

**Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**

---

## Estados localizados no modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito

Arianne Vellasco-Gomes<sup>1</sup>

Universidade Federal de Roraima, Escola Agrotécnica.

Alexys Bruno-Alfonso<sup>2</sup>

Universidade Estadual Paulista, Departamento de Matemática.

Rubens de Figueiredo Camargo<sup>3</sup>

Universidade Estadual Paulista, Departamento de Matemática.

**Resumo** São calculados e analisados os níveis de energia e as funções de onda para o modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito e derivada de Riesz. Na ausência do defeito, o potencial consiste de deltas de Dirac de igual intensidade, uniformemente espaçadas. O defeito consiste em alterar a intensidade do potencial de um dos deltas de Dirac, preservando a simetria de inversão. Os estados da partícula podem ser localizados ou não. A pesquisa é dedicada ao estudo dos estados localizados, mediante o método da transformada de Fourier. O resultado mais importante é que, no caso fracionário, as funções de onda decaem em forma de lei de potência, com expoente aproximadamente igual a  $-(\alpha + 1)$ .

**Palavras-chave.** Cálculo fracionário, equação de Schrödinger fracionária, transformada de Fourier, comportamento assintótico.

### 1 Introdução

A equação de Schrödinger fracionária independente do tempo, para a função de onda  $\psi(x)$ , é dada por [2, 3]

$$-C_\alpha D^\alpha \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1)$$

Aqui o operador fracionário  $D^\alpha$  é derivada de Riesz. O parâmetro  $C_\alpha$  caracteriza a inércia da partícula,  $V(x)$  é a energia potencial e  $E$  é a energia total da mesma. Para o modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito na origem [1], utilizamos o potencial da forma

$$V(x) = V_0 \delta\left(\frac{x}{a}\right) + \sum_{m \in \mathbb{Z}^*} V \delta\left(\frac{x}{a} - m\right), \quad (2)$$

em que  $V$  é a intensidade do potencial de todos os poços quânticos, excetuando o poço quântico situado na origem, que tem intensidade  $V_0$ .

---

<sup>1</sup>arianne.vellasco@ufr.br

<sup>2</sup>alexys.bruno-alfonso@unesp.br

<sup>3</sup>rubens.camargo@unesp.br

Substituindo o potencial na Eq. (1) e aplicando a transformada de Fourier em ambos os lados da equação, obtemos

$$(E - C_\alpha |k|^\alpha) \phi(k) = a \Delta V \psi(0) + aV \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{-ikma} \psi(ma). \quad (3)$$

Aqui  $\Delta V = V_0 - V$  quantifica o defeito do potencial, aquilo que quebra a sua periodicidade.

Os valores da função de onda nas posições dos poços quânticos podem ser calculados pela transformada inversa de Fourier, ou seja,

$$\psi(ma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikma} \phi(k) dk. \quad (4)$$

Substituindo esta expressão no segundo termo do lado direito da Eq. (3), obtemos

$$(E - C_\alpha |k|^\alpha) \phi(k) = \Delta V \psi(0) + VS(k), \quad (5)$$

em que

$$S(k) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \phi \left( k + \frac{2\pi n}{a} \right). \quad (6)$$

Isolando  $\phi(k)$  da equação Eq. (5), temos

$$\phi(k) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} + \frac{VS(k)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} + P(k), \quad (7)$$

na qual  $P(k)$  assumirá valores distintos, dependendo do valor da energia, a saber,

$$P(k) = \begin{cases} A_+ \delta \left( k - \left( \frac{E}{C_\alpha} \right)^{1/\alpha} \right) + A_- \delta \left( k + \left( \frac{E}{C_\alpha} \right)^{1/\alpha} \right), & \text{se } E > 0 \\ 0, & \text{se } E < 0, \end{cases} \quad (8)$$

em que  $A_+$  e  $A_-$  são constantes [2]. A contribuição de  $P(k)$  para  $\psi(x)$  é

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} P(k) e^{ikx} dk = \begin{cases} \frac{A_+}{2\pi} e^{ix(E/C_\alpha)^{1/\alpha}} + \frac{A_-}{2\pi} e^{-ix(E/C_\alpha)^{1/\alpha}}, & \text{se } E > 0, \\ 0, & \text{se } E < 0. \end{cases} \quad (9)$$

Para  $E > 0$ , temos uma combinação linear de ondas harmônicas que se estendem ao infinito. Como estamos à procura de estados localizados, escolhemos  $A_- = A_+ = 0$ , ou seja,  $P(k) = 0$ . Então,

$$\phi(k) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha |k|^\alpha} + \frac{VS(k)}{E - C_\alpha |k|^\alpha}. \quad (10)$$

em que

$$S(k) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \phi \left( k + \frac{2\pi n}{a} \right) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left[ \frac{a \Delta V \psi(0)}{E - C_\alpha \left| k + \frac{2\pi n}{a} \right|^\alpha} + \frac{VS \left( k + \frac{2\pi n}{a} \right)}{E - C_\alpha \left| k + \frac{2\pi n}{a} \right|^\alpha} \right]. \quad (11)$$

Calculando a transformada de Fourier inversa de  $\phi(k)$  dada pela Eq. (10), obtemos que a função de onda dos estados localizados é

$$\psi(x) = \frac{a \Delta V \psi(0)}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ikx} dk}{(E - C_\alpha |k|^\alpha)(1 - Vg(E, k))}. \quad (12)$$

Convenientemente, trabalhamos com a forma adimensional da função de onda, dada por

$$\chi(\xi) = \psi(x)\sqrt{a} = \Delta v \chi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{2\pi i \kappa \xi} d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))}, \quad (13)$$

em que  $\xi = x/a$ ,  $v = V/K_\alpha$ ,  $\Delta v = \Delta V/K_\alpha$ ,  $\chi(0) = \psi(0)\sqrt{a}$ ,  $\epsilon = E/K_\alpha$  e  $\kappa = k/(2\pi/a)$ ,  $K_\alpha = C_\alpha \left(\frac{2\pi}{a}\right)^\alpha$  e  $G(\epsilon, \kappa) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{\epsilon - |\kappa + n|^\alpha}$ .

Ainda é necessário especificar o valor de  $\chi(0)$ . Seu valor absoluto é calculado a partir da condição de normalização, que é dada por  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(\xi)|^2 d\xi = 1$ . Então, obtemos

$$\chi(0) = \frac{1}{\Delta v \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)^2 (1 - vG(\epsilon, \kappa))^2}}}. \quad (14)$$

Considerando a Eq. (13) para  $\xi = 0$ , temos que energia de todo estado localizado deve satisfazer

$$\frac{1}{\Delta v} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{(\epsilon - |\kappa|^\alpha)(1 - vG(\epsilon, \kappa))}. \quad (15)$$

Consequentemente, a função de onda se reduz à forma

$$\chi(\xi) = \frac{\sqrt{2} \int_0^{\frac{1}{2}} \frac{\text{Re}[G(\epsilon, \kappa, \xi)] d\kappa}{1 - vG(\epsilon, \kappa)}}{\sqrt{-\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(1 - vG(\epsilon, \kappa))^2} \frac{\partial G}{\partial \epsilon}(\epsilon, \kappa) d\kappa}}. \quad (16)$$

## 2 Resultados

### 2.1 Resultados numéricos para os níveis de energia

Na Figura 1 apresentamos os níveis de energia dos estados localizados para  $\alpha = 2$  e  $\alpha = 1.6$ . Com exceção do poço na origem, a intensidade dos poços quânticos é dada por  $v = -0.2$ . Na origem, a intensidade, denotada por  $v_0$ , assumirá outros valores. No painel (a), em que  $v_0/v > 1$ , se destaca a existência de apenas um nível de estado localizado. Este se encontra abaixo da banda inferior,  $j = 0$ . No painel (b), em que  $v_0/v < 1$ , há um nível de energia abaixo da banda inferior. Entretanto, há um estado localizado em cada um dos gaps (faixas de energia proibida). No painel (c), em que  $v_0/v > 1$ , a distância entre o nível mais baixo do estado localizado e o fundo da banda inferior aumenta ao passar da ordem  $\alpha = 2.0$  para  $\alpha = 1.6$ . No painel (d), a distância entre o nível mais baixo e o topo da banda inferior aumenta ao passar de  $\alpha = 2.0$  para  $\alpha = 1.6$ .

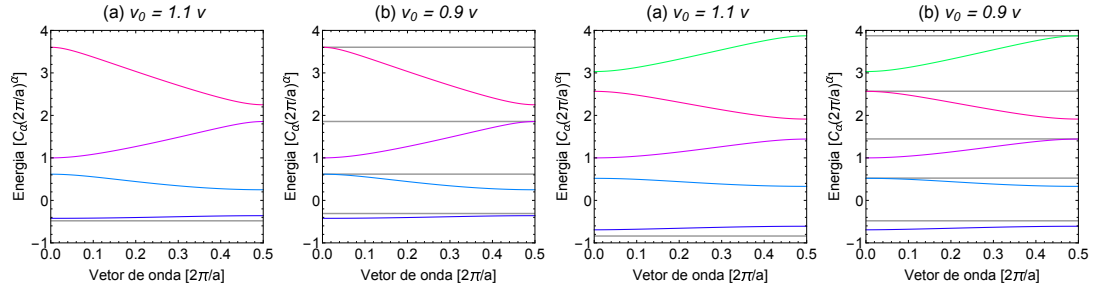


Figura 1: Gráfico dos níveis de energia dos estados localizados com derivada de ordem  $\alpha = 2.0$  em (a) e (b) e  $\alpha = 1.6$ , em (c) e (d). A intensidade do potencial na origem é  $v_0 = 1.1 v$  em (a) e (c) e  $v_0 = 0.9 v$ , em (b) e (d).

## 2.2 Função de onda e seu comportamento assintótico

Na Figura 2 apresentamos as funções de onda do primeiro nível de energia dos estados localizados calculados para  $\alpha = 2.0$  e  $1.6$ . As funções de onda são simétricas com relação ao poço quântico da origem e estão bem localizadas dentro da janela selecionada. Além disso, as funções apresentam singularidades nos poços quânticos. No painel (a), a função não se anula e possui o mesmo sinal nos diferentes poços quânticos. No painel (b) a função se anula entre os poços quânticos e apresenta alternância de sinal de poço para poço. Nos painéis (c) e (d), as figuras apresentam as mesmas características do caso inteiro. Entretanto, as singularidades estão mais acentuadas.

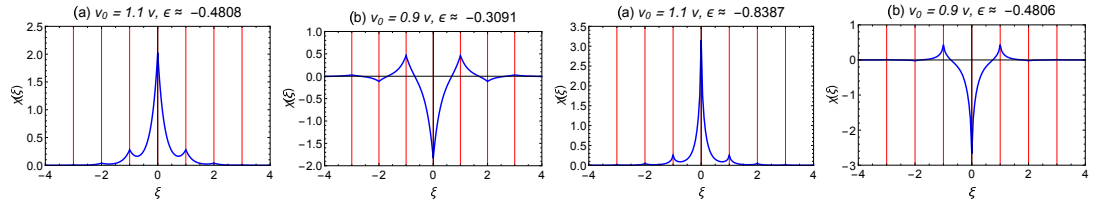


Figura 2: Gráfico da função de onda relativa ao primeiro nível de energia de estado localizado para  $\alpha = 2.0$ , (a) e (b) e para  $\alpha = 1.6$ , (c) e (d). No item (a) e (c)  $v_0 = 1.1 v$ , no item (b) e (d)  $v_0 = 0.9 v$ .

As funções de onda, mostradas na Figura 2, apresentam diferentes comportamentos assintóticos. Para  $\alpha = 2.0$  decaem exponencialmente, enquanto para  $\alpha = 1.6$  decaem em forma de lei de potência [3].

Analisamos a sequência de valores  $\Omega_n = |\chi(n)|$ , com  $n$  inteiro positivo. Se o decaimento de  $\Omega_n$ , quando  $n$  tende ao infinito, fosse um produto entre a lei exponencial e a lei de potência, teríamos que

$$\Omega_n \approx \Lambda e^{-hn} n^{-\gamma}, \quad (17)$$

quando  $n$  suficientemente grande. Conseqüentemente,

$$\ln(\Omega_n/\Omega_{n+1}) \approx h \ln(1 + 1/n) + \gamma. \quad (18)$$

Para estimar os valores de  $h$  e  $\gamma$ , ajustamos uma reta aos pontos de um gráfico  $\ln(\Omega_n/\Omega_{n+1})$  contra  $\ln(1+1/n)$ . Os resultados do ajuste para  $\alpha = 2.0$  e  $1.6$  são mostrados na Figura 3. No painel (a), para  $\alpha = 2$ , temos  $\gamma = 0$  e  $h \approx 1.97$ . Assim, no caso inteiro temos um decaimento puramente exponencial. No painel (b), para  $\alpha = 1.6$ , temos  $h = 0$  e  $\gamma \approx 2.614$ . Assim, no caso fracionário temos um decaimento em forma de lei de potência e a potência de decaimento é aproximadamente  $\gamma = (\alpha + 1)$ . Este resultado pode ser demonstrado exatamente [3], mediante extensão da função de onda ao plano de valores complexos de  $\kappa$ .

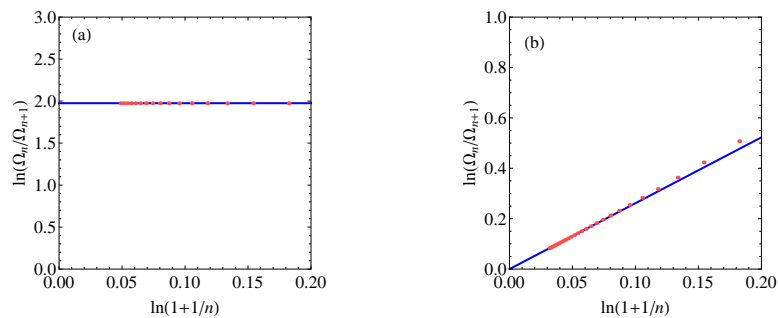


Figura 3: Comportamento assintótico do estado localizado de menor energia no modelo de Kronig-Penney com defeito. Os poços têm intensidade adimensional  $v = -0.2$  com exceção do poço na origem que tem intensidade  $v_0 = 1.1v$ . A ordem da derivada de Riesz é (a)  $\alpha = 2.0$  e (b)  $\alpha = 1.6$ .

### 3 Conclusões

Pelo método da transformada de Fourier, calculamos os estados localizados do modelo de Kronig-Penney fracionário com defeito, para diferentes valores de intensidades de potencial e para diferentes ordens da derivada fracionária de Riesz:  $\alpha = 2.0$  e  $1.6$ . Analisamos as funções de onda para o primeiro estado localizado. De um lado, observamos que o decaimento é exponencial para  $\alpha = 2.0$ . Entretanto, para o valor fracionário de  $\alpha$ , as funções decaem em forma de lei de potência, com expoente  $-(\alpha + 1)$ .

### Referências

- [1] S. Jarosz. A Equação de Schrödinger Fracionária com Potenciais Delta, Dissertação de Mestrado, Unicamp, 2016.
- [2] E. C. de Oliveira; F. S. Costa and J. Vaz. The fractional Schrödinger equation for delta potentials. *Journal of Mathematical Physics*, 51:123517, 2010. DOI:10.1063/1.3525976
- [3] A. Vellasco-Gomes. Estrutura eletrônica de cristais: Generalização mediante o Cálculo Fracionário, Tese de Doutorado, Unesp, 2018.