

# Poço quadrado quântico finito e método de fatorização

(*Quantum finite square well potential and factorization method*)

G.B. Freitas<sup>1</sup>, R.G. Veigas e E. Drigo Filho

*Departamento de Física, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas,  
Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, São José do Rio Preto, SP, Brasil*  
Recebido em 14/7/2009; Revisado em 31/8/2009; Aceito em 14/9/2009; Publicado em 26/3/2010

O sistema constituído de uma partícula sujeita a uma poço de potencial quadrado quântico finito é muito explorado em estudos iniciais de mecânica quântica e se mostra bastante útil para descrever sistemas confinados. Neste artigo mostra-se uma maneira alternativa, através do método de fatorização, para determinar as autofunções e os autovalores de energia para o sistema.

**Palavras-chave:** método de fatorização, potencial quadrado finito, equação de Ricatti, autofunções.

The system consisting of a particle subject to a quantum finite square well potential is extensively explored in initial studies of quantum mechanics and it is shown to be quite useful in describing confined systems. In this article we present an alternative way, through the Factorization Method, for determining the eigenfunctions and the energy eigenvalues for the system.

**Keywords:** factorization method, finite square well potential, Ricatti equation, eigenfunctions.

## 1. Introdução

Uma partícula sujeita ao potencial do poço quadrado quântico finito unidimensional é um problema bastante explorado em livros textos de mecânica quântica. Nesse sistema é possível observar várias propriedades importantes para sistemas quânticos, por exemplo a discretização da energia. Ele também é útil para descrever partículas confinadas. Em termos experimentais, a melhoria das técnicas de crescimento de cristais, tais como a Epitaxia por Feixe Molecular (MBE) [1], torna possível fabricar estruturas semicondutoras geralmente constituídas de GaAs (arseneto de gálio) através do confinamento de elétrons em poços de potencial quadrados. Outra aplicação para esse potencial consiste em descrever um elétron numa molécula linear como o acetileno (H-C=C-H).

Tradicionalmente em livros de mecânica quântica [2, 3] o problema do poço de potencial quadrado quântico finito é tratado resolvendo diretamente a equação de Schrödinger, ou seja, determinando as autofunções através da resolução direta dessa equação diferencial de segunda ordem. Os autovalores de energia são determinados através de métodos numéricos, resolvendo-se uma equação transcendental. No presente trabalho é proposto o uso do método de fatorização para a solução desse problema. Como esperado, os resultados são

análogos aqueles obtidos por outros métodos.

O método de fatorização, introduzido por Schrödinger [4], consiste em fatorizar o operador hamiltoniano, passando a analisar uma equação diferencial de primeira ordem ao invés de uma de segunda ordem. Alguns sistemas já foram estudados através dessa abordagem, por exemplo, o oscilador harmônico [4]. Entretanto, apesar da simplicidade matemática, o potencial quadrado não tem sido tratado nesse contexto.

O presente trabalho está dividido em seções. Na seção 2 o método de fatorização é introduzido. Na seção 3 o problema específico da partícula em uma caixa é estudado e a solução geral da equação de Schrödinger é apresentada. Alguns resultados numéricos são também mostrados nessa seção. Por fim, as conclusões do trabalho são indicadas na seção 4.

## 2. O método de fatorização

O método de fatorização foi introduzido por Schrödinger [4] (uma revisão recente sobre o tema pode ser encontrada na Ref. [5]) e consiste em fatorizar operadores diferenciais de segunda ordem.

Este método pode ser utilizado para resolver a equação de Schrödinger e determinar os autovalores de energias para sistemas quânticos. Essa equação em uma dimensão é escrita da seguinte forma

<sup>1</sup>E-mail: freitas\_gb@yahoo.com.br.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = \epsilon\psi(x), \quad (1)$$

sendo que  $V(x)$  representa o potencial,  $\psi(x)$  a autofunção e  $\epsilon$  o autovalor de energia. Por simplicidade, adota-se  $\hbar = 2m = 1$ . O lado esquerdo da equação compreende o produto do operador hamiltoniano pela função  $\psi(x)$ . Outra maneira de se escrever a Eq. (1) é

$$H\psi(x) = \epsilon\psi(x). \quad (2)$$

Quando o método de fatorização é utilizado para obter soluções da equação de Schrödinger, o hamiltoniano é substituído pela combinação de dois operadores diferenciais de primeira ordem. Assim, dado um operador diferencial de segunda ordem, o objetivo do método é encontrar dois operadores

$$A = \frac{d}{dx} + \beta(x) \quad e \quad A^\dagger = -\frac{d}{dx} + \beta(x), \quad (3)$$

tal que o hamiltoniano possa ser escrito como

$$H = \frac{d^2}{dx^2} + V(x) = A^\dagger A + \epsilon, \quad (4)$$

onde  $\epsilon$  é a energia de fatorização. Substituindo a Eq. (3) na Eq. (4), tem-se a seguinte equação de Ricatti

$$\beta^2(x) - \beta'(x) + \epsilon = V(x), \quad (5)$$

onde  $\beta'(x)$  é a derivada de primeira ordem da função  $\beta(x)$ . Uma vez encontrada a solução da Eq. (5), a função  $\beta(x)$  leva às autofunções [5, 6] através de

$$\psi(x) \propto e^{-\int^x \beta(y) dy}. \quad (6)$$

### 3. O poço de potencial quântico quadrado finito

O potencial a ser analisado possui a forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{se } x \geq a/2 \\ 0, & \text{se } -a/2 < x < a/2, \\ V_0, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases} \quad (7)$$

podendo ser representado graficamente através da Fig. 1.

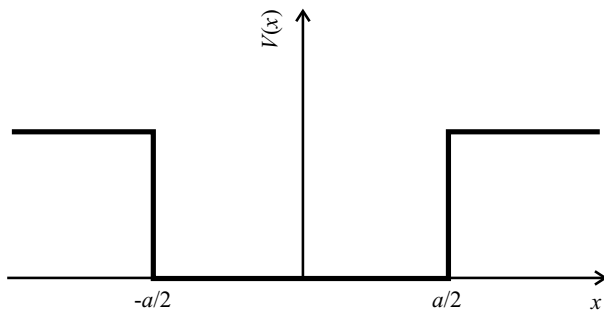


Figura 1 - Representação gráfica para o potencial quântico quadrado finito.

Neste problema algumas condições sobre a autofunção tem que ser consideradas, especificamente a autofunção e sua derivada devem ser contínuas em  $x = -a/2$  e  $x = a/2$ . Além disso, para que essas funções sejam normalizáveis é necessário que a condição

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0 \quad (8)$$

seja satisfeita.

#### 3.1. Cálculo das autofunções e níveis de energia

Quando tem-se  $x \geq a/2$  ou  $x \leq -a/2$  o hamiltoniano do sistema se resume a

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0, \quad (9)$$

que fatorizado conduz à seguinte equação de Ricatti como indicado na Eq. (5)

$$\beta^2(x) - \beta'(x) + \epsilon = V_0. \quad (10)$$

As soluções da Eq. (10) que satisfazem as condições de contorno (8) do problema são

$$\beta(x) = \begin{cases} c, & \text{se } x \geq a/2 \\ -c, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases}, \quad (11)$$

onde  $c$  é uma constante arbitrária. Substituindo o valor de  $\beta(x)$  dado pela Eq. (11) na Eq. (10) obtém-se

$$\epsilon = V_0 - c^2, \quad (12)$$

e as autofunções são

$$\psi(x) \propto \begin{cases} e^{-cx}, & \text{se } x \geq a/2 \\ e^{cx}, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases}. \quad (13)$$

Por outro lado, se  $-a/2 < x < a/2$  o potencial se anula e o hamiltoniano é escrito como

$$H = -\frac{d^2}{dx^2}. \quad (14)$$

Assim a fatorização da Eq. (14) aplicada a função  $\beta(x)$  fornece a equação de Ricatti

$$\beta^2(x) - \beta'(x) + \epsilon = 0, \quad (15)$$

cujas soluções possíveis, que satisfazem as condições de continuidade, são

$$\beta(x) = k \tan(kx) \quad \text{ou} \quad \beta(x) = -k \cot(kx), \quad (16)$$

com  $k$  constante e

$$\epsilon = k^2. \quad (17)$$

As autofunções correspondentes, obtidas pela Eq. (6) são dadas por

$$\psi(x) \propto \cos(kx) \quad \text{ou} \quad \psi(x) \propto \sin(kx). \quad (18)$$

Uma vez que a paridade das funções indicadas na Eq. (18) são distintas elas são auto-excludentes. Assumindo que os valores de energia de fatorização, também conhecidos como autovalores de energia, são iguais dentro e fora do poço, as Eqs. (12) e (17) conduzem a

$$c = \sqrt{V_0 - k^2}. \tag{19}$$

Como a autofunção deve ser contínua em  $x = \pm a/2$ , a função  $\beta(x)$  também deve ser contínua (vide Eq. (6)). Assim, das Eqs. (11), (16) e (19), obtém-se

$$ktg(ka) = \sqrt{V_0 - k^2}, \tag{20}$$

$$kcotg(ka) = -\sqrt{V_0 - k^2}. \tag{21}$$

A Eq. (20) corresponde às soluções com paridade par, enquanto a Eq. (21) se relaciona às funções ímpares. Assim, as soluções aceitáveis para o problema tratado são

$$\psi(x) \propto \begin{cases} e^{-cx}, & \text{se } x \geq a/2 \\ \cos(kx), & \text{se } -a/2 < x < a/2 \\ e^{cx}, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases} \tag{22}$$

ou

$$\psi(x) \propto \begin{cases} e^{-cx}, & \text{se } x \geq a/2 \\ \text{sen}(kx), & \text{se } -a/2 < x < a/2 \\ -e^{cx}, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases} \tag{23}$$

As Eqs. (20) e (21) determinam os possíveis valores da constante  $k$ . Como exemplo de solução do problema (7) utiliza-se os valores  $V_0 = 16$  e  $a = 2$ . Para esses valores as autofunções e respectivos autovalores de energia

para o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados obtidos pelas Eqs. (20) (21) são mostradas na Tabela 1, e podem ser comparados com [7].

As soluções para os autovalores de energia  $\epsilon$  podem ser encontradas numérica ou graficamente a partir das Eqs. (22 e 23). Tais soluções fornecem valores para a constante  $k$  que está diretamente relacionada com o autovalor de energia  $\epsilon$ .

Na Fig. 2 os gráficos das autofunções para os valores selecionados de  $V_0$  e  $a$  são mostrados. Observa-se que a autofunção do estado fundamental não possui zeros (não corta o eixo das abcissas), a do primeiro estado excitado possui apenas um zero e a do segundo estado excitado possui dois.

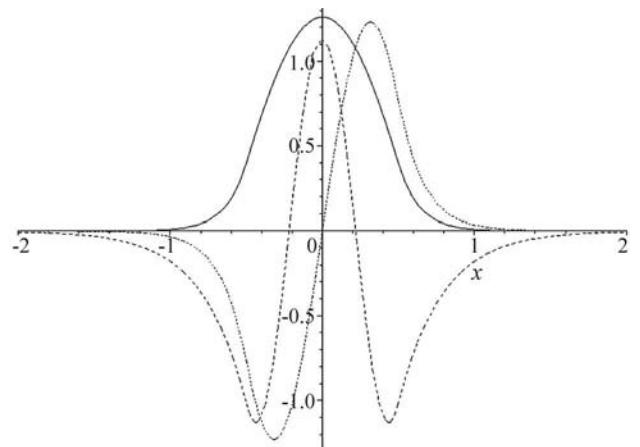


Figura 2 - Autofunções para os estados fundamental (-), primeiro (-) e segundo(...) excitados.

Tabela 1 - Possíveis soluções para o poço de potencial quadrado quântico finito com  $a = 2$  e  $V_0 = 16$ .

Autovalor de energia ( $\epsilon$ )	Autofunção ( $\psi_n$ )
1,56	$\psi_0(x) \propto \begin{cases} e^{-3,80x}, & \text{se } x \geq a/2 \\ \cos(1,25x), & \text{se } -a/2 < x < a/2 \\ e^{3,80x}, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases}$
6,05	$\psi_1(x) \propto \begin{cases} e^{-3,15x}, & \text{se } x \geq a/2 \\ \text{sen}(2,46x), & \text{se } -a/2 < x < a/2 \\ -e^{3,15x}, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases}$
12,89	$\psi_2(x) \propto \begin{cases} e^{-1,76x}, & \text{se } x \geq a/2 \\ \cos(3,59x), & \text{se } -a/2 < x < a/2 \\ e^{1,76x}, & \text{se } x \leq -a/2 \end{cases}$

#### 4. Conclusão

O tema principal tratado neste trabalho consiste no uso do método de fatorização para a resolução da equação de Schrödinger para uma partícula sujeita ao poço de

potencial quadrado finito unidimensional.

Das Eqs. (12) e (17) tem-se os valores possíveis de  $k$  que estão diretamente relacionados com a energia  $\epsilon$ . Os resultados obtidos aqui podem ser comparados com os encontrados na literatura [7]. É importante notar que

existem outras funções que satisfazem as Eqs. (10) e (15), entretanto, elas violam as condições de contorno e, portanto, não são aceitáveis. Nesse trabalho só foram apresentadas aquelas que possuem significado físico, ou seja, as que não violam as condições de contorno e que permitem a continuidade das autofunções.

Atualmente o método de fatorização é utilizado como ingrediente básico no formalismo da mecânica quântica supersimétrica [8–10]. Este formalismo é empregado com sucesso na solução da equação de Schrödinger para diversos tipos de potenciais e consiste de sucessivas fatorizações.

Considerando o modelo físico e a estrutura matemática do sistema tratado aqui, nota-se que ele pode ser usado como problema inicial para introduzir o método de fatorização para o estudo da equação de Schrödinger. Assim, além do interesse imediato no sistema em si, ele também consiste num bom exemplo para fins didáticos.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao árbitro escolhido pela RBEF pelos comentários e sugestões feitos que contribuíram para melhorar o texto final desse artigo. Esse trabalho teve suporte financeiro parcial das agências brasileiras

CNPq e FAPESP.

## Referências

- [1] T. Ando and A.B. Fowler, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [2] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics*. John Wiley, Nova Iorque, 1996.
- [3] L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, Nova Iorque, 1955.
- [4] E. Schrödinger, *Proc. Roy. Irish Acad.* **A 46**, 9 (1940).
- [5] J.O. Rosas-Ortiz, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 10163 (1998).
- [6] S. Borowitz, *Fundamentals of Quantum Mechanics* (W.A. Benjamin, New York, 1967).
- [7] R. Eisberg e R. Resnick, *Física Quântica* (Elsevier, Rio de Janeiro, 1979).
- [8] G.R.P. Borges e E. Drigo Filho, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **21**, 233 (1999).
- [9] A. Khare and U. Sukhatme, *J. Math. Phys.* **47**, 062103 (2006).
- [10] E. Drigo Filho, *Supersimetria Aplicada à Mecânica Quântica* (Ed. Unesp, São Paulo, 2009).