

SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

INDEPENDENTE DO TEMPO

Neste capítulo vamos resolver três problemas unidimensionais extremamente importantes:

- o potencial degrau
- a barreira de potencial
- o poço de potencial finito

Em todos eles o potencial $V(x)$ é constante por partes e a solução da partícula livre tem um papel fundamental. Como já vimos, existem nesse caso duas soluções independentes da equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

de dás por

$$\psi_+(x) = A_+ e^{ikx}$$

$$\psi_-(x) = A_- e^{-ikx}$$

$$\Psi_+(x,t) = A_+ e^{i(kx-wt)}$$

$$\Psi_-(x,t) = A_- e^{-i(kx+wt)}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{Apliquemos}$$

Ambas representam partículas com o operador

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\hat{p}\Psi_+ = \hbar k \Psi_+$$

$$\hat{p}\Psi_- = -\hbar k \Psi_-$$

Vemos que Ψ_+ representa partículas livres com momento $p = +\hbar K$ e Ψ_- representa partículas com $p = -\hbar K$.

A dificuldade principal com Ψ_+ e Ψ_- é que elas NÃO

são funções normalizáveis:

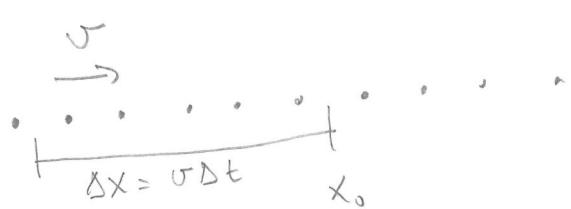
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_{\pm}(x)|^2 dx = |A_{\pm}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \infty$$

Nesses casos Ψ NÃO pode representar uma partícula. Vamos mostrar

que Ψ (ou ψ) representa um feixe de partículas.

Vamos primeiramente considerar um feixe de partículas clássicas

com densidade $\rho = (\text{Nº de partículas}) / \text{comprimento}$. O fluxo desse feixe é a quantidade de partículas que passa por um ponto fixo x_0 em unidade de tempo:



Nº de partículas no intervalo Δx é $\rho \Delta x$

No intervalo de tempo $\Delta t = \frac{\Delta x}{v}$ todos esses partículas passam por x_0

$$\text{fluxo} \equiv J = \frac{\rho \Delta x}{\Delta t} = \rho v$$

O fluxo J e a densidade ρ satisfazem a equação de

continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

(verá dedução
a seguir)

EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE

2a

$J(x) = \text{n.º de partículas / unidade de tempo que cruzam a}$

$J(x)\Delta t = \text{n.º de partículas que cruzam a n.º intervalo } \Delta t$



$$J(x)\Delta t - J(x+\Delta x)\Delta t = (\text{n.º que entra}) - (\text{n.º que sai})$$

= variação do n.º de partículas no intervalo Δx

O n.º de partículas no intervalo é $f(n)\Delta x$ e SVA

variação $\Delta f \Delta x$ (Δx é fixo, mas f pode variar)

Assim

$$[J(n) - J(n+\Delta x)]\Delta t = \Delta f \Delta x$$

$$-\underbrace{[J(n+\Delta x) - J(n)]}_{\Delta x} = \frac{\partial f}{\partial t} \Delta x$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

Em mecânica quântica temos uma equação similar: Escrevemos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^+}{\partial x^2} + V\Psi^+$$

Multiplicando a 1º por Ψ^+ e a 2º por Ψ e substrair os termos

$$i\hbar \Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar \Psi \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Psi^+ - \frac{\partial^2 \Psi^+}{\partial x^2} \Psi \right)$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\Psi|^2) + \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^+}{\partial x} \right] = 0$$

CHAMAMOS

$$\mathcal{J} \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^+}{\partial x} \right]$$

e termo

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\Psi|^2) + \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial x} = 0$$

$i(kx - \omega t)$

Para a partícula livre com $\Psi_+ = A_+ e^{ikx - \omega t}$ obtemos

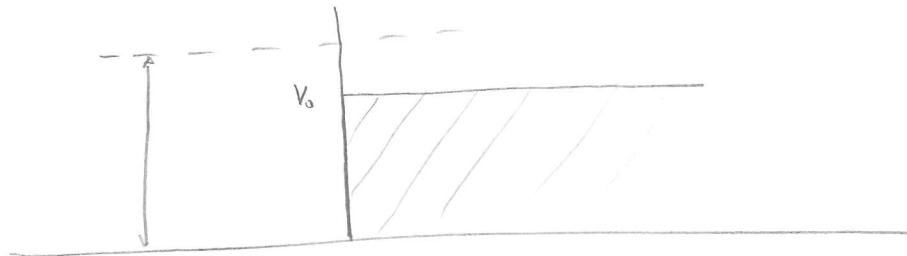
$$|\Psi|^2 = |A_+|^2$$

$$\mathcal{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left[ik|A_+|^2 - (-ik)|A_+|^2 \right] = \frac{\hbar k}{m} |A_+|^2 = \frac{P}{m} |A_+|^2$$

$$= 0 |A_+|^2$$

A amplitude $|A_+|^2$ faz o paralelo da densidade de partículas que é feita representativa. No caso livre esse feixe tem densidade constante. Em todos os problemas de espalhamento, onde as partículas não estão confinadas, as soluções estacionárias devem ser interpretadas como feixes.

O POTENCIAL DE GRAN (E > V₀)



para $x < 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

para $x > 0$

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

Vamos supor que nosso problema representa o esparlhamento de um forte vindo da esquerda. Ponto de feixe é refletido pela barreira e pode passar. Definimos

$$K = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$q = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$$

de forma que as equações ficam

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -K^2\psi & \text{se } x < 0 \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} = -q^2\psi & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

A solução para $\alpha < 0$ pode ser escrita como

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Para $x > 0$ temos

$$\psi(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx}$$

Escolhemos $D=0$ se o feito vem da esquerda. Os coeficientes de termos impares contínuos da continuidade de ψ e $\frac{d\psi}{dx}$ em $x=0$:

Só Agora

$$\psi(0_+) = \psi(0_-)$$

$$\frac{d\psi}{dx}(0_+) = \frac{d\psi}{dx}(0_-)$$

OBS Apesar de $V(x)$ ser descontínua ele é finito e $\frac{dV}{dx}$ finita continua. Integrando a equação de schrödinger para o ponto de $x=0$ temos

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\psi(\varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi(-\varepsilon)}{dx} \right] + \left[V_0 \psi\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \varepsilon \right] = E \psi(0) 2\varepsilon$$

$$\frac{d\psi}{dx}(0_+) = \frac{d\psi}{dx}(0_-)$$

Tomando $\varepsilon \rightarrow 0$ vemos que

As relações acima resultam em

$$A + B = C$$

$$ik(A - B) = \text{eq } C$$

(6)

Resolvendo para B e C obtemos

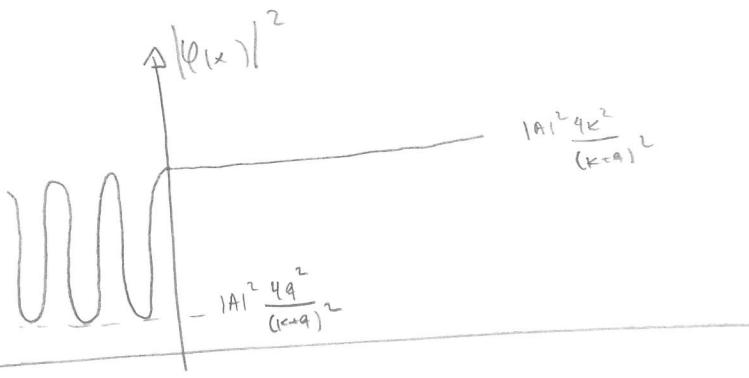
$$B = \left(\frac{k-q}{k+q} \right) A$$

$$C = \frac{2k}{k+q} A$$

$$\varphi(x) = A \begin{cases} e^{ikx} + \left(\frac{k-q}{k+q} \right) e^{-ikx} \\ \frac{2k}{k+q} e^{iqx} \end{cases}$$

$$|\varphi(x)|^2 = |A|^2 \left\{ 1 + \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 + 2 \left(\frac{k-q}{k+q} \right) \cos 2kx \right.$$

$$\left. - \frac{4k^2}{(k+q)^2} \right\}$$



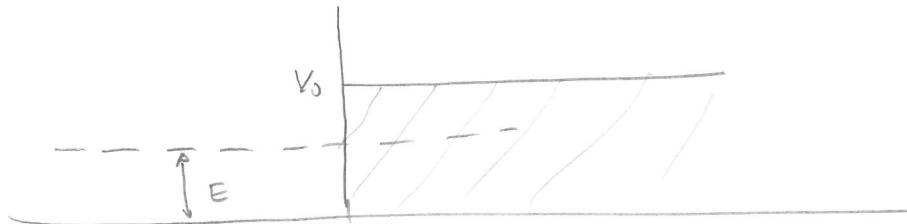
Definindo agora os coeficientes de Reflexão e Transmissão:

$$R = \frac{\text{FLUXO OVE RETORNA}}{\text{FLUXO INCIDENTE}} = \frac{|B|^2 h k}{|A|^2 h k} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2$$

$$T = \frac{\text{FLUXO OVE PASSA}}{\text{FLUXO INCIDENTE}} = \frac{|C|^2 h q}{|A|^2 h k} = \frac{q}{k} \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4 k q}{(k+q)^2}$$

Vemos que $T + R = 1$, representan los A conservados
de números totales de partículas.

O POTENCIAL DE GRAN (E < V₀)



Ness caso, para $x > 0$ definimos

$$R = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar$$

e a equação de schrödinger é $\frac{d^2\psi}{dx^2} = +k^2\psi$. As soluções são agora de tipo hiperbólico,

$$\psi(y) = C e^{-kx} + D e^{+kx}$$

A condição de que $\psi(x)$ seja finita implica em $D=0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ C e^{-kx} \end{cases}$$

Impõe-se continuidade de $\psi(x)$ e de sua derivada obtémos

$$A + B = C$$

$$ik(A - B) = -RC$$

on

$$A + B = C$$

$$A - B = \frac{iR}{K} C$$

somando obtemos

$$C = \frac{2K}{K+iR} A \quad e$$

$$B = \frac{K-iR}{K+iR} A$$

Obtemos

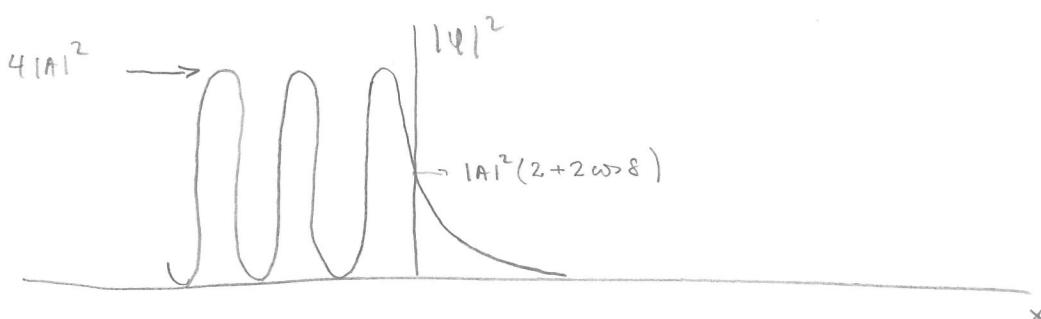
$$\varphi(x) = A \left\{ \begin{array}{l} e^{ikx} + \left(\frac{K-iR}{K+iR} \right) e^{-ikx} \\ \frac{2K}{K+iR} e^{-Rx} \end{array} \right.$$

Vemos que $b = \frac{K-iR}{K+iR}$ tem módulo 1 :

$$bb^* = \frac{K-iR}{K+iR} \cdot \frac{K+iR}{K-iR} = 1$$

e podemos escrever $b = e^{i\delta}$, com isso obtemos

$$|\varphi(x)|^2 = |A|^2 \left\{ 2 + 2 \cos(2kx - \delta) \right. \\ \left. \frac{4K^2}{K^2+R^2} e^{-2Rx} \right\}$$



$$\cos \delta = \frac{K^2 - R^2}{K^2 + R^2}$$

$$\sin \delta = \frac{-2KR}{K^2 + R^2}$$

$$\tan \delta = -\frac{2KR}{K^2 - R^2}$$

Como $B = A b$,

$$R = \frac{|B|^2 \hbar k}{|A|^2 \hbar k} = 1$$

O comprimento da penetração na região $x > 0$ pode ser

estimado como

$$\Delta x = \frac{1}{R} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Se medirmos a partícula nessa região, a incerteza no momento será

$$\Delta p = \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

$$\text{e } \Delta E = \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 = V_0 - E$$

Pontualmente como $E + \Delta E = V_0$, podendo ser que a partícula tenha energia suficiente para passar!

Finalmente, grafaremos R e T versus E/V_0 :



Soluções não estacionárias normalizadas podem ser construídas.

A partir das combinações lineares das auto-funções:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) \Psi_k(x) e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m} t} dk$$

Escolhendo $C(k)$ da forma que em $t=0$

$$\Psi(x,0) = b^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{(x-x_0)^2}{2b^2} + i k_0 (x-x_0) \right\}$$

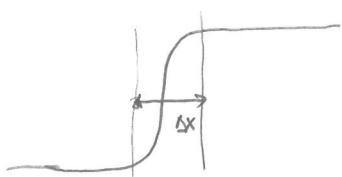
podemos mostrar que $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 = 1 ; \bar{x} = x_0 ; \bar{p} = \hbar k_0$.

A figura seguinte mostra $|\Psi(x,t)|^2$ para $E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} < V_0$.

É interessante notar que podemos escrever

$$R = \left[\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right]^2 \quad \text{para } E > V_0$$

que só depende de V_0/E , e não de \hbar . Porque não observamos reflexão em problemas macroscópicos se \hbar não aparece em R ? Podemos mostrar que para qualquer potencial suave \hbar aparece no coeficiente R

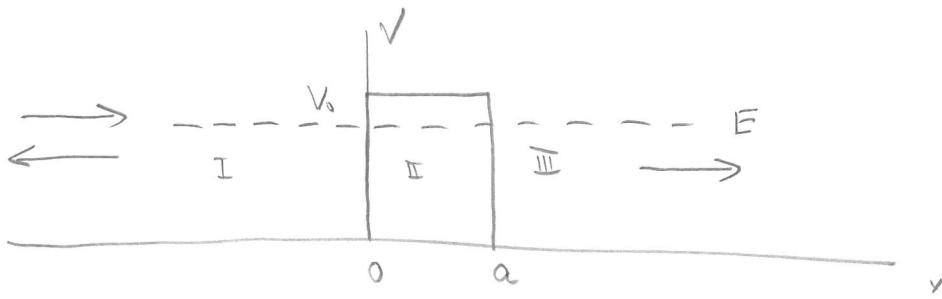


e que se $\Delta x \ll \lambda = \hbar/p$ a reflexão suave

e se $\Delta x \gg \lambda = \hbar/p$ a reflexão não ocorre.

Como partículas microscópicas tem λ muito pequeno, a reflexão não ocorre nunca. Para $m=1\text{kg}$, $v=10\text{m/s}$, $\lambda \approx 10^{-25}\text{m}$.

A BARREIRA DE POTENCIAL



Vamos fazer o cálculo das funções de onda estacionárias supondo $E < V_0$ e o feixe incidente da esquerda. A função pode ser escrita como

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & ; x \in \text{I} \\ F e^{-Rx} + G e^{Rx} & ; x \in \text{II} \\ C e^{ikx} & ; x \in \text{III} \end{cases}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$R = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

Impomos continuidade de $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ em $x=0$ e $x=a$:

$$\underline{\psi(x) \text{ em } x=0} : A + B = F + G \quad (1)$$

$$\underline{\psi'(x) \text{ em } x=0} : A - B = \frac{iR}{K} (F - G) \quad (2)$$

$$\underline{\psi(x) \text{ em } x=a} : C e^{ika} = F e^{-Ra} + G e^{Ra} \quad (3)$$

$$\underline{\psi'(x) \text{ em } x=a} : C e^{ika} = \frac{iR}{K} (F e^{-Ra} - G e^{Ra}) \quad (4)$$

Fazemos agora as seguintes operações:

$$(1) + (2) \rightarrow 2A = F + G + \frac{iR}{K} (F - G)$$

$$A = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{iR}{K} \right) + \frac{G}{2} \left(1 - \frac{iR}{K} \right) \quad (5)$$

$$(3) + (4) \rightarrow 2C e^{iK\alpha} = F e^{-R\alpha} \left(1 + \frac{iR}{K} \right) + G e^{+R\alpha} \left(1 - \frac{iR}{K} \right)$$

$$C = \frac{F}{2} e^{-iK\alpha - R\alpha} \left(1 + \frac{iR}{K} \right) + \frac{G}{2} e^{-iK\alpha + R\alpha} \left(1 - \frac{iR}{K} \right) \quad (6)$$

$$(1) - (2) B = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{iR}{K} \right) + \frac{G}{2} \left(1 + \frac{iR}{K} \right) \quad (7)$$

$$(3) - (4) O = F e^{-R\alpha} \left(1 - \frac{iR}{K} \right) + G e^{+R\alpha} \left(1 + \frac{iR}{K} \right) \quad (8)$$

Vamos de finin

$$\gamma = 1 + iR/K \quad (9)$$

$$\gamma^* = 1 - iR/K$$

De (8) tiram

$$F = - \frac{G\gamma}{\gamma^*} e^{2R\alpha} \quad (10)$$

Substituindo em (5) temos

$$A = \frac{\gamma}{2} \left(- \frac{G\gamma}{\gamma^*} e^{2R\alpha} \right) + \frac{G\gamma^*}{2} = \frac{G\gamma^*}{2} \left[1 - \frac{\gamma^2}{\gamma^{*2}} e^{2R\alpha} \right]$$

an

$$G = \frac{2\gamma^* A}{\gamma^{*2} - \gamma^2 e^{2R\alpha}} \quad (11)$$

Substituindo novamente em 10

$$F = \frac{-2\gamma e^{2R\alpha}}{\gamma^{*2} - \gamma^2 e^{2R\alpha}} A \quad (12)$$

Substituindo F e G em (7) obtemos B:

$$B = \frac{F\gamma^*}{2} + \frac{G\gamma}{2} = -\frac{\gamma\gamma^* e^{2R\alpha}}{\gamma^{*2} - \gamma^2 e^{2R\alpha}} A + \frac{\gamma\gamma^* A}{\gamma^{*2} - \gamma^2 e^{2R\alpha}}$$

$$B = \frac{\gamma\gamma^* A}{\gamma^{*2} - \gamma^2 e^{2R\alpha}} (1 - e^{2R\alpha}) \quad (13)$$

e usam 10 obtemos C:

$$C = \frac{F\gamma e^{-iK_1 a - R\alpha}}{2} + \frac{G\gamma^* e^{-iK_1 a + R\alpha}}{2}$$

$$= \frac{A e^{-iK_1 a}}{\gamma^{*2} - \gamma^2 e^{2R\alpha}} \left[-\gamma^2 e^{R\alpha} + \gamma^{*2} e^{R\alpha} \right]$$

$$C = \frac{A e^{-iK_1 a + R\alpha}}{\gamma^{*2} - \gamma^2 e^{2R\alpha}} (\gamma^{*2} - \gamma^2) \quad (14)$$

O coeficiente de transmissão é dado por

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2}$$

O cálculo de T é trabalhoso. Em primeiro lugar vamos que

$$T = \frac{e^{2R\alpha} (r^* - r^2) (r^2 - r^{*2})}{(r^{*2} - r^2 e^{2R\alpha}) (r^2 - r^{*2} e^{2R\alpha})}$$

O numerador fica

$$e^{2R\alpha} (r^{*2} - r^2) (r^2 - r^{*2}) = \left(-\frac{4iR}{K}\right) \left(\frac{4iR}{K}\right)^{2R\alpha} = \frac{16R^2}{K^2} e^{2R\alpha}$$

O denominador pode ser escrito como HH^* onde

$$\begin{aligned} H &= (r^{*2} - r^2 e^{2R\alpha}) = \left(1 - \frac{2iR}{K} - \frac{R^2}{K^2}\right) - \left(1 + \frac{2iR}{K} - \frac{R^2}{K^2}\right) e^{2R\alpha} \\ &= \left(1 - \frac{R^2}{K^2}\right) \left(1 - e^{2R\alpha}\right) - \frac{2iR}{K} \left(1 + e^{2R\alpha}\right) \end{aligned}$$

Mas

$$\begin{aligned} \left(1 - e^{2R\alpha}\right) &= e^{R\alpha} \left(e^{-R\alpha} - e^{R\alpha}\right) = -2e^{R\alpha} \sinh R\alpha \\ \left(1 + e^{2R\alpha}\right) &= e^{R\alpha} \left(e^{-R\alpha} + e^{R\alpha}\right) = 2e^{R\alpha} \cosh R\alpha \end{aligned}$$

$$H = -2e^{R\alpha} \left(1 - \frac{R^2}{K^2}\right) \sinh R\alpha - 4i \frac{R}{K} e^{R\alpha} \cosh R\alpha$$

$$HH^* = 4e^{2R\alpha} \left(1 - \frac{R^2}{K^2}\right)^2 \sinh^2 R\alpha + \frac{16R^2}{K^2} e^{2R\alpha} \underbrace{\cosh^2 R\alpha}_{1 + \sinh^2 R\alpha}$$

$$= \frac{16 R^2}{k^2} e^{2R\alpha} + 4 e^{2R\alpha} \sinh^2 R\alpha \left[\underbrace{\left(1 - \frac{R^2}{k^2}\right)^2 + \frac{4R^2}{k^2}}_{(1+R^2/k^2)^2} \right]$$

$$= \frac{16 R^2}{k^2} e^{2R\alpha} \left[1 + \frac{k^2}{4R^2} \left(1 + \frac{R^2}{k^2}\right)^2 \sinh^2 R\alpha \right]$$

$$= \frac{16 R^2}{k^2} e^{2R\alpha} \left[1 + \frac{(k^2 + R^2)^2}{4R^2 k^2} \sinh^2 R\alpha \right]$$

$$T = \left[1 + \frac{(k^2 + R^2)^2}{4k^2 R^2} \sinh^2 R\alpha \right]^{-1}$$

o coeficiente multiplicando o \sinh pode ser escrito em termos de E e V_0 :

$$\frac{(k^2 + R^2)^2}{4k^2 R^2} = \frac{\left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^2}{4 \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right) \left(\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right)} = \frac{\frac{4m^2 V_0^2}{\hbar^4}}{\frac{16m^2 E(V_0 - E)}{\hbar^4}} = \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} = \frac{1}{4\frac{E}{V_0}(1 - \frac{E}{V_0})}$$

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2 R\alpha}{\frac{4E}{V_0}(1 - \frac{E}{V_0})} \right]^{-1}$$

$$E < V_0$$

o coeficiente de reflexão é simplesmente $R = 1 - T$.

Se $E > V_0$ as exponenciais na região II passam a ser completas, i.e.,

$$R = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \longrightarrow i \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \equiv i \bar{k}$$

então, fazendo

$$\sinh Re = \frac{1}{2} \left(e^{R\alpha} - e^{-R\alpha} \right) \rightarrow \frac{1}{2} \left(e^{i\bar{k}\alpha} - e^{-i\bar{k}\alpha} \right) = i \sin \bar{k}\alpha$$

To i sono
derito no método
 H^*H .

obtemos

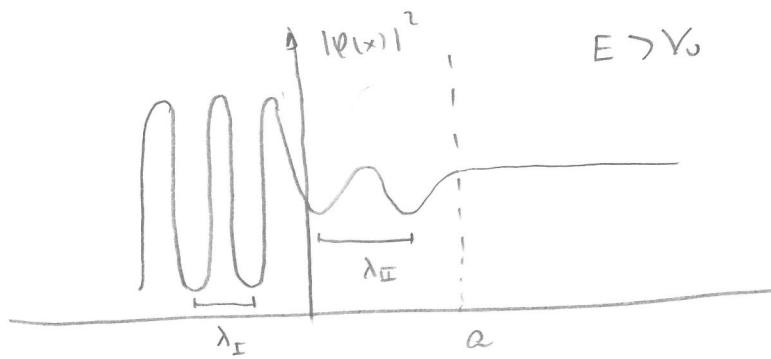
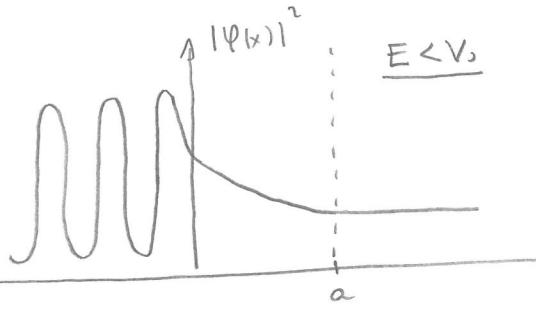
$$T = \left[1 + \frac{\sin^2 \bar{k}\alpha}{\frac{4E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1}$$

$$E > V_0$$

$$\bar{k} \equiv \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

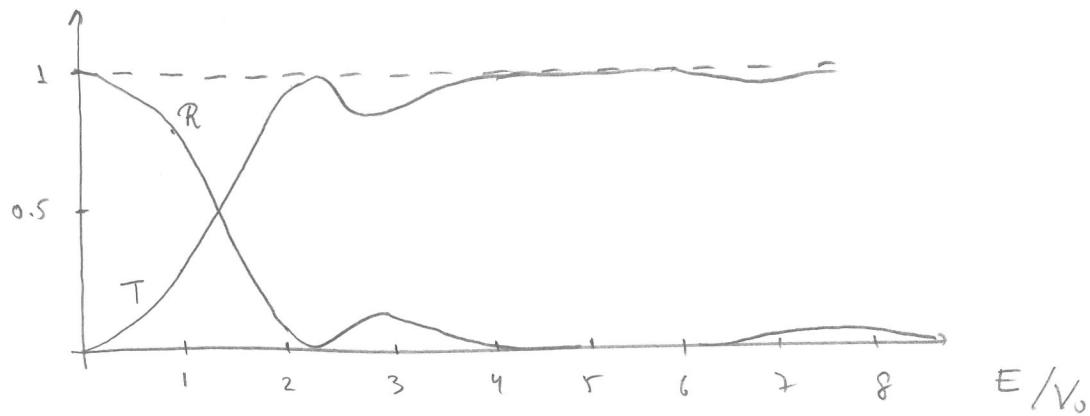
Densidad de Probabilidad

Tomando $|\psi(x)|^2$ vemos que na região III, $|\psi(x)|^2 = |C|^2$ é constante. Se $E < V_0$ a região II tem $|\psi(x)|^2$ não oscilante e se $E > V_0$ $|\psi(x)|^2$ oscila. Temos então:



$$\lambda_{II} > \lambda_I \text{ pors } P_{II} < P_I$$

Transmissão e Reflexão



Para $E > V_0$, $T = 1$ quando $\sin \bar{k}a = 0$, i.e.,

$$\bar{k}a = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} a = n\pi \quad \text{ou}$$

$$\bar{\lambda} = \frac{2\pi}{\bar{k}} = \frac{2a}{n}$$

essa relação é usada em óptica para determinar expressões de densidade de seios transparentes para certos comprimentos de luz.

Relação com Óptica

$$\text{A equação da onda } \nabla^2 E - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0, \quad V = \frac{c}{n}$$

podendo ser separada com

$$E(r, t) = E_0(r) e^{-i\omega t}$$

Obtemos

$$\nabla^2 E_0 + \left(\frac{\omega n}{c}\right)^2 E_0 = 0$$

comparando com

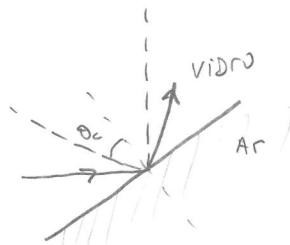
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi = 0$$

Vemos que associado à

$$V(x) = \frac{c}{w} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))}$$

temos a mesma equação:

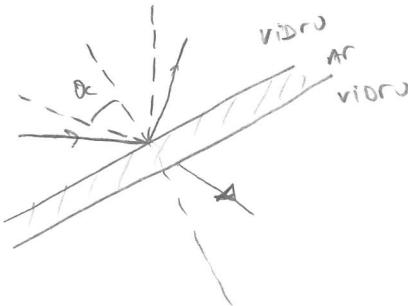
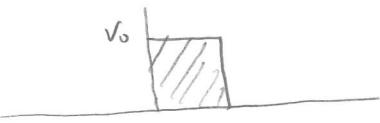
(1)



$\theta > \theta_c \rightarrow$ reflexão total $\rightarrow E < v_0$

$\theta < \theta_c \rightarrow$ reflexão e transmissão parcial $\rightarrow E > v_0$

(2)



$\theta > \theta_c \rightarrow$ existe uma pequena transmissão $\rightarrow E < v_0$

A lei de Snell $n \sin i = n' \sin r$, com $n = Ar < n = vidro$

$\sin i = \frac{n'}{n} \sin r$. Fazendo $r = \pi/2$ $\rho = i = \omega$,

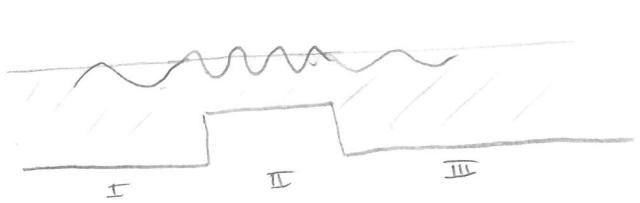
$\sin i_0 = n'/n \rightarrow$ ângulo de incidência de reflexão total.



Relação com Ondas em Cuba Rasa

(13)

A velocidade das ondas em águas rasas depende da profundidade. Quanto mais raso, menor a velocidade da onda. Isso explica porque as ondas do mar quebram: quando elas se aproximam da praia a parte de trás está em local mais fundo que a parte da frente. A parte de trás alcança a parte da frente, tornando a onda muito alta e instável. Uma curva com o perfil



(corresponde à

é como um potencial de barreira. As ondas reagem a velocidade ao passar pela barreira. Ao contrário da Mec. Quântica, o comprimento das ondas diminui também. O efeito de reflexão total ou transmissão parcial ocorre ao contrário:



(corresponde à

Se a região II é muito funda, as ondas refletem na fronteira, como se $\lambda \rightarrow \infty$ (compare com a página 16). Na nec. quântica, $\lambda \rightarrow \infty$ quanto $p = \sqrt{2m(E_n)} = 0$. Aqui $\lambda \rightarrow \infty$ quanto o Arreb!

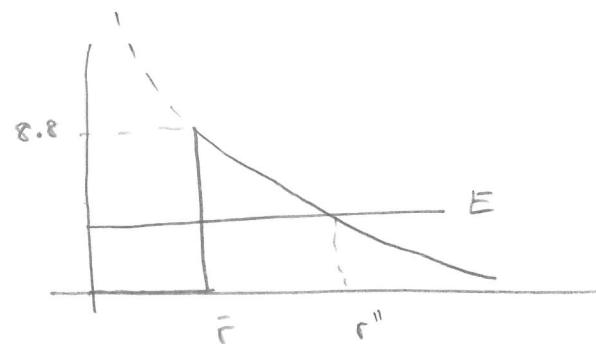
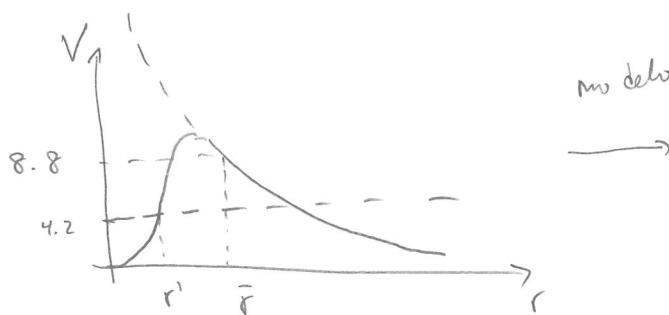
Exemplos de Tunnelamento

i) Emissão de partículas alfa por U²³⁸

- espinhamento de alfa por U²³⁸ é Coulombiano até E ≈ 8.8 MeV

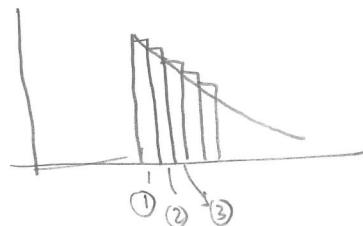
$$- V(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon r} \quad . \quad \text{Fazendo } V(\bar{r}) = 8.8 \text{ MeV} \rightarrow \bar{r} \approx 3 \times 10^{-14} \text{ m}$$

- partículas emitidas teriam E ≈ 4.2 MeV.



USANDO $T = \left[1 + \frac{\sinh^2 R_0}{\frac{4E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)} \right]^{-1} \approx \frac{16E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)^{-2R_0} e^{-2R_0} \approx e^{-2R_0}$

e aproximando a barreira por um sequência de barreras quadráticas:



$$T = \prod_{i=1}^n T_i = \prod_{i=1}^n e^{-2R_i dr}$$

$$\text{ou} \\ = \exp \left\{ - \sum 2R_i dr \right\} = \exp \left\{ - \frac{2}{\hbar} \int_{\bar{r}}^{r''} \sqrt{2m(V(r)-E)} dr \right\}$$

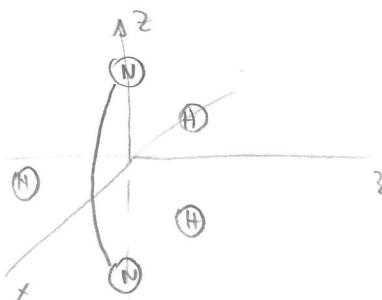
A partícula α oscila com período $T = \frac{v}{\frac{2\pi}{2F}}$ dentro dos núcleos. A frequência é:

$$\nu = \frac{2\pi}{T} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

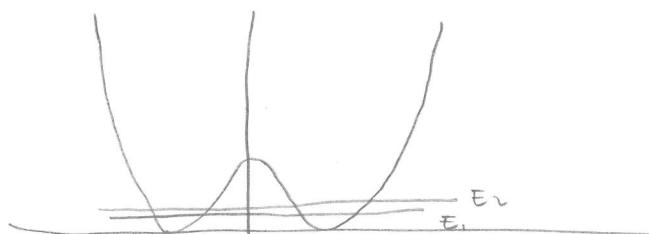
e a taxa de decimento é $\nu T =$

$$2\pi \sqrt{\frac{m}{2E}} e^{-r} \left\{ -\frac{2}{k} \int_r^{\infty} \sqrt{2m(V(r)-E)} dr \right\} \quad E = 4.2 \text{ meV.}$$

2) Oscilação da molécula NH₃



N pode estar em duas posições simétricas. O polonário na direção z é:

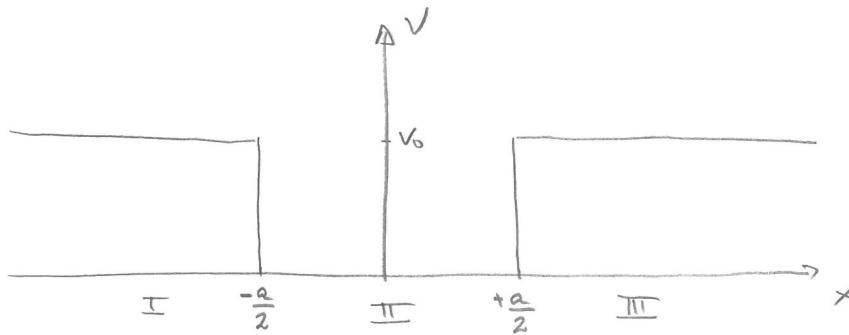


e os dois primeiros níveis são muito próximos, quase degenerados. A frequência de oscilação de NH₃ entre E₁ e E₂ é

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} \approx 2,38 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

que é muito menor do que aqueles observados em moléculas sem barreiras de potencial.

O POÇO DE POTENCIAL FINITO



O caso mais interessante ocorre para $E < V_0$, onde as energias são quantificadas. A solução matemática geral nesse caso é:

$$\psi(x) = \begin{cases} C e^{Rx} + D e^{-Rx} & \text{se } x \in \text{I} \\ A' e^{ikx} + B' e^{-ikx} & \text{se } x \in \text{II} \\ F e^{Rx} + G e^{-Rx} & \text{se } x \in \text{III} \end{cases}$$

$K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$R = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$

Para que $\psi(x)$ seja finita em I e III temos que tomar $D = F = 0$.
Na região II é conveniente reescrever

$$A' (\cos Kx + i \sin Kx) + B' (\cos Kx - i \sin Kx) = \underbrace{(A' + B') \cos Kx}_{B} + \underbrace{i(A' - B') \sin Kx}_{A}$$

A função de onda $\psi(x)$ e sua derivada $\psi'(x)$ ficam então:

$$\psi(x) = \begin{cases} C e^{Rx} \\ B \cos Kx + A \sin Kx \\ G e^{-Rx} \end{cases} ; \quad \psi'(x) = \begin{cases} R C e^{Rx} & x \in \text{I} \\ -KB \sin Kx + KA \cos Kx & x \in \text{II} \\ -R G e^{-Rx} & x \in \text{III} \end{cases}$$

Impondo continuidade de φ e φ' em $x = \pm a/2$ obtemos

$$C e^{-R\omega h} = -A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} \quad (1)$$

$$G e^{-R\omega h} = A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} \quad (2)$$

$$RC e^{-R\omega h} = K A \cos \frac{ka}{2} + K B \sin \frac{ka}{2} \quad (3)$$

$$-RG e^{-R\omega h} = K A \sin \frac{ka}{2} - K B \cos \frac{ka}{2} \quad (4)$$

Somando e subtraindo essas equações obtemos:

$$(1) + (2) \rightarrow (C+G)e^{-R\omega h} = 2B \cos \frac{ka}{2} \quad (5)$$

$$(3) + (4) \rightarrow (C-G)e^{-R\omega h} = 2KA \cos \frac{ka}{2} \quad (6)$$

$$(2) - (1) \rightarrow (G-C)e^{-R\omega h} = 2A \sin \frac{ka}{2} \quad (7)$$

$$(3) - (4) \rightarrow (G+C)e^{-R\omega h} = 2KB \sin \frac{ka}{2} \quad (8)$$

Os pares de equações (5)-(8) e (6)-(7) podem ser resolvidos independentemente:

(I) Se $B \neq 0$ e $C+G \neq 0$ podemos dividir (8) por (5) e obter

$$R = K \operatorname{tg} \frac{ka}{2} \quad (9)$$

(II) Se $A \neq 0$ e $C-G \neq 0$ podemos dividir (7) por (6):

$$\frac{1}{R} = -\frac{1}{K} \operatorname{tg} \left(\frac{ka}{2} \right) \quad (10)$$

A concreto que (9) e (10) são incompatíveis: substituindo

(9) em (10) obtemos

$$\frac{1}{\kappa \operatorname{tg}\left(\frac{\kappa a}{2}\right)} = -\frac{1}{\kappa} \operatorname{tg}\left(\frac{\kappa a}{2}\right), \text{ ou } \left(\operatorname{tg}\left(\frac{\kappa a}{2}\right)\right)^2 = -1$$

Temos então duas possibilidades:

(I) $B \neq 0$, $C + G \neq 0$ mas $A = 0$ e $C - G = 0$

Nesse caso $\boxed{G = C}$ e a eq. (1) fica $C e^{-\frac{R a t}{2}} = B \cos \frac{\kappa a}{2}$, ou

$$\boxed{C = B e^{-\frac{R a t}{2}} \cos \frac{\kappa a}{2}}$$

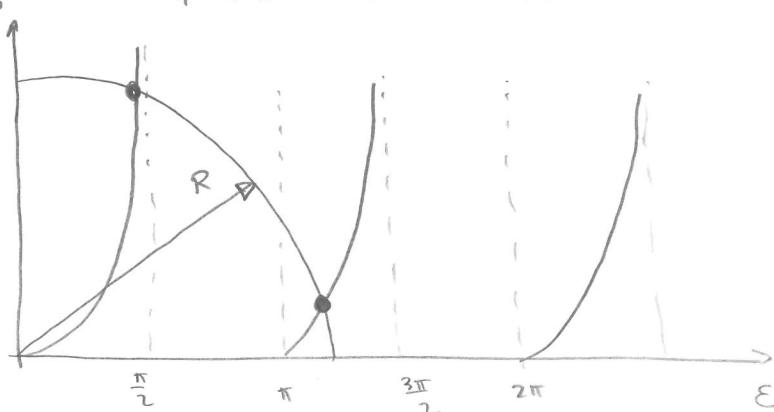
A eq. (9) deve ser satisfeita. Substituindo R e κ temos

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \operatorname{tg} \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot \frac{a^2}{4} \right]$$

Definindo $\varepsilon = \sqrt{\frac{mEa^2}{2\hbar^2}}$ obtemos:

$$\boxed{\varepsilon \operatorname{tg} \varepsilon = q(\varepsilon)} \quad \text{onde } q(\varepsilon) = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2}$$

$q(\varepsilon)$ é a equação de um círculo de raio $R = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}}$, pois pode ser escrita como



• = soluções de
 $\varepsilon \operatorname{tg} \varepsilon = q(\varepsilon)$

$$\varphi(x) = \begin{cases} B e^{R(x+\frac{\alpha}{2})} \cos(kx/2) & x \in I \\ B \cos kx & x \in II \\ B e^{-R(x-\alpha/2)} \cos(kx/2) & x \in III \end{cases}$$

Quando maior for R , maior sera R e mais soluções existirão.

Sempre existe pelo menos uma solução!

II) $A \neq 0$, $C-G \neq 0$ mas $B=0$ e $C+G=0$

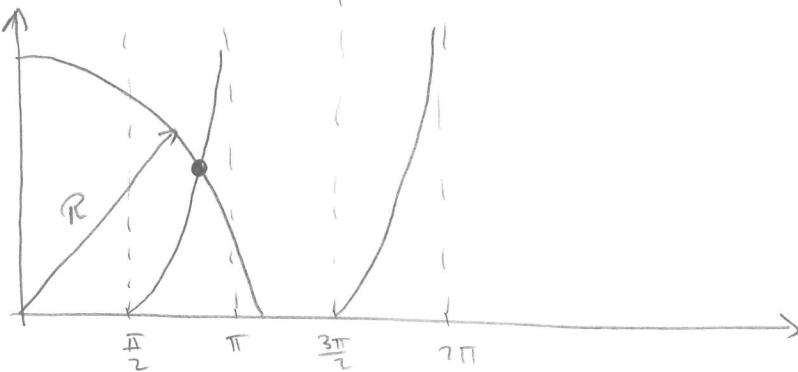
Nessa caso $\boxed{G = -C}$ e a equação (1) resulta em

$$\boxed{C = -A e^{-R\epsilon/2} \sin k\epsilon/2}$$

A equação (10) deve agora ser satisfeita. É fácil ver que ela pode ser reescrita como

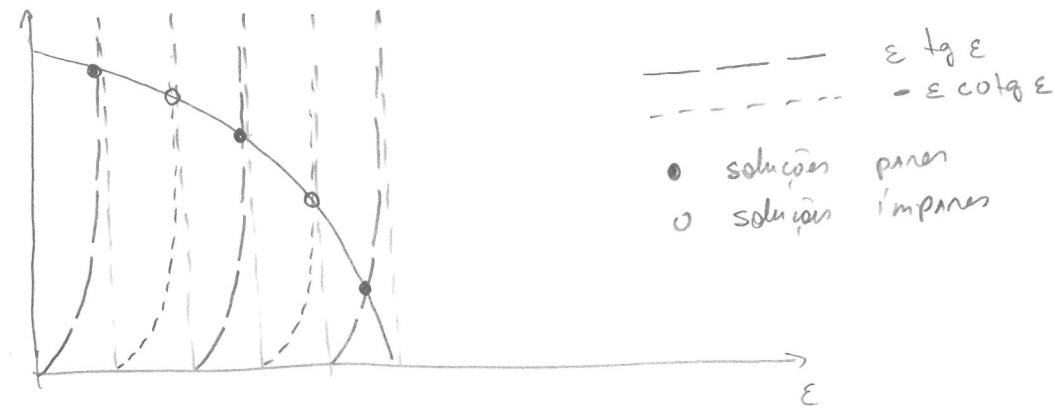
$$-\epsilon \cot \epsilon = g(\epsilon)$$

cujas soluções gráfica é:

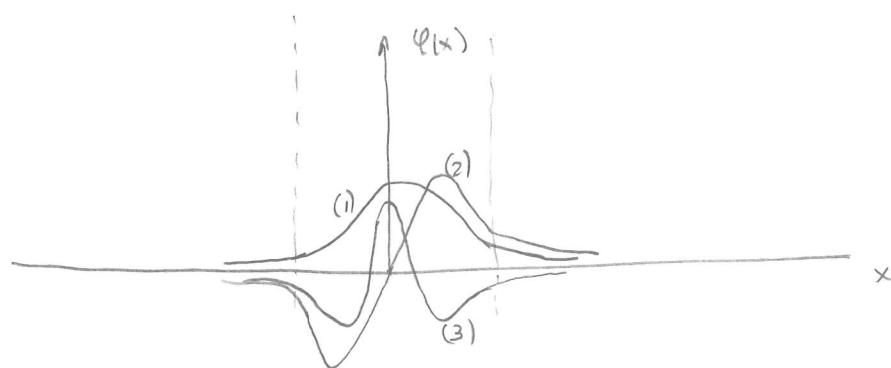
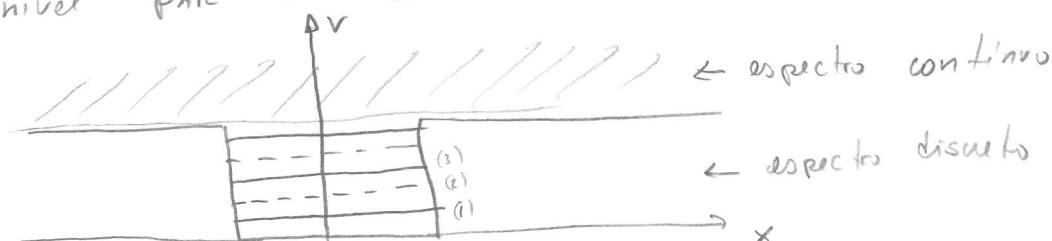


$$\psi(x) = \begin{cases} -A e^{-R(x-a/2)} \sin kx & x \in I \\ A \sin kx & x \in II \\ A e^{-R(x+a/2)} \sin kx & x \in III \end{cases}$$

Você pode verificar que as soluções (I) são pares e as (II) ímpares. Os gráficos para obter as soluções podem ser colados juntos:



Os níveis de energia são em números finitos, sempre começando com um nível par e alternando com ímpar



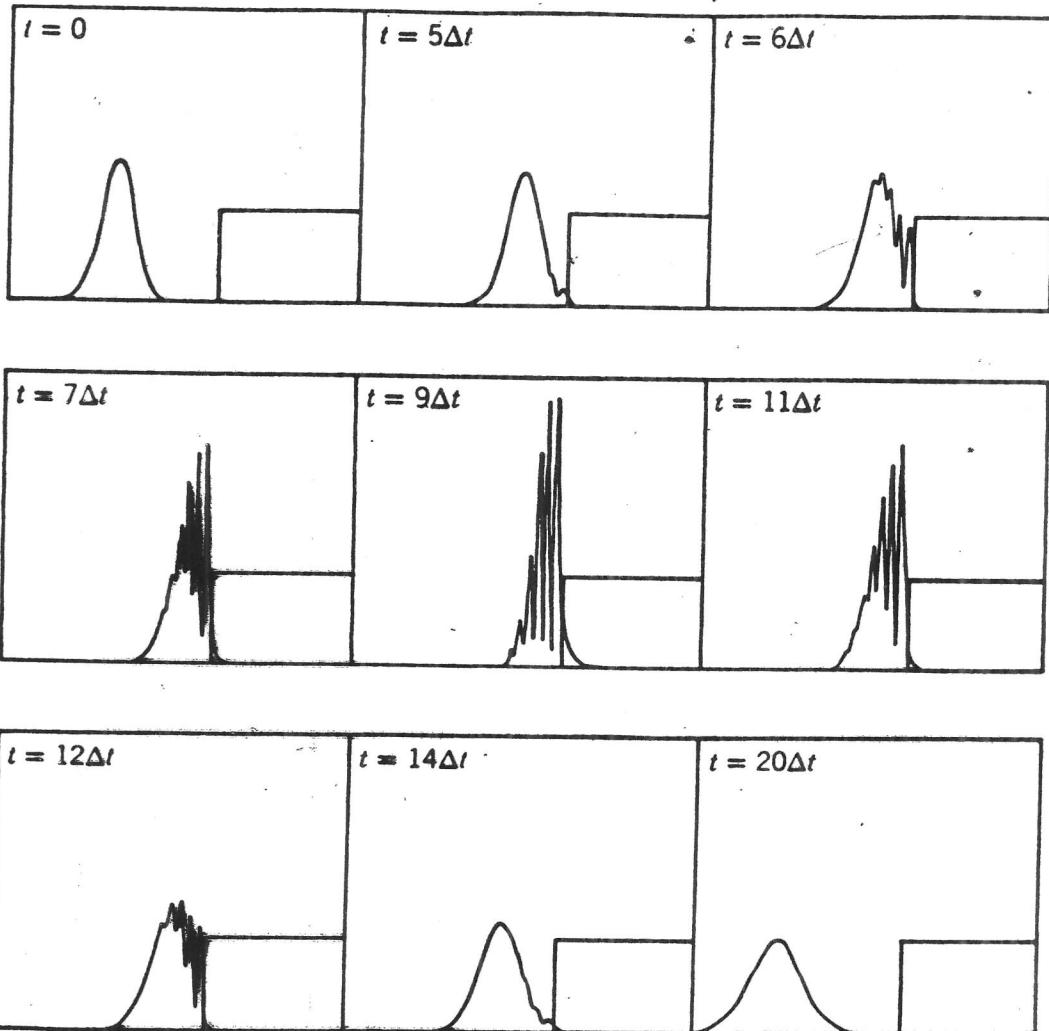


Figure 6-8 A potential step, and the probability density $\Psi^*\Psi$ for a group wave function describing a particle incident on the step with total energy less than the step height. As time evolves, the group moves up to the step, penetrates slightly into the classically excluded region, and then is completely reflected from the step. The complications of the mathematical treatment using a group are indicated by the complications of its structure during reflection.

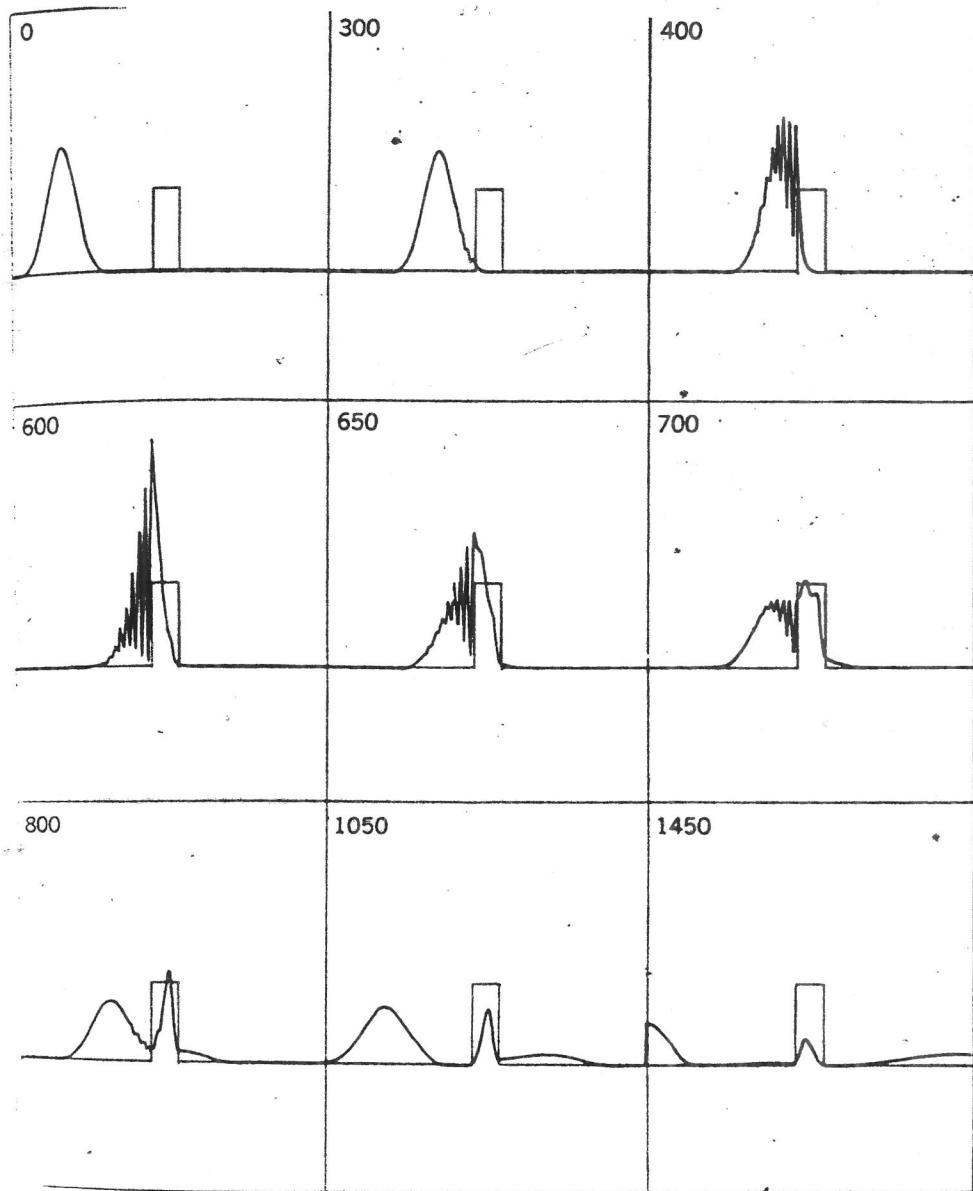


Fig. 17 Same as Fig. 16, with the mean energy equal to the barrier height.

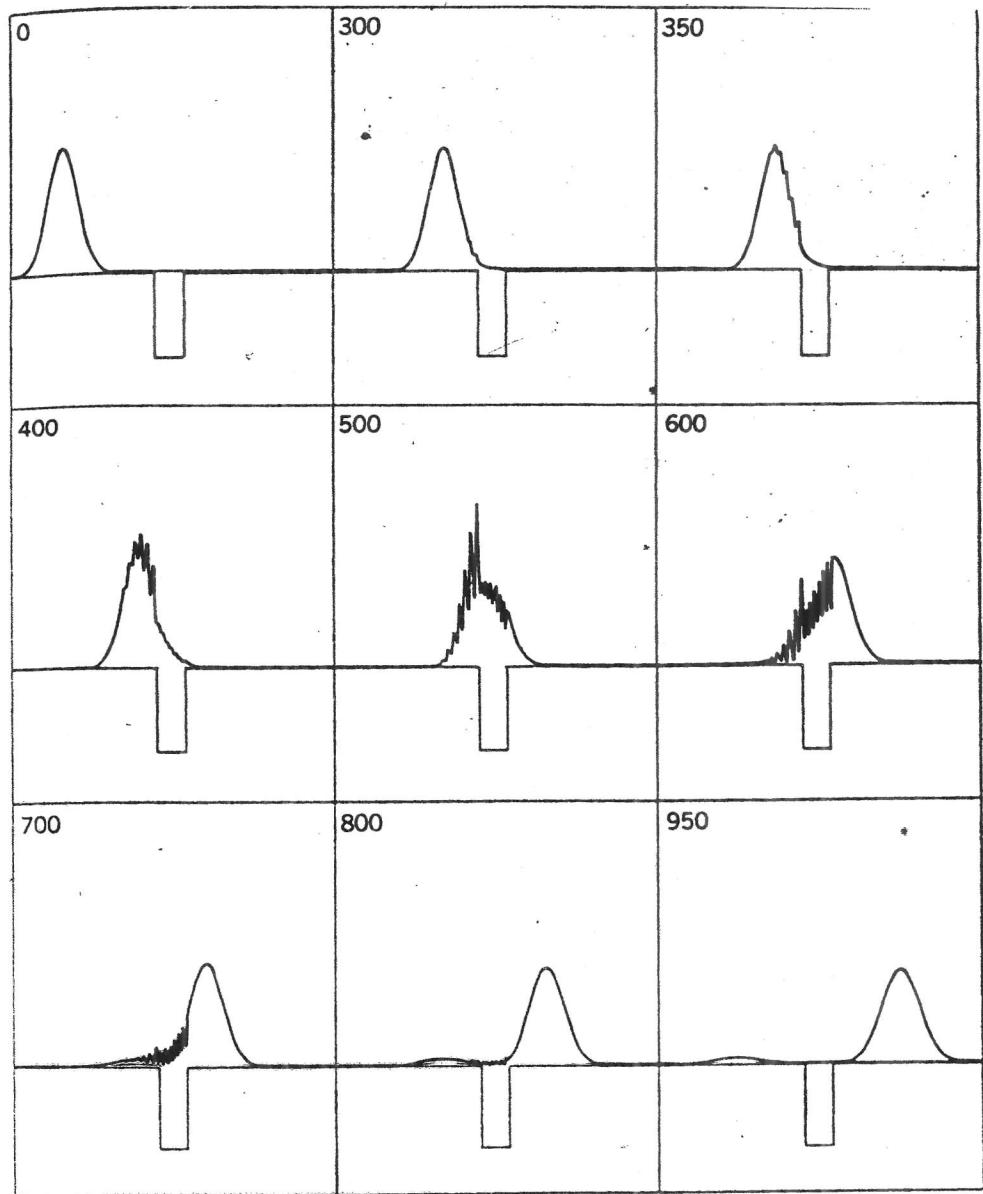


Fig. 19 Same as Fig. 18, with the mean energy equal to the well depth.

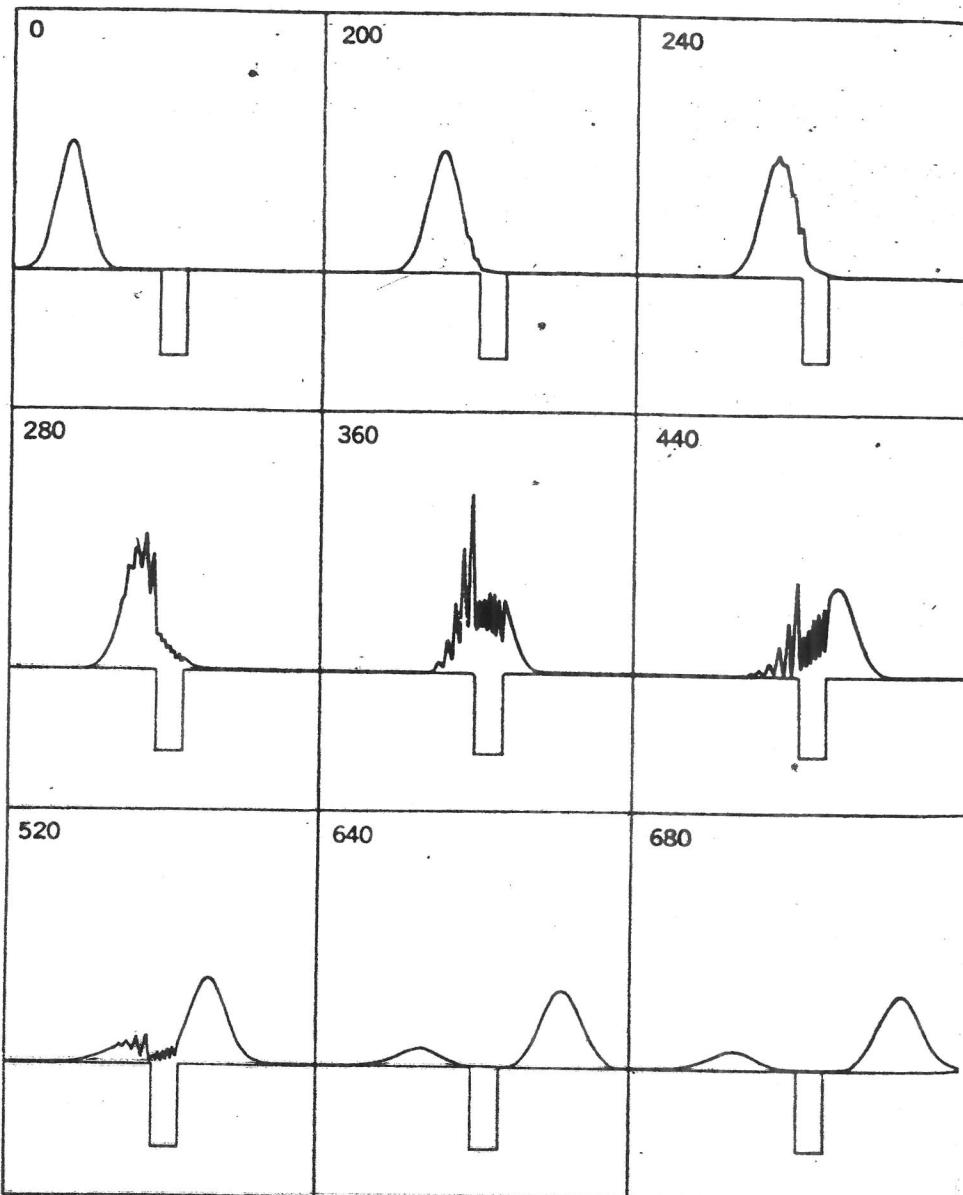


Fig. 18 Gaussian wave-packet scattering from a square well when the mean energy of the packet is half the well depth.

O oscilador Harmônico $V(x) = \frac{kx^2}{2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} \psi = E \psi \quad (1)$$

Definindo $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ podemos reescrever a eq. na forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right] \psi = 0$$

Definimos agora $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ e mudamos de variável:

$$u \equiv \sqrt{\alpha} x$$

$$\text{então, } \frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{du} \frac{du}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{du} \quad \text{e} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha \frac{d^2\psi}{du^2}.$$

A eq. d' Schrödinger fica

$$\alpha \frac{d^2\psi}{du^2} + \left[\beta - \alpha^2 \frac{u^2}{\alpha} \right] \psi = 0 \quad \text{ou}$$

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{du^2} + (\gamma - u^2) \psi = 0} \quad (2)$$

onde

$$\boxed{\gamma = \beta/\alpha = 2E/\hbar\omega} \quad (3)$$

A solução tem 3 passos:

- verificam comportamento assintótico e escrever $\varphi(u) = A e^{-\tilde{u}^2} H(u)$
- resolver $H(u)$ por série de Frobenius
- truncar a série para garantir convergência.

(I) Comportamento para $|u| \rightarrow \infty$

Podemos aproximar (2) por $\frac{d^2\varphi}{du^2} \approx u^2 \varphi$, A solução pode ser aproximada por $\varphi(u) \approx A e^{-u^2/2}$. Veja que

$$\frac{d\varphi}{du} = -u A e^{-u^2/2} \quad ; \quad \frac{d^2\varphi}{du^2} = -A e^{-u^2/2} + u^2 A e^{-u^2/2} \approx u^2 A e^{-u^2/2} = u^2 \varphi.$$

Escrevemos $\varphi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$ inspirados pelo comportamento assintótico. Então,

$$\frac{d\varphi}{du} = -u A e^{-u^2/2} H + A e^{-u^2/2} H'$$

$$\frac{d^2\varphi}{du^2} = -A e^{-u^2/2} H - 2u A e^{-u^2/2} H' + A e^{-u^2/2} H'' + u^2 A e^{-u^2/2} H$$

Substituindo em (2) e já cancelando $A e^{-u^2/2}$ obtemos

$$[-H - 2uH' + H'' + u^2 H] + (n-u)H = 0 \quad , \text{ ou}$$

$$\boxed{\frac{d^2H}{du^2} - 2u \frac{dH}{du} + (n-1)H = 0} \quad (4)$$

(II) Solução de $H(u)$ por séries

$$H(u) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l u^l$$

$$H'(u) = \sum_{l=0}^{\infty} l a_l u^{l-1} = \sum_{l=1}^{\infty} l a_l u^{l-1} = \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) a_{l+1} u^l$$

$$H''(u) = \sum_{l=0}^{\infty} l(l-1) a_l u^{l-2} = \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)(l+2) a_{l+2} u^l$$

Substituindo em (4) obtemos

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1)(l+2) a_{l+2} u^l - 2(l+1) a_{l+1} u^{l+1} + (n-1) u a_l \right] = 0$$

que deve ser satisfeita para cada potência de u :

$$\underline{u^0} \rightarrow 2a_2 + (n-1)a_0 = 0 \quad \text{ou} \quad a_2 = -\frac{n-1}{2} a_0$$

$$\underline{u^1} \rightarrow 6a_3 - 2a_1 + (n-1)a_1 = 0 \quad \text{ou} \quad a_3 = \frac{2+n-1}{6} a_1$$

$$\underline{u^2} \rightarrow 12a_4 - 4a_2 + (n-1)a_2 = 0 \quad \text{ou} \quad a_4 = \frac{4+n-1}{12} a_2$$

⋮

$$\underline{u^k} \rightarrow (k+1)(k+2) a_{k+2} - 2k a_k + (n-1)a_k = 0 \quad \text{ou}$$

$$a_{k+2} = \frac{2k-n+1}{(k+1)(k+2)} a_k$$

(5)

(a) Veja que A eq. (5) tem os coeficientes de mesma paridade: Dado a_0 podemos calcular a_2, a_4, a_6, \dots . Dado a_1 podemos calcular a_3, a_5, a_7, \dots .

(b) Para K muito grande

$$\frac{a_k}{a_{k+2}} = \frac{(k+1)(k+2)}{2k-\gamma+1} \approx \frac{k}{2}$$

$$\begin{aligned} \text{Mas a série de } e^{\mu^2} &= 1 + \mu^2 + \frac{\mu^4}{2!} + \dots + \frac{\mu^k}{(k!)!} + \dots \quad (K \text{ par}) \\ &= \sum_{k \text{ par}} b_k \mu^k \end{aligned}$$

$$\text{tem } \frac{b_k}{b_{k+2}} = \frac{(\frac{k}{2}+1)!}{(\frac{k}{2})!} = \frac{k}{2} + 1 \approx \frac{k}{2}.$$

Então, a série de $H(u)$ comporta-se assimetricalmente como $e^{\mu^2} e^{-\gamma u^2} \approx A e^{-\gamma u^2} e^{u^2} = A e^{\mu^2 u^2} \rightarrow \infty$.

Temos então que garantir que a série de $H(u)$

seja finita,

pois $\mu^k e^{-\gamma u^2} \rightarrow 0$ para $u \rightarrow \infty$ e qualquer k finito.

IIIa

TRUNHANDO A SÉRIE PAR.

Se K é par, então γ deve ser tal que para $K=n$,

$$2n - \gamma + 1 = 0 \rightarrow \gamma = 2n + 1$$

$$\gamma = 1, 5, 9, 13, \dots$$

Com isso garantimos que $a_{n+2} = a_{n+4} = \dots = 0$

$$H(u) = \sum_{l=0,2,\dots}^n a_l u^l = a_0 + a_2 u^2 + \dots + a_n u^n \quad \underline{n \text{ par}}$$

III b

TRUNCANDO A SÉRIE IMPAR.

Nesse caso, para alguma valor $k=m$ ímpar,

$$2m - r + 1 = 0 \rightarrow r = 2m + 1$$

$$r = 3, 7, 11, 15, \dots$$

Vemos que os valores de r que truncam a série para
obter truncam a série ímpar e vice-versa. Então temos:

NAO

(i) $a_1 = 0$ (e todos os termos ímpares são nulos)

$$r = 2n + 1 \quad (n \text{ par}) \quad \text{Então, quando } n = 2k, k=0,1,2,\dots$$

$$\frac{2E}{\hbar w} = 4k + 1 \quad \boxed{E = \hbar w \left(2k + \frac{1}{2} \right)}$$

$$\psi_n(u) = A e^{-\frac{u^2}{2}} \sum_{l=0}^{n/2} a_{2l} u^{2l} \rightarrow \text{função par}$$

$$= A e^{-\frac{u^2}{2}} H_n(u)$$

(ii) $a_0 = 0$ (e todos os termos pares são nulos)

$$\ell = 2m+1 \quad , \quad m \text{ ímpar} \quad m = 2k+1 \quad , \quad k=0,1,2,$$

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = 4k+3 \quad \Rightarrow \quad E = \hbar\omega \left(2k+1 + \frac{1}{2} \right)$$

$$\begin{aligned}\Psi_m(u) &= A e^{-u^2/2} \sum_{\ell=0}^{\frac{m-1}{2}} a_{2\ell+1} u^{2\ell+1} \rightarrow \text{função ímpar} \\ &\equiv A e^{-u^2/2} H_m(u)\end{aligned}$$

A funções $H(u)$ são os Polinômios de Hermite. Você

pode verificar que os polinômios abaixo são soluções:

$$H_0(u) = 1 \quad (n=0, \ell=0)$$

$$H_1(u) = u \quad (m=1, \ell=1)$$

$$H_2(u) = 4u^2 - 2 \quad (n=2, \ell=2) \quad \text{etc.}$$

Normalizando as auto-funções e voltando à variável x obtemos

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)$$

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2)$$

$$n=0, 1, 2, \dots$$

Explicitamente temos

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\Psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\Psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x - 1 \right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

A PÊNDICE - Os polinômios de Hermite. (Shiff, ap. 4.13)

34

Existe uma maneira mais elegante de resolver a equação (4) da página 28 em termos de funções genéricas. Vamos mostrar que

$$S(\xi, s) = e^{\frac{s^2}{2} - (s-\xi)^2} = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$$

ou seja, os polinômios de Hermite são os coeficientes da expansão de $S(\xi, s)$ em termos de $s = 0$.

PROVA Calculemos primeiro $\frac{\partial S}{\partial \xi}$ e $\frac{\partial S}{\partial s}$:

$$\frac{\partial S}{\partial \xi} = 2sS = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(\xi)s^{n+1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(\xi)}{n!} s^n$$

$$\frac{\partial S}{\partial s} = (-2s+2\xi)S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-2s+2\xi)H_n s^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n s^{n-1}}{(n-1)!}$$

Igualando os coeficientes da mesma potência em s obtemos:

$$\begin{cases} H'_n = 2nH_{n-1} \\ H_{n+1} = -2nH_{n-1} + 2\xi H_n \end{cases}$$

Derivando a primeira vem $H''_n = 2nH'_{n-1}$, Da segunda,

$$2nH_{n-1} = 2\xi H_n - H_{n+1} \rightarrow 2nH'_{n-1} = 2H_n + 2\xi H_n - H'_{n+1}$$

$$\text{e } H''_n = 2H_n + 2\xi H_n - H'_{n+1}$$

Fazendo $n \rightarrow n+1$ na 1ª equação, $H'_{n+1} = 2(n+1)H_n$ o que resulta

$$H''_n - 2\xi H'_n + 2nH_n = 0 , \text{ que é a equação (28.4).}$$

Para calcular $H_n(\xi)$ temos que derivar $S(s, \xi)$ n vezes

e calcular no zero:

$$\frac{\partial^n S}{\partial s^n} = e^{\xi} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-\xi)^2} = (-1)^n e^{\xi} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(s-\xi)^2}$$

ou seja usamos que, se $f = f(s-\xi)$, $\frac{\partial f}{\partial s} = -\frac{\partial f}{\partial \xi}$. Assim

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}$$

Finalmente obtemos as constantes de norma α_{2n} . Escrevendo

$$\varphi_n(x) = A_n H_n(\alpha x) e^{-x^2/2}$$

queremos encontrar A_n tal que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = \frac{|A_n|^2}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

A integral é da forma H_n e basta ligá-la à integral da função S . Seja

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s+2s\xi} e^{-t+2t\xi} e^{-\xi^2} d\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

O expoente na integral é esquadrado e: $-s-t-(\xi-(s+t))^2 + (s+t)^2 = 2st - (\xi-s-t)^2$

Mudando a variável de integração para $u = \xi - s - t$ a integral da

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{2st} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi} e^{2st} = \pi^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!}$$

Comparar de com o lado direito das integrais vemos que se $n \neq m$ a integral é zero. Para $n=m$ devemos ter

$$\pi^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} = \sum_n \frac{(st)^n}{(n!)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi \quad e$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nm}$$

A constante de normalização é então escolhida como real e

$$A_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right)^{1/2}$$