x, y, z) = \exp[i(k_x x + k_z z)] f(y) \quad (4.66)$$

Uma vez que as coordenadas x e z estão ausentes da hamiltoniana, segue que

$$[p_x, H] = [p_z, H] = 0 \quad (4.67)$$



e podemos concluir que p_x , p_z e H têm autoestados comuns. Substituindo (4.65) e (4.66) em $H\Psi = E\Psi$ temos que:

$$\left[\frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (y - y_0)^2 \right] f(y) = E' f(y) \quad (4.68)$$

$$\omega_0 = eB/mc; \quad y_0 = (\hbar c/eB) k_x, \quad (4.69)$$

onde $E' = E - \hbar^2 k_z^2 / 2m$ na equação acima. A frequência natural ω_0 do oscilador harmônico é a frequência de cíclotron, a qual no movimento clássico descreve uma órbita circular normal ao campo magnético uniforme. Os autovalores de energia no caso de condição de contorno no infinito, ou seja, a função de onda se anulando no infinito, são então dadas por:

$$E(p_z, j) = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.70)$$

com $p_z = \hbar k_z$. Esses são os níveis de Landau. Como eles são independentes de k_x , eles têm uma degenerescência igual ao número de valores de k_x permitidos, tais que y_0 encontre-se dentro da caixa. A energia não depende de k_x mas a função de onda (4.66) depende. Note que y_0 tem que estar dentro da caixa se estivermos estudando tal tipo de sistema confinado.

Vamos agora colocar o sistema em um cubo de lado L , e impor condições de contorno periódicas. Os valores permitidos de k_x são da forma $2\pi n_x / L$, onde $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Assim verificamos o seguinte fato importante: o espectro contínuo de energia de uma partícula livre, muda para um espectro quase contínuo quando a partícula é limitada em uma caixa grande. Para y_0 ser encontrado entre 0 e L , os valores de n_x devem ser positivos e limitados por

$$g = \frac{eB}{\hbar c} L^2, \quad (4.71)$$

que é a degenerescência de um nível de Landau $n_x = 0, 1, 2, \dots, g$.



$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad (4.72)$$

para um nível de energia temos vários estados possíveis

$$\Psi(x, y) = \exp[i(k_x x + k_z z)]. \quad (4.73)$$

A proporcionalidade de L^2 reflete o fato que a projeção da órbita do elétron sobre o plano xy pode ser centrada em qualquer ponto no plano sem mudança na energia.

O termo da energia cinética $p_z^2/2m$ da equação (4.70) corresponde ao movimento livre, na direção do eixo z . Classicamente, tal movimento não é afetado por um campo magnético na direção de z . O segundo termo da energia da equação (4.70) corresponde ao movimento rotacional normal a B . No movimento clássico corresponde os movimentos de uma partícula carregada (a partícula se move ao longo de uma hélice de raio e passo constante).

A projeção sobre o plano xy é uma circunferência. Como $g = eBL^2/hc$, ou seja depende da área do cubo e não de um ponto, então pode ser centralizada em qualquer lugar. Assim quando o campo magnético externo é ligado, o espectro de energia associado ao movimento no plano xy muda de um espectro quase contínuo para um espectro discreto.

E o espaçamento dos níveis e a degenerescência aumentam com o campo magnético externo, como está ilustrado na figura abaixo.

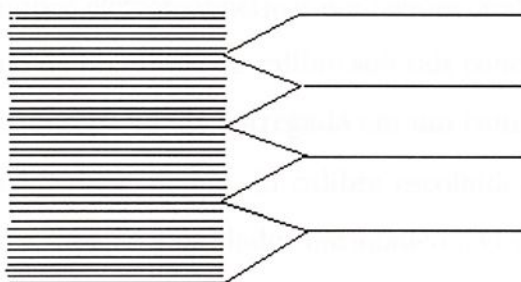


Figura 4.3: esquema pictórico do espaçamento dos níveis e da degenerescência

Todas as energias mais baixas $n_x = 0, 1, 2, \dots, g$ juntam-se (agrupam-se) em uma e assim sucessivamente.

Os níveis de energia (4.65) são chamados de níveis de Landau. A autofunção que corresponde à autoenergia é

$$f_n(y) = C_n H_n \left[\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} (y - y_0) \right] \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m\omega_0}{\hbar} (y - y_0)^2 \right] \quad (4.74)$$

A n -ésima ordem do polinômio de Hermite é escrita como H_n , e C_n é uma constante de normalização. Em conjunto com (4.66), este Ψ_n fornece a função de onda para uma partícula carregada movendo em um campo magnético uniforme que aponta na direção z , sob condições de contorno no infinito.

4.4 Partícula carregada na presença de um campo magnético homogêneo sob condições de contorno não triviais

Recentemente, Dodin e Fisch [41] discutiram o movimento de partículas carregadas próximas a campos magnéticos descontínuos. Em particular foi discutido o movimento das partículas confinadas perto da descontinuidade. Naturalmente, uma consequência disto é que o confinamento permitir aparecer níveis quânticos com espectros de energia.

Nesta seção apresentaremos o estudo que fizemos sobre o caso de partículas carregadas em campos eletromagnéticos em regiões confinadas, a fim de tentar entender o mecanismo de liberdade de calibre sob tais condições. Em particular é fácil demonstrar que uma partícula carregada em um campo magnético homogêneo pode ser mapeada, dependendo do calibre escolhido, em um problema de partícula livre em uma direção e oscilador harmônico na outra, ou mesmo em um oscilador bidimensional.

Estudamos aqui o problema da partícula no campo magnético homogêneo com condições de contorno finitas e vimos que este problema pode ser resolvido

para o calibre simétrico e os calibres de Landau. Realizamos também o cálculo através de mapeamento de gauges, para mostrar que para cada calibre escolhido, no caso de condições de contorno finitas, obtivemos um espectro de energia diferente para cada calibre, o que é muito estranho, pois na literatura isso não ocorre.

4.4.1 Partícula carregada na presença de um campo magnético uniforme no calibre de Landau

A equação de Schroedinger para uma partícula carregada na presença de um campo magnético homogêneo escrita em coordenadas cartesianas é [42]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{i\hbar e}{2m} \left(c_1 x \frac{\partial \Psi}{\partial y} + c_2 y \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \frac{e^2}{2m} (c_1^2 x^2 + c_2^2 y^2) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (4.75)$$

escrita em um calibre genérico de Coulomb ($\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$). Estudamos particularmente os casos do calibre simétrico ($c_1 = 1 = -c_2$) e o calibre de Landau ($c_1 = 1, c_2 = 0$; ou $c_1 = 0, c_2 = -1$), sujeito às seguintes condições de contorno:

$$\psi \left(x, \pm \frac{b}{2} \right) = 0, \quad \psi (\pm \infty, y) = 0, \quad (4.76)$$

ou ainda

$$\psi \left(\pm \frac{a}{2}, y \right) = 0, \quad \psi \left(x, \pm \frac{b}{2} \right) = 0. \quad (4.77)$$

Começamos estudando o caso de um dos calibres de Landau primeiro dado por ($c_1 = B_0, c_2 = 0$). Neste caso a equação de Schroedinger é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + x \frac{ie\hbar B_0}{m} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{e^2 B_0^2}{2m} x^2 \Psi = E \Psi, \quad (4.78)$$

lembrando que:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad (4.79)$$

a equação (4.78) pode ser reescrita na forma [43]:

$$\left[\frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + x \frac{eB_0}{m} \hat{p}_y + \frac{e^2 B_0^2}{2m} x^2 \right] \Psi = E \Psi, \quad (4.80)$$

ou ainda

$$\left[\frac{1}{2m} (\hat{p}_y - eB_0 x)^2 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \right] \Psi = E \Psi. \quad (4.81)$$

Usando agora o Ansatz $\Psi(x, y) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} k_y y\right) \chi(x)$, obtém-se:

$$\hat{p}_y \Psi = k_y \Psi, \quad \hat{p}_x \Psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} k_y y\right) \left(\frac{\hbar}{i}\right) \frac{d\chi(x)}{dx}, \quad (4.82)$$

e portanto teremos:

$$\left[\frac{1}{2m} (k_y^2 - eB_0 x)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \chi(x) = E \chi(x), \quad (4.83)$$

que é tal que se fizermos a translação:

$$x = \bar{x} + \left(\frac{k_y}{eB_0} \right) \quad (4.84)$$

conseguimos separar as variáveis:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi(\bar{x})}{d\bar{x}^2} + \frac{m}{2} \omega_L^2 \bar{x}^2 \chi(\bar{x}) = E \chi(\bar{x}), \quad (4.85)$$

onde ω_L é a frequência de Laumur.

Da equação acima obtemos o espectro de energia:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_L; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.86)$$

e as autofunções

$$\Psi_{k,n}(x, y) = N \exp\left(\frac{i}{\hbar} k_y y\right) H_n\left(x - \frac{k_y}{eB_0}\right) \exp\left[-\frac{m\omega_L}{2\hbar} \left(x - \frac{k_y}{eB_0}\right)^2\right].$$

A função de onda acima é válida para condição de contorno usual (ou seja, a função de onda se anulando no infinito na direção x) como vimos na seção anterior. Porém para considerar condições de contorno finitas, tiramos proveito de uma simetria das soluções. É fácil ver que se trocarmos k_y por $-k_y$ e simultaneamente x por $-x$, a função de onda muda da seguinte forma $\Psi(-k_y, -x, y) = \pm \Psi(k_y, x, y)$. Isto sugere escrever uma solução mais geral como

$$\Psi(x, y) = A e^{i k_y y} D(x, k) + B e^{-i k_y y} D(-x, -k), \quad (4.87)$$

onde $D(x, k_y)$ é a função parabólica cilíndrica. Como esta função tem a simetria acima, podemos escrever a função de onda como

$$\Psi(x, y) = (A e^{i k_y y} \pm B e^{-i k_y y}) D(x, k_y) \quad (4.88)$$

Estudando primeiro o caso da faixa, consistindo em uma caixa de dimensão finita na direção y e de comprimento infinito na direção de x . Usando o calibre de Landau escolhido acima, vemos que ele adquire uma solução de uma partícula livre em uma caixa na dimensão finita e um oscilador harmônico na coordenada x . Neste caso adquirimos o espectro de energia habitual de um oscilador harmônico (4.86), com um grau de degenerescência definido pelo autovalor k_y . De forma que

$$\Psi(x, y) = \cos(k_y y) H_n\left(x - \frac{k_y}{eB_0}\right) \exp\left[\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\right) \left(x - \frac{k_y}{eB_0}\right)^2\right], \quad (4.89)$$

onde $k_y = \frac{(2n_y+1)\pi}{2b}$ e

$$\Psi(x, y) = \sin(k_y y) H_n\left(x - \frac{k_y}{eB_0}\right) \exp\left[\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\right) \left(x - \frac{k_y}{eB_0}\right)^2\right], \quad (4.90)$$

sendo $k_y = \frac{n_y \pi}{b}$ com $n_y = 0, 1, 2, \dots$ e H_n é o polinômio de Hermite. Se todavia, usarmos o outro calibre de Landau ($c_1 = 0, c_2 = B_0$), as condições de contorno implicam em funções de onda e espectro de energia totalmente diferentes. Neste

calibre obtemos partícula livre na direção x e um oscilador harmônico confinado na direção y .

Para lidar com este tipo de problema, é necessário trabalhar com o problema de um oscilador harmônico em uma caixa [44]. Para isto fizemos um tratamento semelhante ao dos potenciais quase-exatamente solúveis [24]-[26], que nos levaram a obter soluções analiticamente aproximadas para os autovalores do oscilador anarmônico sob condições de contorno usuais [30]. Lembrando que a solução para o oscilador harmônico foi determinada no capítulo 4 desta dissertação pela equação (3.5), podemos escrever a função de onda e o autovalor da energia neste calibre

$$\Psi(x, y) = A e^{ik_x x} D(y, k_x), \quad E_{n_y} = \frac{\pi \hbar^2}{2mb^2} [n_y^2 + k\omega_{by} + g(\omega_{by})]. \quad (4.91)$$

Note que agora temos a degenerescência controlada pelo autovalor contínuo k_x .

É interessante a observação que se usarmos as condições de contorno (4.77), a energia será claramente diferente nas duas possíveis escolhas de gauge de Landau, a menos que trabalhemos em uma caixa quadrada ($a = b$). Nesta última situação teremos o mesmo espectro de ene

No calibre simétrico o potencial vetor tem a seguinte forma [45]

$$\vec{A} = \frac{B_0}{2} (x\hat{y} - y\hat{x}).$$

A equação de Schroedinger para uma partícula no campo magnético uniforme no calibre simétrico é dada por [42]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{ie\hbar B_0}{2m} \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B_0^2}{8m} (x^2 + y^2) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (4.92)$$

fazendo uma rotação dependente do tempo [46]:

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha(t) & \sin \alpha(t) \\ -\sin \alpha(t) & \cos \alpha(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (4.93)$$

com $T = t$, vê-se facilmente que:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos \alpha(t) \frac{\partial}{\partial X} - \sin \alpha(t) \frac{\partial}{\partial Y}, \quad (4.94)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \alpha(t) \frac{\partial}{\partial X} + \cos \alpha(t) \frac{\partial}{\partial Y}. \quad (4.95)$$

Ademais, verifica-se a covariância das quantidades:

$$x^2 + y^2 = X^2 + Y^2, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2}, \quad (4.96)$$

e de (4.93) temos:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha(t) & -\sin \alpha(t) \\ \sin \alpha(t) & \cos \alpha(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}, \quad (4.97)$$

logo:

$$x \frac{\partial}{\partial y} = \cos^2(\alpha X) \frac{\partial}{\partial Y} - \sin^2(\alpha Y) \frac{\partial}{\partial X}, \quad (4.98)$$

$$y \frac{\partial}{\partial x} = -\sin^2(\alpha X) \frac{\partial}{\partial Y} + \cos^2(\alpha Y) \frac{\partial}{\partial X}, \quad (4.99)$$

de modo que o operador abaixo também é covariante:

$$x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = X \frac{\partial}{\partial Y} - Y \frac{\partial}{\partial X} \quad (4.100)$$

Além disso, como a rotação é dependente do tempo, teremos:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T} + \frac{\partial X}{\partial t} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial Y}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Y} \quad (4.101)$$

e portanto

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial T} + \left[-\dot{\alpha} \sin \alpha(t)x + \dot{\alpha} \cos \alpha(t)y \right] \frac{\partial}{\partial X} + \left[-\dot{\alpha} \cos \alpha(t)x - \dot{\alpha} \sin \alpha(t)y \right] \frac{\partial}{\partial Y} \quad (4.102)$$

o que nos leva a

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial T} + \dot{\alpha} \left(Y \frac{\partial}{\partial X} - X \frac{\partial}{\partial Y} \right) \quad (4.103)$$

Assim, voltando à equação de Schroedinger original obtemos:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{ie\hbar B_0}{2m} \left(X \frac{\partial \Psi}{\partial Y} - Y \frac{\partial \Psi}{\partial X} \right) + \frac{e^2 B_0^2}{8m} (X^2 + Y^2) \Psi = \\ = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar \dot{\alpha} \left(Y \frac{\partial}{\partial X} - X \frac{\partial}{\partial Y} \right) \end{aligned} \quad (4.104)$$

ou ainda

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{ie\hbar B_0}{2m} \left(X \frac{\partial \Psi}{\partial Y} - Y \frac{\partial \Psi}{\partial X} \right) + \frac{e^2 B_0^2}{8m} (X^2 + Y^2) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial T} \quad (4.105)$$

Escolhendo $\alpha(t)$, de forma a anular o termo cruzado nas coordenadas, obtemos:

$$\dot{\alpha} = -\frac{eB_0}{2m} \rightarrow \alpha(t) = -\frac{eB_0}{2m} T + C, \quad (4.106)$$

chamando $-\frac{eB_0}{2m}$ de ω , e escolhendo a constante C como zero, uma vez que ela altera apenas a normalização da função de onda, temos $\alpha(t) = \omega t$, o que nos leva à equação de um oscilador isotrópico bidimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{1}{2} m \omega^2 (X^2 + Y^2) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial T}. \quad (4.107)$$

Usando agora a separação de variáveis usual, $\psi(X, Y, t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}Et) \varphi(X, Y)$, chegamos a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{1}{2} m \omega^2 (X^2 + Y^2) \Psi = E \Psi, \quad (4.108)$$

onde $\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2}$. Fazendo em seguida a separação das variáveis espaciais, obtemos dois osciladores tais que

$$\Psi(X, Y) = \varphi(X) \chi(Y) = \varphi[\cos(\omega t)x + \sin(\omega t)y] \chi[-\sin(\omega t)x + \cos(\omega t)y], \quad (4.109)$$

onde $\varphi(X)$ - oscilador harmônico na caixa em X e $\chi(Y)$ - oscilador harmônico na caixa em Y , as quais são soluções do oscilador harmônico com condições de contorno não-triviais. Aqui é importante alertar o leitor que esta solução só é útil no caso de condições de contorno do seguinte tipo:

$$\psi[\cos(\omega t)a + \sin(\omega t)b, y] = 0, \quad \psi[x, -\sin(\omega t)a + \cos(\omega t)b] = 0.$$

Então o espectro de energia no caso de condição de contorno finita em que a função de onda se anula nas paredes será dada pela soma das energias do oscilador harmônico confinado em uma caixa de comprimento a na “direção” X ($E_{OH}(x)$) e o oscilador harmônico confinado em uma caixa de comprimento b na “direção” Y ($E_{OH}(y)$). A energia total é então dada por:

$$E = E_{OH(X)} + E_{OH(Y)}; \quad (4.110)$$

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\pi \hbar^2}{2ma^2} [n_x^2 + k\omega_a + g(\omega_a)] + \frac{\pi \hbar^2}{2mb^2} [n_y^2 + k\omega_b + g(\omega_b)], \quad (4.111)$$

onde $g_n(\omega_i) = C_0(n) \omega_i \exp\left(-\sum_{j=1}^J C_j(n) \omega_i^j\right)$, com $i = a$ ou b ; $\omega_i = \frac{m}{\hbar} \frac{i^2}{4} \omega$ e

(3.13)

Finalmente enfatizamos que a solução anterior para o calibre simétrico, as condições de calibre usadas, nos conduziria às seguintes soluções

$$\Psi(x, y) = D(Y, k) D(X, k), \quad (4.112)$$

a qual, seria útil para algumas condições de contorno dependente do tempo. Esta não é nossa meta neste momento. Alternativamente também poderíamos resolver o problema usando uma transformação de calibre mapeando-o em um dos calibres de Landau. Para isto fazemos a seguinte transformação de gauge

$$\vec{A} = \vec{A}(\vec{r}) - \nabla\varphi(\vec{r}), \quad (4.113)$$

$$\Psi(\vec{r}) \rightarrow \exp\left[\frac{iq\varphi(\vec{r})}{\hbar c}\right] \Psi(\vec{r}), \quad (4.114)$$

tal que:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A}_{GS} = \vec{\nabla} \times \vec{A}_{GL} = \vec{B}, \quad (4.115)$$

onde $\varphi(\vec{r}) = \frac{B_0}{2}xy$. Isto nos mostra que a equação de Schroedinger é invariante sob a transformação de calibre, mas porém nos conduz a dois espectros de energia diferentes, mostrando de um modo mais claro a dependência aparente do calibre nos autovalores de energia, como indicado acima ao resolver os dois possíveis gauges de Landau

Finalmente apresentaremos agora um cálculo alternativo das autofunções deste problema no calibre simétrico. Para isto começamos definindo “coordenadas conformes”:

$$z_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy), \quad z_2 = z_1^*. \quad (4.116)$$



É fácil mostrar que as transformações correspondentes para os momentos são

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_{z_1} + p_{z_2}), \quad p_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_{z_1} - p_{z_2}), \quad (4.117)$$

os quais, depois que cálculos diretos nos conduzem à seguinte hamiltoniana,

$$H = \frac{1}{m} p_{z_1} p_{z_2} + i \omega (z_1 p_{z_1} - z_2 p_{z_2}) + m \omega^2 z_1 z_2, \quad (4.118)$$

e a equação diferencial correspondente

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_1 \partial z_2} - \hbar \omega \left(z_1 \frac{\partial \Psi}{\partial z_1} - z_2 \frac{\partial \Psi}{\partial z_2} \right) + m \omega^2 z_1 z_2 \Psi = E \Psi, \quad (4.119)$$

Agora consideremos um ansatz que leva em conta o comportamento assintótico da função de onda nas condições de contorno,

$$\Psi(z_1, z_2) = \chi(z_1, z_2) e^{-\alpha z_1 z_2}, \quad (4.120)$$

que leva a

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial z_1 \partial z_2} + \hbar \left(\frac{\hbar \alpha}{m} - \omega \right) z_1 \frac{\partial \chi}{\partial z_1} + \hbar \left(\frac{\hbar \alpha}{m} + \omega \right) z_2 \frac{\partial \chi}{\partial z_2} + \\ & + \left(m \omega^2 - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} \right) z_1 z_2 \chi = \left(E - \frac{\hbar^2 \alpha}{m} \right) \chi. \end{aligned} \quad (4.121)$$

Neste ponto, escolhemos α para eliminar o termo com o produto das duas variáveis. Assim escolhemos $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$, o que dá origem a uma equação mais simples

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2 \chi}{\partial z_1 \partial z_2} + 2 \hbar \omega z_2 \frac{\partial \chi}{\partial z_2} = \mathcal{E} \chi, \quad (4.122)$$

onde $\mathcal{E} = E - \hbar \omega$. Finalmente tentaremos desacoplar esta equação que depende de duas variáveis em duas equações de uma variável cada. Para isto usamos outro ansatz

$$\chi(z_1, z_2) = f(z_1) g(u); \quad u \equiv z_1 z_2, \quad (4.123)$$

de forma que podemos obter a seguinte equação

$$-\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{u}{g} \frac{d^2 g}{du^2} \right) - \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{1}{g} \frac{dg}{du} \right) \left(1 + \frac{z}{f} \frac{df}{dz} \right) + 2 \hbar \omega \left(\frac{u}{g} \frac{dg}{du} \right) = \mathcal{E}. \quad (4.124)$$

Para garantir que o lado esquerdo da equação seja constante para qualquer valor das variáveis, temos que impor as seguintes equações diferenciais ordinárias

$$z \frac{df}{dz} = k f, \quad (4.125)$$

$$u \frac{d^2 g}{du^2} + \left[(1+k) - 2 \frac{m\omega}{2\hbar} u \right] \frac{dg}{du} = \frac{m\mathcal{E}}{\hbar^2} g. \quad (4.126)$$

É fácil verificar que a solução para (4.125), a menos de uma constante arbitrária de normalização, é $f(z) = z^k$. Agora podemos reconhecer a equação diferencial para a função hipergeométrica confluyente, com a solução

$$g(u) = {}_1F_1 \left(1+k; \frac{\mathcal{E}}{2\hbar\omega}; \frac{2m\omega}{\hbar} u \right). \quad (4.127)$$

Assim estamos em condições reconstruir a solução em termos das variáveis físicas originais,

$$\Psi(x, y) = \mathcal{N} 2^{-\frac{k}{2}} (x + iy)^k {}_1F_1 \left(1+k; \frac{(E - \hbar\omega)}{2\hbar\omega}; \frac{2m\omega}{\hbar} (x^2 + y^2) \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} (x^2 + y^2)}, \quad (4.128)$$

onde $\mathcal{N}$ é uma constante de normalização. Na realidade, podemos obter soluções mais gerais percebendo que o seguinte tipo de operador de dilatação

$$\hat{D} \equiv z_1 \frac{\partial}{\partial z_1} - z_2 \frac{\partial}{\partial z_2}, \quad (4.129)$$

tem como autofunções

$$\Psi_{k_{z_1} k_{z_2}}(z_1, z_2) = z_1^{k_{z_1}} z_2^{k_{z_2}} g(u), \quad (4.130)$$

com a restrição $k_{z_2} - k_{z_1} \equiv k$. Substituindo estas autofunções na equação diferencial acima, chegamos a

$$u \frac{d^2 g}{du^2} + \left(k_{z_1} + k_{z_2} + 1 - \frac{2m\omega u}{\hbar} \right) \frac{dg}{du} + \left[\frac{k_{z_1} k_{z_2}}{u} \right] g =$$

$$= \left(\frac{m \omega k}{\hbar} - \frac{m E}{\hbar^2} + \frac{m \omega}{\hbar} (k_{z_1} + k_{z_2} + 1) \right) g. \quad (4.131)$$

Note que a principal diferença em relação ao caso anterior é a presença do termo em $k_{z_1} k_{z_2}$, que obviamente desaparece quando uma das constantes é nula. Resolvendo esta equação no caso de condições de contorno triviais, obtém-se a seguinte expressão para o espectro de energia

$$E_n = \hbar \omega [k_{z_1} + k_{z_2} + 2(n+1)] . \quad (4.132)$$

Neste ponto é interessante observar que esta nova solução da partícula carregada no calibre simétrico é apropriada para contornos com simetria radial, como por exemplo produzindo um confinamento dentro de um círculo de raio finito ($x^2 + y^2 \equiv r^2 \equiv r_0^2$). Note porém que esta solução é bastante diferente daquela usada em [47] para a mesma geometria, embora conduza ao mesmo espectro de energia. A diferença é devido a escolha do operador “dilatação” acima como aquele utilizado no conjunto completo de operadores que comutam com a hamiltoniana, em vez de L_z usado naquele trabalho. Comparando com a solução anterior para este mesmo sistema, aparecendo na equação (4.109), é fácil concluir que para cada nova condição de contorno devemos procurar uma função de onda satisfatória. Agora estamos tentando obter uma solução compatível com as mesmas condições usadas nos calibres de Landau acima.

Como, em princípio, o espectro difere em cada uma destas situações, torna-se importante tentar entender como restabelecer a invariância de calibre em tais condições, principalmente porque este tipo de problema poderia aparecer em sistemas físicos importantes tais como o do efeito Hall quântico, ou mesmo em problemas de supercondutividade aniônica. Assim imaginamos que algum tipo de restrição deveria ser imposta, talvez sobre as condições de contorno ou sobre o princípio de acoplamento mínimo, algo como trocar $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e \vec{A} + \vec{\sigma}(x, y, \text{contornos})$. A restrição pode vir da estrutura matemática do espaço de Hilbert. Estamos procurando tais condições de consistência.

Mais adiante apresentaremos uma introdução teórica do problema com condições de contorno periódicas, a qual estudamos com o objetivo de tentar realizar comparações futuras com as previsões da literatura.

Capítulo 3

Susceptibilidade magnética

3.1 Susceptibilidade magnética em condições de contorno triviais

Como já sabemos, a susceptibilidade magnética é uma propriedade intrínseca de um material, que mede a facilidade com que ele se magnetiza em resposta a um campo magnético externo. No caso de um material paramagnético, a magnetização é diretamente proporcional ao campo aplicado, e a susceptibilidade é dada por $\chi = M/H$, onde M é a magnetização e H é o campo magnético. Para um material diamagnético, a magnetização é oposta ao campo aplicado, e a susceptibilidade é negativa. Para um material ferromagnético, a magnetização é muito maior do que a do material paramagnético, e a susceptibilidade é muito maior.

Quando consideramos um material com condições de contorno triviais, a magnetização é dada por $M = \chi H$, onde χ é a susceptibilidade magnética. A susceptibilidade magnética é uma propriedade intrínseca do material, e não depende das condições de contorno. No entanto, a magnetização depende das condições de contorno, e a susceptibilidade é dada por $\chi = M/H$.

Para um material paramagnético, a magnetização é dada por $M = \chi H$, onde χ é a susceptibilidade magnética. A susceptibilidade magnética é uma propriedade intrínseca do material, e não depende das condições de contorno. No entanto, a magnetização depende das condições de contorno, e a susceptibilidade é dada por $\chi = M/H$.

Para um material diamagnético, a magnetização é dada por $M = \chi H$, onde χ é a susceptibilidade magnética. A susceptibilidade magnética é uma propriedade intrínseca do material, e não depende das condições de contorno. No entanto, a magnetização depende das condições de contorno, e a susceptibilidade é dada por $\chi = M/H$.

Capítulo 5

Susceptibilidade magnética

5.1 Susceptibilidade magnética com condições de contorno triviais

Em geral é importante obter previsões de quantidades mensuráveis, a fim de verificar as conseqüências advindas das condições de contorno aqui descritas. Nesta seção vamos buscar tratar o caso da susceptibilidade magnética.

A susceptibilidade por unidade de volume em um sistema é definida como a derivada da magnetização em relação ao campo magnético, ou seja, mede o quanto a magnetização varia com a variação do campo magnético [48], ou seja

$$\chi = \frac{\partial \mu}{\partial B}, \quad (5.1)$$

onde μ é o momento magnético induzido por unidade de volume ou magnetização por unidade de volume ao longo da direção do campo magnético externo [49]:

$$\langle \mu \rangle = \langle \mu_0 N \uparrow - \mu_0 N \downarrow \rangle,$$

$N \uparrow$ é o número de spins para cima e $N \downarrow$ é o número de spins para baixo.

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B},$$

$$\frac{\langle H \rangle}{V} = \frac{B}{V} \langle -\mu_0 N \uparrow - \mu_0 N \downarrow \rangle,$$

$$\mu \equiv \frac{1}{V} \left\langle -\frac{\partial H}{\partial B} \right\rangle, \quad (5.2)$$

onde H é a hamiltoniana do sistema na presença de um campo magnético externo B .

No *ensemble* grã-canônico temos:

$$\mu = kT \frac{\partial}{\partial B} \left(\frac{\log \Xi}{V} \right)_{T,V,z}. \quad (5.3)$$

onde Ξ é a grande função de partição.

Em geral a grande função de partição é

$$\Xi = \sum_N e^{\frac{\mu_q N}{kT}} \sum_j e^{-\beta E_j(N)} \quad (5.4)$$

onde a soma em j deve se restrita aos microestados com um determinado número N de partículas. Essa soma, no entanto, é uma função de partição canônica. Portanto, utilizando a notação $Z = Z(\beta, N)$, para evidenciar a dependência com β e N , também podemos escrever

$$\Xi = \sum_N e^{\beta \mu_q N} Z(\beta, N) \quad (5.5)$$

Para os férmions a grande função de partição é dada por

$$\Xi = \prod_{\lambda} (1 + z e^{-\beta E_{\lambda}}), \quad (5.6)$$

onde $z = e^{\beta \mu_q}$ e é chamado de fugacidade e λ indica a escolha dos números quânticos $\{p_z, n, \alpha\}$ com $\alpha = 1, \dots, g$, e g está definido na equação (4.71). Assim podemos calcular o seu logaritmo:

$$\log \Xi = \sum_{\lambda} \log (1 + ze^{-\beta E_{\lambda}}). \quad (5.7)$$

Como número médio de elétrons é obtido através de:

$$N = \langle N \rangle = z \frac{\partial}{\partial z} \log \Xi. \quad (5.8)$$

chega-se a

$$N = \frac{2gL}{h} \sum_0^{\infty} \int_0^{\infty} dp \frac{e^{-\beta E}}{z^{-1} e^{\beta E(p,j)} + 1}. \quad (5.9)$$

No limite clássico o número médio de elétrons para férmions é:

$$\langle n \rangle_F = \frac{1}{e^{\beta(E_k - \mu)} + 1}. \quad (5.10)$$

Classicamente temos que $\langle n \rangle \rightarrow 0$ e para o contínuo de estados vem que

$$\rightarrow e^{\beta(E_k - \mu)} \rightarrow \infty, \quad \langle n \rangle \rightarrow e^{-\beta(E_k - \mu)}, \quad e^{-\beta\mu} \gg 1, \quad (5.11)$$

o que nos leva finalmente a:

$$e^{\beta\mu} \ll 1 \quad \rightarrow \quad z = e^{\beta\mu} \ll 1. \quad (5.12)$$

Para calcular a magnetização no domínio clássico tomamos o limite para altas temperaturas, de modo que

$$z = e^{\beta\mu} = e^{\frac{\mu}{kT}} \rightarrow 0. \quad (5.13)$$

Assim expandimos as equações em potências de z , e conservamos somente o termo de primeira ordem, de tal forma que obtemos:

$$\log \Xi \simeq \frac{2zgl}{h} \sum_0^{\infty} \int_0^{\infty} dp e^{-\beta E(p,n)} = \frac{zgl}{\lambda} \frac{e^{-x}}{1 - e^{-2x}}, \quad (5.14)$$

tal que

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}} \text{ e } x = \frac{\hbar\omega_0}{2kT} \quad (5.15)$$

Mantendo apenas a menor ordem da contribuição em x :

$$\log \Xi \simeq \frac{zgl}{\lambda} \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{x^2}{6}\right) = \frac{zV}{\lambda^3} \left[1 - \frac{1}{24} \left(\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right)^2\right], \quad (5.16)$$

das equações (5.1) e (5.3) segue que

$$\chi = -\frac{z}{3kT\lambda^3} \left(\frac{q\hbar}{2mc}\right)^2. \quad (5.17)$$

Para eliminar z , notamos de (5.9) que para primeira ordem em z , N é o mesmo que $\log \Xi$. Portanto

$$\frac{N}{V} \approx \frac{z}{\lambda^3}. \quad (5.18)$$

Resolvendo para z e substituindo o resultado dentro de (5.17), obtemos a resposta final

$$z = \lambda^3 \frac{N}{V}, \quad z = \lambda^3 v \quad \rightarrow \quad zv = \lambda^3, \quad (5.19)$$

$$\chi = -\frac{1}{3kTv} \left(\frac{q\hbar}{2mc}\right)^2, \quad (5.20)$$

que obedece a lei de Curie.

5.2 Susceptibilidade magnética com condições de contorno finitas

A teoria é a mesma, os calculos são os mesmos até na substituição da energia da partícula na equação (5.14). Então

$$\log \Xi \simeq \frac{2zgL}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dp e^{-\beta E(p,n)} \quad (5.21)$$

Usando as definições da equação (5.15), teremos

$$\log \Xi \simeq \frac{zgL}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_{OHC}} \quad (5.22)$$

onde E_{OHC} é a energia do oscilador harmônico na caixa.

Desenvolvendo a soma, precisamos lembrar que para grandes valores do número quântico principal, a energia tende para a energia da partícula em uma caixa, então temos

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_{OHC}} \simeq \sum_{n=1}^{20} e^{-\beta E_{OHC}} + \sum_{n=21}^{\infty} e^{-\beta \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} + \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \right]} \quad (5.23)$$

como $\hbar^2 n^2 \ll \hbar n$, fazemos a aproximação:

$$\sum_{n=21}^{\infty} e^{-\beta \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} + \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \right]} \simeq \sum_{n=21}^{\infty} e^{-\beta \left(n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega} = \quad (5.24)$$

$$= e^{-\beta \frac{\hbar \omega}{2}} \sum_{n=21}^{\infty} e^{-\beta n \hbar \omega} = e^{-\beta \frac{\hbar \omega}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta (m+21) \hbar \omega} = \quad (5.25)$$

$$= e^{-\beta \frac{\hbar \omega}{2}} e^{-\beta \hbar \omega 21} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta m \hbar \omega} = e^{-\beta \frac{41 \hbar \omega}{2}} \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \right) \quad (5.26)$$

Com isso teremos:

$$\log \Xi \simeq \frac{zgL}{\lambda} \left(\sum_{n=1}^{20} e^{-\beta E_{OHC}} + \left(\frac{e^{-\beta \frac{41\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right) \right) \quad (5.27)$$

definindo $x \equiv \frac{\beta\hbar\omega}{2}$, teremos:

$$\log \Xi \simeq \frac{zgL}{\lambda} \left(\sum_{n=1}^{20} e^{-\left(\frac{2x}{\hbar\omega}\right)E_{OHC}} + \left(\frac{e^{-41x}}{1 - e^{-2x}} \right) \right) \quad (5.28)$$

Fazendo a aproximação para altas temperaturas novamente, como $x = \frac{\beta\hbar\omega}{2}$, $x \ll 1$; de modo que deveremos manter os termos mais baixos na expressão em x . Expandindo $\left(\frac{e^{-41x}}{1 - e^{-2x}} \right)$, temos

$$\left(\frac{e^{-41x}}{1 - e^{-2x}} \right) \simeq \frac{1}{2x} \left[1 - 40x + \left(\frac{4.799}{6} \right) x^2 - 10.660x^3 \right]. \quad (5.29)$$

Calculando agora a soma $\sum_{n=1}^{20} e^{-\left(\frac{2x}{\hbar\omega}\right)E_{OHC}}$, utilizando o programa para cálculos algébricos Mathemática, e em seguida tomando o logaritmo de Ξ , obtemos μ , a partir do qual finalmente obtemos χ , o qual é apresentado abaixo:

$$\chi = \frac{z}{\lambda^3} \left(-0.00383267 + \frac{32.4142}{kT} \right) \left(\frac{q}{mc} \right)^2. \quad (5.30)$$

Da mesma forma que no caso de condições de contorno triviais, eliminamos o z usando a equação (5.18) e resolvemos para z , usando a equação (5.19), obtemos então a susceptibilidade:

$$\chi = \frac{1}{kT v} \left(-0.00383267 + \frac{32.4142}{kT} \right) \left(\frac{q}{mc} \right)^2. \quad (5.31)$$

A partir do resultado acima, vemos que aparece o termo correspondente à solução do caso com condição de contorno trivial, qual seja, a parte que cai com o inverso da temperatura, mais uma pequena correção independente da temperatura. Pode-se esperar então que haja possibilidade de observação das correções a partir de temperaturas suficientemente altas, de modo que o segundo termo da expressão seja da ordem do primeiro.

Capítulo 6

CONCLUSÃO

Nesta dissertação apresentamos uma discussão do efeito do confinamento em uma região finita do espaço em sistemas quânticos. Particularmente desenvolvemos um método de aproximação que parte de soluções exatas para determinados valores dos parâmetros do potencial, comportamento análogo ao dos chamados potenciais quase-exatamente solúveis e ajustamos funções analíticas aproximadas baseadas em comportamentos assintóticos do sistema. Como um primeiro exemplo de aplicação do método, tratamos do caso do oscilador harmônico unidimensional em uma caixa de paredes impenetráveis.

Com relação ao caso da partícula sob a ação do potencial de Coulomb e confinada em uma região finita do espaço, obtivemos um resultado interessante onde observamos a quebra de degenerescência do espectro de energia a qual associamos à quebra da simetria relacionada à conservação do vetor de Runge-Lenz.

Pode-se ainda verificar que no caso de condições de contorno finitas, apesar dos operadores de simetria ainda comutarem, formando um conjunto completo de operadores que comutam entre si (C.C.O.C), é necessário um estudo mais meticuloso com relação à base comum de autofunções. Acreditamos que isto esteja relacionado às possíveis quebras de degenerescência existentes em tais casos, o que aliás seria uma outra forma de entender a quebra da degenerescência no caso do potencial de Coulomb. Seria interessante estudar com um pouco mais de profundidade esta questão.

Estudamos aqui o problema da partícula carregada no campo magnético



homogêneo com condições de contorno finitas e vimos que este problema pode ser resolvido no calibre simétrico e nos calibres de Landau, para cada calibre obtivemos um espectro de energia diferente, o que é realmente surpreendente. Este talvez seja o resultado mais estranho surgido durante o nosso estudo e que, certamente, merece uma tentativa de melhor entendimento, pois na literatura, como já mencionamos isso não ocorre. Procuramos ainda fazer uma previsão de possíveis efeitos mensuráveis do confinamento, em especial trabalhamos com o caso da susceptibilidade magnética, que todavia padece do mal surgido no estudo da dependência de calibre, de modo que para ser melhor entendido precisa de uma solução a contento daquele problema. Um outro estudo interessante que começamos a fazer ainda durante o desenvolvimento desta dissertação, foi o do caso do oscilador harmônico sob condições de contorno periódicas. Este seria um caso que nos daria a oportunidade de avaliar as possíveis alterações em quantidades mensuráveis, como por exemplo em bandas de condução entre outras. Isto ocorreria em decorrência da inclusão de efeitos das condições de contorno de uma forma geral. Todavia o caso mais importante a ser estudado, seria justamente o caso da influência de campos eletromagnéticos, o que novamente nos reporta ao problema da ambigüidade ainda não resolvida no calibre. Assim este é certamente um dos problemas que deveremos nos debruçar em um futuro próximo.



Apêndice A

Bandas de Energia

Estudando a partícula carregada na presença de um campo magnético homogêneo sob condições de contorno periódicas, vê-se que para podermos resolver esse problema temos que ter um potencial periódico. Para isso começamos a estudar bandas de energia, funções de Bloch, modelo de Kronig-Penney e alguns tópicos da física do estado sólido. Abaixo apresentamos uma introdução ao tema [50], [51].

O modelo de elétron livre de metais nos dá uma boa aproximação para propriedades como: calor específico, condutividade térmica, condutividade elétrica, susceptibilidade magnética e eletrodinâmica dos metais. Mas não nos ajuda a responder outras perguntas relevantes como a distinção entre metais, semimetais, semicondutores, e isolantes; a ocorrência de valores positivos do coeficiente de Hall; a relação dos elétrons de condução no metal com os elétrons de valência dos átomos livres e muitas propriedades de transporte, particularmente transporte magnético. Necessita-se de uma teoria mais elaborada para atingir este objetivo.

A resistividade elétrica de um metal puro pode ser muito baixa, algo da ordem de 10^{-10} ohm-cm a uma temperatura de 1K, sem levar em conta a possibilidade de supercondutividade. A resistividade de um bom isolante pode ser tão alta quanto 10^{22} ohm-cm. Esta faixa de 10^{32} pode ser a mais larga de quaisquer propriedades físicas comuns de sólidos.

Todo sólido contém elétrons. A pergunta importante para a condutividade elétrica é como os elétrons respondem a um campo elétrico aplicado. Os



elétrons em cristais são organizados em faixas de energia separadas em regiões em que não existe nenhum orbital de elétron tipo onda. Tais regiões proibidas de energia são chamadas bandas de energia, e são o resultado da interação do elétron de condução com a parte interior do cristal.

O cristal comporta-se como um isolante se as bandas de energia permitidas estiverem totalmente cheias ou totalmente vazias, para isto nenhum elétron pode ser afetado por um campo elétrico. O cristal comporta-se como um metal se uma ou mais bandas estiverem parcialmente cheias, entre 10% e 90%. O cristal é um semicondutor ou um semimetal se uma ou duas bandas estiverem ligeiramente cheias ou ligeiramente vazias.

Para entender a diferença entre isolantes e condutores, temos que estender o modelo do elétron livre para levar em conta a periodicidade da rede do sólido. A consequência mais importante é o aparecimento das bandas de energia.

Existem muitas outras propriedades bastante interessantes de elétrons em cristais. Uma delas é a forma como eles respondem a campos elétricos ou magnéticos externos aplicados. Ocorre como se os elétrons possuissem uma massa efetiva m^* , que pode ser maior ou menor que a massa do elétron livre, ou até mesmo negativa. Diga-se de passagem, esta é uma propriedade importante para entender a existência de sistemas como os chamados pontos quânticos [52].

A.1 Modelo do elétron quase livre

No modelo do elétron livre os valores de energia permitidos são distribuídos continuamente entre zero a infinito [50], tendo sua energia dada por:

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (\text{A.1})$$

sendo que, para condições de contorno periódicas, sobre um cubo de lado L ,

$$k_x, k_y, k_z = 0, \pm \frac{2\pi}{L}, \pm \frac{4\pi}{L}, \dots, \quad (\text{A.2})$$



a função de onda do elétron livre possui a forma usual

$$\Psi_k(r) = \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}); \quad (\text{A.3})$$

que representam ondas que se propagam com momento $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

A estrutura de banda de um cristal pode ser explicada freqüentemente pelo modelo do elétron quase-livre no qual os elétrons da banda são tratados como fruto de uma perturbação fraca produzida pelo potencial periódico. Este modelo dá conta da maioria das perguntas qualitativas sobre o comportamento de elétrons em metais.

Sabemos que reflexão de Bragg é uma característica de propagação de onda em cristais. A reflexão de Bragg de ondas de elétron em cristais é a causa das bandas de energia. (A reflexão de Bragg faz com que soluções tipo onda da equação de Schroedinger não existam). As bandas de energia têm um papel decisivo na determinação se um sólido vai ser um isolante ou um condutor.

Vamos explicar fisicamente a origem das bandas de energia através do problema simples de um sólido linear com espaçamento de rede a . A condição de Bragg $(k + G)^2 = K^2$ para a difração de uma onda do autovetor $\vec{k}$ se torna em uma dimensão

$$k = \pm \frac{1}{2} G = \pm \frac{n\pi}{a} \quad (\text{A.4})$$

sendo $G = 2\pi n/a$ um vetor recíproco da rede e n um inteiro. As primeiras reflexões e a primeira banda de energia ocorre em $k = \pm\pi/a$. A região no espaço $\vec{k}$ entre $-\pi/a$ e π/a é a primeira zona Brillouin da rede. Outras bandas de energia ocorrem para outros valores de n inteiro.

As funções de onda em $k = \pm\pi/a$ não são ondas que representam elétrons livres. Para estes valores especiais de k as funções de onda são compostas de partes iguais de ondas que se propagam para a direita e para a esquerda. Quando a condição da reflexão de Bragg $k = \pm\pi/a$ é satisfeita pelo autovetor, uma onda que se propaga para a direita tem reflexão de Bragg propagando-se à esquerda, e

vice-versa. Cada reflexão de Bragg subsequente inverterá o sentido de propagação da onda. Uma onda que não se propaga nem para a direita nem para a esquerda é uma onda estacionária, e portanto teremos elétrons que não poderão conduzir corrente elétrica. O estado independente do tempo é representado por ondas estacionárias. Podemos formar duas ondas estacionárias diferentes dos dois tipos $\exp(\pm i\pi x/a)$, isto é

$$\Psi(+) = \exp(i\pi x/a) + \exp(-i\pi x/a) = 2 \cos(\pi x/a);$$

$$\Psi(-) = \exp(i\pi x/a) - \exp(-i\pi x/a) = 2i \sin(\pi x/a). \quad (\text{A.5})$$

As ondas estacionárias são compostas por $\Psi(+)$ ou $\Psi(-)$ de acordo com sua paridade. Estes dois tipos de ondas estacionárias são compostas de ondas se propagando com intensidades iguais para a direita e para a esquerda.

A.2 Origem das bandas de energia

As duas funções de onda estacionárias $\Psi(+)$ e $\Psi(-)$ acumulam elétrons em regiões diferentes, conseqüentemente têm valores diferentes de energia potencial. A densidade de probabilidade ρ de uma partícula é $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$. Para uma onda pura propagando-se $\exp(i\pi x/a)$, temos $\rho = \exp(-ikx) \cdot \exp(ikx) = 1$, de forma que a densidade de carga é constante. A densidade de carga não é constante para combinações lineares de ondas planas. Considere a onda estacionária $\Psi(+)$ em (5); para a qual tem-se que

$$\rho(+) = |\Psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x/a, \quad (\text{A.6})$$

o que implica no acúmulo de elétrons nos íons positivos centrados em $x = 0, a, 2a, \dots$, onde a energia potencial é mais baixa.

Têm-se a variação da energia potencial eletrostática de um elétron de condução no campo do interior dos íons positivos. O interior do íon suporta uma carga

positiva líquida porque os átomos são ionizados no metal, como os elétrons de valência para formar a faixa de condução. A energia potencial de um elétron no campo de um íon positivo é negativa, de forma que a força entre eles é atrativa.

Para a outra onda estacionária $\Psi(-)$ a densidade de probabilidade é dada por

$$\rho(-) = |\Psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a, \quad (\text{A.7})$$

o que implica na concentração de elétrons fora do íon. Têm-se também a concentração de elétron para ondas estacionárias $\Psi(+)$, $\Psi(-)$, e para uma onda que se propaga.

Quando calculamos a média ou valores esperados da energia potencial sobre estas três distribuições de carga, encontramos que a energia potencial $\rho(+)$ é menor que a da onda que se propaga, ao passo que a energia potencial $\rho(-)$ é maior. Temos então uma banda de energia de largura E_g se as energias de $\rho(-)$ e $\rho(+)$ diferirem por E_g .

A.3 Magnitude das bandas de energia

As funções de onda da zona de Brillouin com condições de contorno em $k = \pi/a$ são dadas por $\sqrt{2} \cos(\pi x/a)$ e $\sqrt{2} \sin(\pi x/a)$, normalizadas em comprimentos de onda. Podemos escrever a energia potencial de um elétron no cristal no ponto x como

$$U(x) = U \cos(2\pi x/a). \quad (\text{A.8})$$

Assim a energia de primeira ordem difere entre os dois estados de onda estacionária é obtida através da equação:

$$E_g = \int_0^1 dx U(x) [|\Psi(+)|^2 - |\Psi(-)|^2], \quad (\text{A.9})$$

logo

$$E_g = 2 \int dx U \cos(2\pi x/a) (\cos^2 \pi x/a - \sin^2 \pi x/a) = U. \quad (\text{A.10})$$

Podemos ver que a abertura é igual a componente de Fourier do potencial cristalino.

A.4 Funções de Bloch

Bloch demonstrou um importante teorema que diz que as soluções da equação de Schroedinger para um potencial periódico devem ser da forma [50]:

$$\Psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{A.11})$$

onde $u_k(\vec{r})$ deve ter a periodicidade da rede, ou seja $u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r} + \vec{T})$. O resultado acima é conhecido como teorema de Bloch, no qual as autofunções da equação de onda para um potencial periódico são o produto de uma onda plana $\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})$ por uma função $u_k(\vec{r})$ com a periodicidade da rede cristalina.

Uma função de onda de um elétron da forma (A.11) é chamada função de Bloch e pode ser decomposta em uma soma de ondas que se propagam. A função de Bloch pode ser decomposta em pacotes de onda localizados para representar elétrons que se propagam livremente pelo campo do potencial do interior do íon.

Vejamos então uma demonstração deste teorema no caso particular em que Ψ_k não é degenerada, para isso consideremos N pontos de uma rede em um anel de comprimento Na . A energia potencial é periódica em a , tal que $U(x) = U(x + sa)$, onde s é um número inteiro. Tomemos como guia a simetria do anel, a fim de procurar soluções da equação de onda tal que

$$\Psi(x + a) = C\Psi(x), \quad (\text{A.12})$$

onde C é uma constante. Então, em volta do anel

$$\Psi(x + Na) = C^N \Psi(x), \quad (\text{A.13})$$

e portanto obtemos que

$$C = \exp\left(\frac{i2\pi s}{N}\right); \quad s = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (\text{A.14})$$

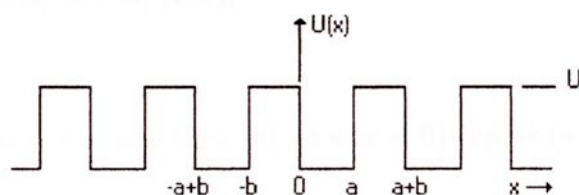
Podemos ver então que a função de onda

$$\Psi(x) = u_k(x) \exp\left(\frac{i2\pi sx}{N}\right), \quad (\text{A.15})$$

satisfaz (A.12), contanto que $u_k(x)$ tenha a periodicidade imposta acima, de forma que $u_k(x) = u_k(x + a)$, com $k = \frac{2\pi s}{Na}$, temos o resultado de Bloch (A.11).

A.5 Modelo de Kronig-Penney

Um exemplo de potencial periódico no qual a equação de onda pode ser resolvida em termos de funções elementares é a do poço de potencial quadrado da figura abaixo.



poço de potencial quadrado periódico

A equação de onda é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + U(x) \Psi = \epsilon \Psi, \quad (\text{A.16})$$

onde $U(x)$ é a energia potencial e ϵ é o autovalor da energia.

Na região $0 < x < a$ na qual $U = 0$, a autofunção é uma combinação linear

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (\text{A.17})$$

das ondas planas que se propagam para a direita e para a esquerda, com energia

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{A.18})$$

Na região $-b < x < 0$ dentro da barreira a solução é não oscilante, ou seja

$$\Psi(x) = Ce^{Qx} + De^{-Qx}, \quad (\text{A.19})$$

onde

$$U_0 - \epsilon = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}. \quad (\text{A.20})$$

Queremos a solução completa para obter a forma de Bloch (A.11). Assim a solução na região $a < x < a + b$ deve estar relacionada à solução na região $-b < x < 0$ pelo teorema de Bloch:

$$\Psi(a < x < a + b) = \Psi(-b < x < 0) \exp[ik(a + b)], \quad (\text{A.21})$$

que serve para definir um autovetor k usado como um índice para indentificar a solução.

As constantes de integração são escolhidas de tal forma que Ψ e $d\Psi/dx$ sejam contínuas em $x = 0$ e $x = a$. Estas são as condições de contorno usuais na mecânica quântica em problemas que envolvem poços de potenciais quadrados. Em $x = 0$,

$$A + B = C + D,$$



$$ik(A - b) = Q(C - D). \quad (\text{A.22})$$

Já em $x = a$, utilizando (A.21) para $\Psi(a)$ em termos de $\Psi(-b)$,

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = (Ce^{-Qb} + De^{Qb})e^{ik(a+b)}, \quad (\text{A.23})$$

$$ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = Q(Ce^{-Qb} - De^{Qb})e^{ik(a+b)}. \quad (\text{A.24})$$

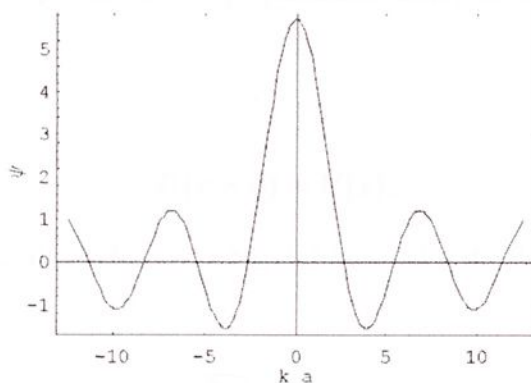
As quatro equações acima só têm solução caso o determinante dos coeficientes seja nulo, ou ainda se

$$\left[\frac{Q^2 - k^2}{2Qk} \right] \sinh(Qb) \sin(ka) + \cosh(Qb) \cos(ka) = \cos[k(a+b)]. \quad (\text{A.25})$$

O resultado pode ser simplificado se representarmos o potencial pela função delta obtida quando tomamos o limite $b \rightarrow 0$ e $U_0 \rightarrow \infty$ de tal modo que o produto $Q^2ba/2$, seja uma quantidade finita $Q^2ba/2 = P$. Neste limite $Q \gg k$ e $Qb \ll 1$. Então a equação (A.25) reduz-se a

$$(P/ka) \sin(ka) + \cos(ka) = \cos(ka) \quad (\text{A.26})$$

Os valores de k para que esta equação tenha solução são representados na figura A.2, para o caso particular em que $P = 3\pi/2$.



Exemplo típico do aparecimento das bandas de energia na equação de banda

Os valores correspondentes da energia são plotados na figura A.3. Observe o surgimento das bandas de energia nas regiões de contorno.

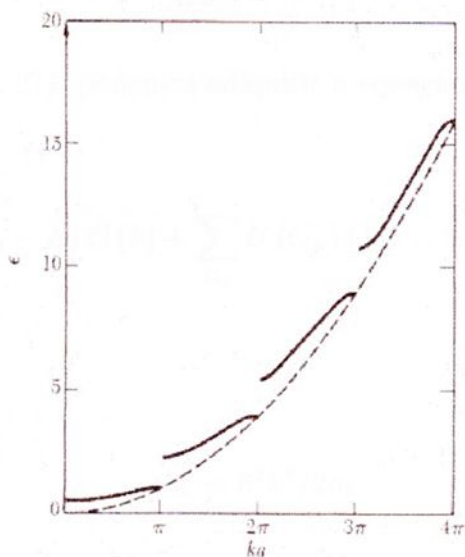


Gráfico da energia com o aparecimento das bandas

A.6 Modelo Kronig-Penney no espaço recíproco periódico

A equação de Schroedinger para um sólido unidimensional é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x) \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (\text{A.27})$$

Vamos agora resolver o modelo acima diretamente no espaço recíproco [51]. Lembrando que o potencial $U(x)$ é periódico com a constante de espaçamento de rede a , ou seja

$$U(x+a) = U(x). \quad (\text{A.28})$$

Expandindo a função de onda e o potencial em séries de Fourier,

$$\Psi_k(x) = \sum_k C(k) \exp(ikx), \quad (\text{A.29})$$

$$U(x) = \sum_{G_n} U(G_n) \exp(iG_n x) \quad (\text{A.30})$$

e substituindo em (A.27), podemos adiquirir a equação central facilmente

$$(\lambda_k - E) C(k) + \sum_{G_n} U(G_n) C(k - G_n) = 0, \quad (\text{A.31})$$

onde

$$\lambda_k = \hbar^2 k^2 / 2m,$$

e

$$G_n = \pm 2\pi n/a \quad n = 0, 1, 2, \dots, \infty, \quad (\text{A.32})$$

são os vetores da rede recíproca para o sólido unidimensional. Uma versão modificada do modelo de Kronig-Penney, também conhecida como ‘‘pente de Dirac’’ é descrito pelo potencial

$$U(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} (\hbar^2 P / ma) \delta(x - la), \quad (\text{A.33})$$

onde P caracteriza a intensidade de cada função delta. Pode-se mostrar facilmente que as componentes de Fourier são iguais a $\hbar^2 P / ma$. Assim a equação central adquire a forma

$$(\lambda_k - E) C(k) + \frac{\hbar^2 P}{ma} \sum_{G_n} C(k - G_n) = 0, \quad (\text{A.34})$$

Chamando $f(k)$ a soma em G_n e rearranjando obtem-se

$$C(k) = -2Pf(k)a^{-2} / (k^2 - 2mE/\hbar^2). \quad (\text{A.35})$$

Nesta equação, trocou-se k por $k - G_n$ e somou-se sobre G_n . Para isso é importante notar que

$$f(k - G_n) = \sum_{G_n'} C(k - G_n - G_n') = \sum_{G_n'} C(k - G_n') = f(k) \quad (\text{A.36})$$

Usando a igualdade acima e utilizando que $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ chega-se a equação central [51]:

$$-a^2/2P = \sum_{G_n} [(k - G_n)^2 - K^2]^{-1}. \quad (\text{A.37})$$

A soma infinita em (A.37) é semelhante às somas das frequências que ocorrem na teoria de temperatura finita que usa funções de Green. Para fazer esta soma, divide-se cada termo em frações parciais e usa-se a expansão:

$$\pi \cot x = \left(\frac{\pi}{x}\right) + 2\pi x \sum_{n=1}^{\infty} (x^2 - n^2 \pi^2)^{-1} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{n+x}{\pi}\right)^{-1}, \quad (\text{A.38})$$

obtendo-se assim que

$$\sum_{G_n} [(k - G_n)^2 - K^2]^{-1} = \quad (\text{A.39})$$

$$= \frac{1}{2K} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{k - K - 2\pi n}{a}\right)^{-1} - \left(\frac{k + K - 2\pi n}{a}\right)^{-1} \right] \quad (\text{A.40})$$

$$= \frac{a}{4K} \left\{ \cot \left[\left(\frac{ka - Ka}{2}\right) \right] - \cot \left(\frac{ka - Ka}{2}\right) \right\} \quad (\text{A.41})$$

$$= \frac{a}{2K} \sin Ka / (\cos Ka - \cos ka), \quad (\text{A.42})$$

que quando substituída em (A.37) leva a equação transcendental do modelo:

$$\cos ka = \cos Ka + (P/Ka) \sin Ka. \quad (\text{A.43})$$

Para estudarmos o tratamento acima para o caso do potencial do campo magnético homogêneo sob condições de contorno periódicas, devemos lembrar que por exemplo no calibre simétrico, precisamos repetir os cálculos acima para o caso do oscilador harmônico periódico. Para isso deveremos determinar $U(G_n)$ e buscar a solução da equação (A.31). Neste caso porém a equação fica consideravelmente mais complexa e ainda não fomos capazes de resolvê-la a contento, de forma que este cálculo ainda está em andamento.

Bibliografia

- [1] F. C. Auluck, Proc. Natl. Inst. Sci. India. **7**, (1941)133.
- [2] S. Chandrasekar, Astroph. J. **97**, (1943) 263.
- [3] S. R. De Groot e C. A. Ten Seldam, J. Math. Physics (Utrecht) **4**, (1937) 981.
- [4] P. O. Fröman, S. Yngve e N. Fröman, J. Math. Physics. **28**, (1987) 1813.
- [5] M. A. Reed, Sci. Am. **268**, (1993) 118.
- [6] Elso Drigo Filho, Regina Maria Ricotta, Phys. Lett. A **299**, (2002) 137.
- [7] M. Marroco, M. Weidinger, R. J. Sang e H. Walther, Phys. Rev. Lett. **81**, (1998) 5784.
- [8] H. B. G. Casimir, Proc. K. Ned. Akad. Wet. **51**, (1948) 793.
- [9] M. V. Cougo-Pinto, C. Farinta, J. F. M. Mendes, A. C. Tort, B. J. P. **31**, (2001) 45.
- [10] J. D. Jackson, *Eletrodinâmica Clássica*, Editora Guanabara Dois, 1983.
- [11] R. Eisberg e R. Resnick, *Física Quântica*, Editora Campus, 1979.
- [12] S. Gasiorowicz, *Física Quântica*, Editora Campus, 1979.
- [13] F. M. Fernandez e E. A. Castro, Phys. Rev. A **46** (1992) 7288.
- [14] F. M. Fernandez, Phys. Rev. A **48** (1993) 189.
- [15] K. R. Brownstein, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1427.



- [16] N. Aquino, E. Castaño, G. Campoy e V. Granados, Eur. J. Phys. **22** (2001) 645.
- [17] R. Dutt, A. Mukherjee e Y. P. Varshni, Phys. Rev. A **52** (1995) 1750.
- [18] H. Kleinert, A. Chervyakov e B. Harnprecht, Phys. Lett. A **260** (1999) 182.
- [19] W. Janke, H. Kleinert e H. Meinhardt, Phys. Lett. B **217** (1989) 525.
- [20] R. R. Netz e R. Lipowski, Europhys. Lett. **29** (1995) 345.
- [21] H. Kleinert, Phys. Lett. A **257** (1999) 269.
- [22] M. Bachmann, H. Kleinert and A. Pelster, Phys. Lett. A **261** (1999) 127.
- [23] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, Editora McGraw-Hill Book Company e Kogakusha Company, 1949.
- [24] M. A. Shiffman, Int. J. Mod. Phys. A **4** (1989) 2897 e **4** (1989) 3305.
- [25] A. de Souza Dutra e H. Boschi Filho, Phys. Rev. A **44** (1991) 4721.
- [26] A. G. Ushveridze, *Quasi-Exactly Solvable Models in Quantum Mechanics*, Institute of Physics, Bristol, 1994, e referências contidas neste livro.
- [27] V. C. Aguilara-Navarro, H. Iwamoto, E. Ley Koo e A. H. Zimmerman, Il Nuovo Cimento **62** (1981) 91.
- [28] S. Goldman e C. Joslin, J. Phys. Chem. **96** (1992) 6021.
- [29] J. L. Marin e S. A. Cruz, Am J. Phys. **56** (1988) 1134.
- [30] A. de Souza Dutra, A. S. de Castro e H. Boschi Filho, Phys. Rev. A **51** (1995) 3480.
- [31] A. S. de Castro e A. de Souza Dutra, Phys. Lett. A **269** (2000) 281.
- [32] M. Abramowitz e I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Editora Dover Publicações, Inc., New York., 1964.



- [33] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* - segunda edição, John Wiley & Sons, New York, 1970.
- [34] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York, 1990.
- [35] B. Hu, B. Li, J. Li e Y. Gu, Phys. Rev. Lett. **82**, (1999) 4224.
- [36] R. Razavy, Phys. Rev. A **44** (1991) 2384.
- [37] L. S. Brown, Phys. Rev. Lett. **66** (1991) 527.
- [38] A. Marchewka and Z. Schuss, Phys. Rev. A **61** (2000) 2107.
- [39] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Second Edition, Editora John Wiley & Sons, 1987.
- [40] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 2nd edition, Editora Addison-Wesley Publishing Company, 1991.
- [41] I. Y. Dodin and N. J. Fisch, Phys. Rev. E **64** (2001) 016405.
- [42] L. Landau e E. Lifshitz, *Física Teórica*, volume 3, Tomo 1, Editora Mir Moscou, 1985.
- [43] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, 1953.
- [44] A. de Souza Dutra, V. G. C. S. dos Santos e A. M. Stucchi, hep-th/0202046. Submetido para publicação.
- [45] J. J. Sakurai, *Advanced Quantum-Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, 1967.
- [46] C. Farina e A. de Souza Dutra, Phys. Lett. A **123** (1987) 297; **156** (1991) 371.
- [47] R. Rosas, R. Riera, J. L. Marín e H. León, Am. J. Phys. **68** (2000) 835.

- [48] J. R. Reitz, F. J. Milford e R W. Christy, *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*, Editora Campus, 1982.
- [49] S. R. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, Editora Universidade de São Paulo, 1997.
- [50] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, septuagésima edição, Editora John Wiley & Sons, Inc, 1996.
- [51] Surjit Singh, Am. J. Phys. **51**(1983), 179.
- [52] M. A. Reed, Sci. Am., **118** (1993), 118.



