2. Dinâmica Quântica

1. Evolução Temporal e a Equação de Schrödinger

– Vamos postular a existência de um operador $U(t, t_0)$ que, quando aplicado à um ket no instante t_0 resulte no ket representando o estado do sistema no instante t:

$$|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha, t_0; t\rangle = U(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$$

Propriedades de U

1) Unitariedade $\quad U^\dagger U = U U^\dagger = 1$ para preservar norma!

$$\langle \alpha\, t_0; t | \alpha\, t_0; t\rangle = \langle \alpha, t_0 | U^\dagger U | \alpha, t_0\rangle \equiv \langle \alpha\, t_0 | \alpha\, t_0\rangle$$

Expandindo $|\alpha, t_0\rangle$ e $|\alpha, t_0; t\rangle$ em uma base teremos

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0)|a'\rangle \longrightarrow \sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1$$

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t)\,|a'\rangle. \longrightarrow \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2 = 1$$

2) Composição $\quad U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)\, U(t_1, t_0) \qquad (t_2 > t_1 > t_0)$

3) Evolução infinitesimal: $\quad |\alpha, t_0; t_0 + dt\rangle = U(t_0, t_0 + dt)\,|\alpha, t_0\rangle$

deve satisfazer $\displaystyle\lim_{dt \to 0} U(t_0, t_0 + dt) = 1 \Rightarrow$

$$U(t_0, t_0 + dt) \equiv 1 - i\Omega\, dt \qquad \text{com } \Omega^\dagger = \Omega$$

para que U seja unitário.

Isso t.b. garante a composição infinitesimal

Vemos que Ω tem dimensões de $1/t$, ou de ω. Como o gerador de evoluções infinitesimais na Mec. Clássica é o hamiltoniano, é natural escolher $\Omega = H/\hbar$ e lembramos que $\omega = E/\hbar$:

$$F(q,P) = qP + H(q,P)\,dt$$

$$p = \frac{\partial F}{\partial q} = P + \frac{\partial H}{\partial q}dt \simeq P - \dot{p}\,dt \rightarrow P = p + \dot{p}\,dt = p(t+dt)$$

$$Q = \frac{\partial F}{\partial P} = q + \frac{\partial H}{\partial P}dt \simeq q + \dot{q}\,dt \simeq q(t+dt)$$

e

$$\boxed{U(t_0+dt, t_0) = 1 - \frac{iH\,dt}{\hbar}}$$

onde $H = H(t_0)$ se H depender do tempo.

A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER e SOLUÇÕES FORMAIS: Usando a regra de composição temos

$$U(t+dt, t_0) = U(t+dt, t)\,U(t,t_0) = \left(1 - \frac{iH(t)}{\hbar}dt\right)U(t,t_0)$$

ou

$$\frac{U(t+dt, t_0) - U(t,t_0)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}H(t)\,U(t,t_0)$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial U}{\partial t} = HU}$$

Podemos ainda escrever $|\alpha, t_0; t\rangle = U(t,t_0)|\alpha\rangle$, o que leva à

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0; t\rangle = i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t}|\alpha\rangle = H\,U(t,t_0)|\alpha\rangle$$

$$= H\,|\alpha\, t_0; t\rangle$$

que dá diretamente a evolução do ket.

Soluções:

I) H independente do tempo

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{iH}{\hbar}\epsilon\right)^N \qquad \epsilon = \frac{t-t_0}{N}$$

Exemplo: $H = \omega S_z$

II) H dependente do tempo com $[H(t_1), H(t_2)] = 0$. Exemplo: $H = \vec{\mu}\cdot\vec{B}$

com $\vec{B} = B_0 \cos\xi t\,\hat{z} \Rightarrow H = \omega\cos\xi t\, S_z$. Nesse caso

$$U(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt'} = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt' + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2!}\left(\int_{t_0}^{t} H(t')dt'\right)^2 + \dots$$

PROVA: $$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{-iH(t)}{\hbar} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 H(t)\int_{t_0}^{t} H(t')dt' + \dots$$

$$= -\frac{i}{\hbar}H(t)\left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt' + \dots\right] = -\frac{i}{\hbar}H(t)\,U(t,t_0).$$

III) H dependente do tempo com $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$. Exemplo:

$H = \vec{\mu}\cdot\vec{B}$ com $\vec{B} = B_{0x}\hat{x}\cos\xi t + B_{0y}\hat{y}\sin\xi t \Rightarrow H = \omega_x S_x \cos\omega t + \omega_y S_y \sin\omega t$. Nesse caso

Em $t=0$ $H = \omega_x S_x$ e em $t = \pi/2\omega$ $H = \omega_y S_y$.

$$U(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n)$$

= Série de Dyson.

PROVA: $$U = \left(1 - \frac{iH(t_0+(N-1)\epsilon)}{\hbar}\epsilon\right)\left(1 - \frac{iH(t_0+(N-2)\epsilon)}{\hbar}\epsilon\right)\cdots\left(1 - \frac{iH(t_0+\epsilon)}{\hbar}\epsilon\right)\left(1 - \frac{iH(t_0)}{\hbar}\epsilon\right)$$

$$\epsilon \equiv \frac{t-t_0}{N} \qquad t_K = t_0 + K\epsilon$$

$$U = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t_1)\, U(t_1, t_0)\, dt_1$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t_1) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} H(t_2)\, U(t_2 t_0)\, dt_1\, dt_1$$

$$U = 1 + \left[\text{termos com } 1\ H\right] + \left[\text{termos com } 2\ H\right] + \ldots \left[\text{termos com } N H\right]$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\left[H(t_{N-1}) + H(t_{N-2}) + \ldots H(t_1) + H(t_0)\right]\epsilon +$$

$$\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \left\{ H(t_{N-1})\left[H(t_{N-2}) + \ldots H(t_1) + H(t_0)\right] + H(t_{N-2})\left[H(t_{N-3}) + \ldots H(t_1) + H(t_0)\right] + \ldots H(t_1)\, H(t_0) \right\}$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t_1)\,dt_1 + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \left[\int_{t_0}^{t} H(t_1) \int_{t_0}^{t_1} H(t_2)\,dt_2\,dt_1\right] + \ldots$$

EIGENKETS – Em geral os auto-estados de H são degenerados e precisamos de outros operadores que comutam com H para rotular cada estado. Sejam $A, B, \ldots$ esses operadores que comutam entre si e individualmente com H e

$$|K'\rangle = |a' b', E'\rangle$$ os kets simultâneos com

$$\sum_{K'} |K'\rangle\langle K'| = 1$$

Então, para H independente do tempo e $t_0 = 0$,

$$e^{-iHt/\hbar} = \sum_{K'} e^{-iE't/\hbar} |K'\rangle\langle K'| \quad \text{e}$$

$$|K', t\rangle = e^{-iHt/\hbar}|K'\rangle = e^{-iE't/\hbar}|K'\rangle$$

mudança de fase apenas

Para um estado $|\alpha\rangle$ genérico

$$|\alpha\rangle = \sum_{k'} c_{k'} |k'\rangle$$

$$|\alpha, t\rangle = \sum_{k'} c_{k'} e^{-iE't/\hbar} |k'\rangle = \sum_{k'} c_{k'}(t) |k'\rangle$$

com $c_{k'}(t) = e^{-iE't/\hbar} c_{k'}(0)$

DEPENDÊNCIA TEMPORAL DE VALORES ESPERADOS

(A) Para um estado $|k'\rangle$ e um operador O qualquer

$$\langle O \rangle = \langle k' | e^{iE't/\hbar} O e^{-iE't/\hbar} | k'\rangle = \langle k' | O | k'\rangle$$

$=$ independente do tempo

$\Rightarrow$ $|k'\rangle$ são ditos estados estacionários

(B) Para $|\alpha\rangle = \sum c_{k'} |k'\rangle$

$$\langle O \rangle = \sum_{k',k''} c_{k'}^{*} e^{iE't/\hbar} c_{k''} e^{-iE''t/\hbar} \langle k' | O | k''\rangle$$

$$= \sum_{k',k''} c_{k'}^{*} c_{k''} \langle k' | O | k''\rangle e^{-i\omega_{k'k''}t}$$

$$\omega_{k'k''} \equiv \frac{E' - E''}{\hbar}$$ = frequências de Bohr

= independentes do operador O.

Exemplo: Precessão de Spin — Considere um spin

sujeito a um campo magnético constante:

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

$$\vec{\mu} = \frac{e}{mc}\vec{S} \qquad ; \qquad \vec{B} \equiv B_0\hat{z}$$

$$H = \omega S_z \quad \text{onde} \quad \omega = -\frac{eB_0}{mc} = \frac{|e|B_0}{mc} \quad ; \quad e<0$$

$$U(t,0) = e^{-\frac{i\omega S_z}{\hbar}t} \qquad ; \qquad H|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar\omega}{2}|\pm\rangle$$

Para $\quad |\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$

$$|\alpha,0;t\rangle = c_+ e^{-i\omega t/2}|+\rangle + c_- e^{i\omega t/2}|-\rangle$$

(A) Se $c_+=1$, $c_-=0$ $\quad |\alpha,0;t\rangle = e^{-i\omega t/2}|+\rangle$ = estado estacionário

(B) Se $c_+=c_-=\frac{1}{\sqrt{2}}$ $\quad |\alpha\rangle = |S_x,+\rangle$ NÃO é um est. estacionário

A probabilidade de uma medida de S_x resultar $\pm\hbar/2$ é:

$$|\langle S_x\pm|\alpha,0;t\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle+| \pm \langle-|\right]\left[e^{-\frac{i\omega t}{2}}|+\rangle + e^{+i\omega t/2}|-\rangle\right]\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2$$

$$= \left|\frac{1}{2}\left[e^{-\frac{i\omega t}{2}} \pm e^{\frac{i\omega t}{2}}\right]\right|^2 = \begin{cases}\cos^2\omega t/2 & \text{p/ } +\hbar/2\\ \sin^2\omega t/2 & \text{p/ } -\hbar/2\end{cases}$$

Exercício: calcular

$$\langle S_z\rangle = 0$$

$$\langle S_y\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\omega t$$

$$\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\omega t$$

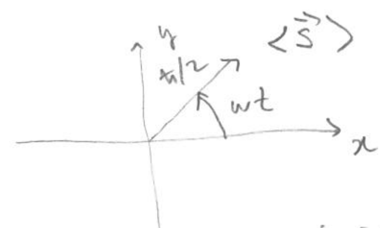


IMAGEM CLÁSSICA DA PRECESSÃO.

FUNÇÃO DE AUTO-CORRELAÇÃO e PRINC. INCERTEZA ENERGIA-TEMPO

$$C(t) \equiv \langle \alpha | \alpha, 0; t \rangle = \langle \alpha | U(t,0) | \alpha \rangle$$

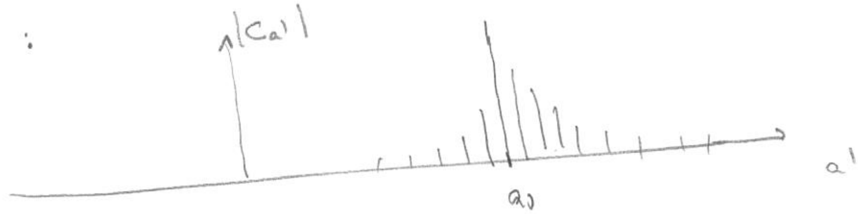
Expandindo $|\alpha\rangle$ nos auto-estados de H:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \qquad H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle$$

$$U(t,0)|\alpha\rangle = \sum_{a'} e^{-iE_{a'}t/\hbar} c_{a'} |a'\rangle \quad \text{e}$$

$$C(t) = \sum_{a'} |c_{a'}|^2 e^{-iE_{a'}t/\hbar} \quad \text{com} \quad \sum_{a'} |c_{a'}|^2 = 1$$

Se $|\alpha\rangle = |a'\rangle$ $\quad C(t) = e^{-iE_{a'}t/\hbar}$ e $|C(t)| = 1$. Para estimar $C(t)$ em geral vamos supor que os $c_{a'}$ estão concentrados em torno de uma energia E_0:

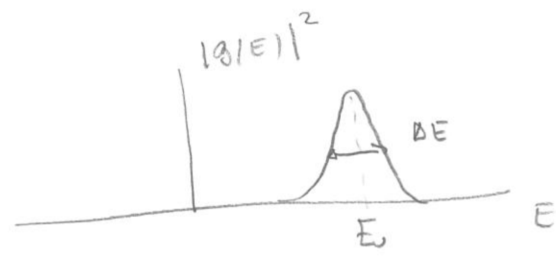


Vamos ainda tomar o limite do contínuo fazendo

$$\left.\begin{aligned} \sum_{a'} &\to \int dE\, \rho(E) \\ c_{a'} &\to g(E) \end{aligned}\right\} \quad |\alpha\rangle = \int g(E')\, \rho(E')\, |E'\rangle\, dE'$$

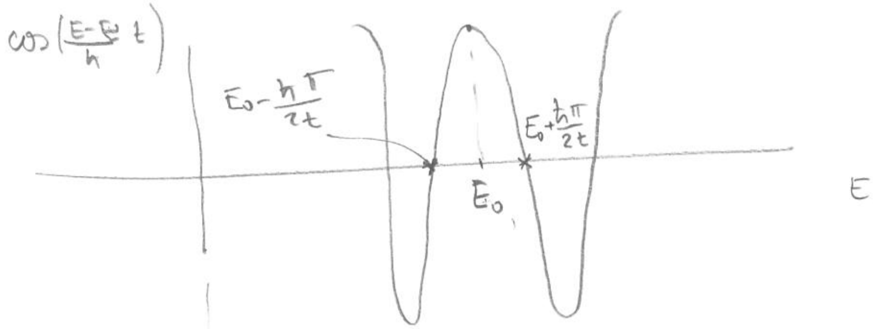
$$C(t) = \int \rho(E)\, |g(E)|^2 e^{-iEt/\hbar}\, dE \quad \text{com}$$

$$\int \rho(E)\, |g(E)|^2\, dE = 1$$



Podemos então escrever

$$C(t) = e^{-iE_0 t/\hbar} \int \rho(E)\,|g(E)|^2\, e^{\frac{-i(E-E_0)t}{\hbar}}\, dE$$



Se $\Delta E \gg \frac{\hbar\pi}{t}$ as oscilações do cosseno matam a integral

$\Rightarrow$ p/ ΔE fixo pelo estado $|\alpha\rangle$ se $t \gg \frac{\hbar\pi}{\Delta E}$ $C(t) \to 0$

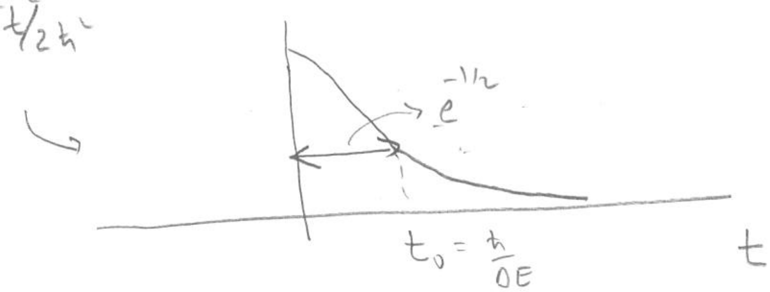
A integral será significativa até $t \sim \frac{\hbar\pi}{\Delta E}$ onde verifica-se

$$t\,\Delta E \sim \hbar$$

Para se convencer do resultado tome $\rho(E)=1$ $|g(E)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta} e^{-\frac{(E-E_0)^2}{2\Delta E^2}}$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta}\int e^{-\frac{(E-E_0)^2}{2\Delta E^2} - i\frac{(E-E_0)t}{\hbar}}\, dE = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\Delta}\int e^{-\frac{1}{2\Delta E^2}\left(x + \frac{it\Delta E^2}{\hbar}\right) - \frac{t^2\Delta E^2}{2\hbar^2}}\, dx \qquad \underline{x = E - E_0}$$

$$= e^{-\Delta E^2 t^2/2\hbar^2}$$

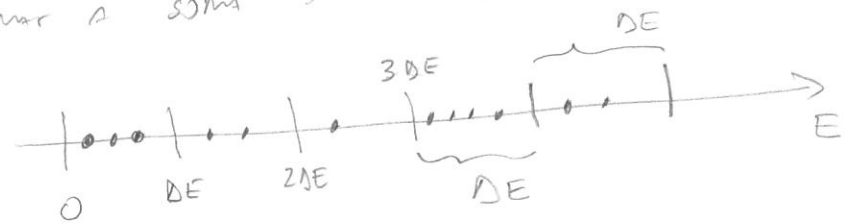


A interpretação de t_0 é que t_0 é o tempo necessário para que o estado propagado difira significativamente do estado inicial. Quanto mais próximo o estado for de um auto-estado, i.e. quanto menor ΔE, maior será esse tempo.

O limite do contínuo feito na página 40 pode ser feito da seguinte forma: começamos com

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n |E_n\rangle \quad ; \quad H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle .$$

Os autovalores E_n distribuem-se de maneira irregular sobre o eixo E e queremos fazer uma partição regular, de largura ΔE para transformar a soma em integral:



• = Autovalores E_n

No intervalo ΔE (pequeno) assumimos que os c_n tem o mesmo valor: $c_n = c(E_k)$ p/ $(k-1)\Delta E < E_n < k\Delta E$; $E_k \equiv k\Delta E$

Seja $N(E_k)$ = número de autovalores no k-ésimo intervalo E_k.

Então,

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n|E_n\rangle = \sum_k c(E_k)\frac{N(E_k)}{\Delta E}|E_k\rangle \Delta E$$

i.e., re-organizamos a soma sobre os E_n em uma soma sobre intervalos de energia fixos ΔE. No limite $\Delta E \to 0$

$$|\alpha\rangle = \int c(E)\,\rho(E)\,|E\rangle\, dE \qquad \text{onde } \rho(E) = \lim_{\Delta E\to 0}\frac{N(E_k)}{\Delta E}$$

é a densidade de níveis (nº de níveis por intervalo de energia).

2.2 - As descrições de Schrödinger e Heisenberg

Na mecânica clássica o estado de uma partícula é dado por $x(t)$ e $p(t)$.
Na mecânica quântica aparecem estados $|\alpha\rangle$ e operadores x, p, H, etc.
Na descrição de Schrödinger os estados evoluem mas os operadores não:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha, 0; t\rangle = U(t,0)|\alpha\rangle$$

$$x \longrightarrow x \quad ; \quad p \to p \quad ; \quad \text{etc.}$$

A descrição de Heisenberg opta pelo oposto: o estado do sistema é sempre $|\alpha\rangle$, mas os operadores carregam a dependência temporal, quase como na mec. clássica.

A idéia é a seguinte: dados $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ e X podemos calcular

$$\langle \alpha, 0; t| X |\beta, 0; t\rangle = \langle\alpha| U^{\dagger}(t,0)\, X\, U(t,0)|\beta\rangle$$

$$\equiv \langle\alpha| X^{H}(t)|\beta\rangle$$

onde

$$X^{H}(t) = U^{\dagger} X U = e^{\frac{iHt}{\hbar}} X e^{-iHt/\hbar}$$

Exemplo: Seja $\tau(d\mathbf{x}') = 1 - \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}$ o operador de translação.
Vamos usar τ ao invéz de U para exemplificar a operação.

Schrödinger:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow \left(1 - \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$$

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x}$$

Heisenberg

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle$$

$$\mathbf{x} \longrightarrow \tau^{\dagger}\mathbf{x}\tau = \left(1 + \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\mathbf{x}\left(1 - \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)$$

$$= \mathbf{x} + \frac{i}{\hbar}\left[\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}', \mathbf{x}\right] = \mathbf{x} + d\mathbf{x}'$$

EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

$$A^H(t) = U^+ A U \quad ; \quad A^H(0) = A^S$$

$$|\alpha, 0; t\rangle_S = U(t,0)\,|\alpha\rangle = U|\alpha\rangle_H \quad ; \quad |\alpha, 0; 0\rangle_S = |\alpha\rangle_H$$

$$\frac{dA^H}{dt} = \frac{dU^+}{dt} A U + U^+ A \frac{dU}{dt}$$ se A NÃO depende do tempo

Como $i\hbar \dfrac{\partial U}{\partial t} = HU$, $-i\hbar \dfrac{\partial U^+}{\partial t} = U^+ H$

$$\frac{dA^H}{dt} = \frac{i}{\hbar} U^+ H A U - \frac{i}{\hbar} U^+ A H U = \frac{i}{\hbar}\left[U^+ H U U^+ A U - U^+ A U U^+ H U\right]$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left[H^H, A^H\right] = \frac{i}{\hbar}\left[H, A^H\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[A^H, H\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[A, H\right]^H$$

TEOREMA DE EHRENFEST

Vamos primeiramente demonstrar dois resultados úteis:

$$[x_i, F(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i}$$

$$[p_i, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i}$$

Prova. Escrevendo $F(\mathbf{p}) = \sum C_{k\ell m}\, p_1^k p_2^\ell p_3^m$

$$[x_1, F(\mathbf{p})] = \sum C_{k\ell m}\, [x_1, p_1^k]\, p_2^\ell p_3^m$$

$$[x_1, p_1] = i\hbar$$

$$[x_1, p_1^2] = p_1 [x_1, p_1] + [x_1, p_1] p_1 = 2i\hbar p_1$$

$$[x_1, p_1^3] = p_1 \underbrace{[x_1, p_1^2]}_{2i\hbar p_1} + \underbrace{[x_1, p_1]}_{i\hbar} p_1^2 = 3i\hbar p_1^2$$

$$[x_1, F(\mathbb{P})] = \sum_{k,\ell m} k i\hbar C_{k\ell m} P_1^{k-1} P_2^{\ell} P_3^{m} = i\hbar \frac{\partial}{\partial P_1} F$$

A demostração para as outras componentes é idêntica, e o mesmo procedimento se aplica p/ o segundo comutador.

A) Partícula livre

$$H = \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_3^2\right)$$

$$\begin{cases} \dfrac{dX_i^H}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar}[X_i^H, H] = \dfrac{1}{i\hbar} U^+[X_i, H]U = \dfrac{1}{i\hbar m} U^+ P_i U i\hbar \\ \dfrac{dP_i^H}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar}[P_i^H, H] = \dfrac{1}{i\hbar}[P_i, H] = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad P_i^H(t) = P_i(0) = P_i^S$$

$$\frac{dX_i^H}{dt} = \frac{P_i}{m} \rightarrow X_i^H(t) = X_i(0) + \frac{P_i(0)}{m} t$$

Veja que $\quad [X_i^H(t), X_i^H(0)] = \dfrac{t}{m}[P_i, X_i] = \dfrac{-i\hbar t}{m} \neq 0$

B) Partícula em um potencial

$$H = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + V(\mathbb{X})$$

Primeiramente notamos que a equação de movimento pode ser escrita como

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[U^+AUU^+HU - U^+HUU^+AU\right] = \frac{1}{i\hbar}[A, H]^{(H)}$$

Podemos então omitir o índice (H) em tudo e colocá-lo no final

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = \frac{1}{i\hbar}[p_i, V(x)] = -\frac{\partial V}{\partial x_i}$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[x_i, \frac{p^2}{2m}\right] = \frac{p_i}{m}$$

ou ainda,

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{dp_i}{dt} = -\frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial x_i} \Rightarrow \boxed{m\frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x_i}}$$

Tomando valores médios chegamos ao Teorema de Ehrenfest:

$$\boxed{m\frac{d^2}{dt^2}\langle \mathbf{x} \rangle = -\langle \nabla V \rangle}$$

Esse teorema NÃO diz que o valor médio de $\mathbf{x}$ segue a trajetória clássica. Para $V(x) = x^k$ (1-D) teremos

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle = -k\langle x^{k-1}\rangle \neq -k\langle x\rangle^{k-1}$$

a não ser que $k=2$, que é o caso do oscilador harmônico.

AUTOESTADOS

Um ponto que geralmente traz alguma confusão na representação de Heisenberg é que, apesar do estado do sistema não mudar com o tempo, os autoestados de um operador mudam, pois o próprio operador muda!

Partimos de

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle$$

que t.b. vale p/ Heisenberg em $t=0$. Como $A^{(H)} = U^{\dagger} A U$ podemos multiplicar à esquerda por $U^{\dagger}$:

$$U^{\dagger} A U U^{\dagger}|a'\rangle = A^{(H)}\left[U^{\dagger}|a'\rangle\right] = a'\left[U^{\dagger}|a'\rangle\right]$$

$\Rightarrow$ temos o mesmo espectro mas os auto-estados evoluem com $U^{\dagger}$!

Dado um estado do sistema $|\alpha\rangle$ perguntamos qual a probabilidade de medi-lo em $|b'\rangle$, auto-estado de B no instante t:

<u>SCHRÖDINGER</u>

$$|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle \qquad P = |\langle b'|U|\alpha\rangle|^2$$
$$|b'\rangle \to |b'\rangle$$

<u>HEISENBERG</u>

$$|\alpha\rangle \to |\alpha\rangle \qquad P = |\langle b'|U|\alpha\rangle|^2$$
$$|b'\rangle \to U^{\dagger}|b'\rangle$$

Ou seja, as descrições fornecem resultados idênticos.

2.3 O OSCILADOR HARMÔNICO

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right) \qquad a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right)$$

$$[a, a^+] = \frac{m\omega}{2\hbar}\left[x + \frac{ip}{m\omega}, x - \frac{ip}{m\omega}\right] = \frac{m\omega}{2\hbar}\left\{\frac{-i}{m\omega}[x,p] + \frac{i}{m\omega}[p,x]\right\} = 1$$

$$a^+a = \frac{m\omega}{2\hbar}\left\{x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2} + \frac{i}{m\omega}[x,p]\right\} = \frac{1}{\hbar\omega}\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2} - \frac{\hbar\omega}{2}\right]$$

$$H = \hbar\omega\,(a^+a + 1/2) \equiv \hbar\omega\,(N + 1/2)$$

Autoestado de H = autoestado de $N \equiv |n\rangle$

$$H|n\rangle = \hbar\omega\,(n + 1/2)\,|n\rangle$$

É fácil mostrar que

$$[N, a] = -a \;\rightarrow\; Na|n\rangle = (n-1)\,a|n\rangle \rightarrow a|n\rangle = c|n-1\rangle$$

$$[N, a^+] = a^+ \;\rightarrow\; Na^+|n\rangle = (n+1)\,a^+|n\rangle \rightarrow a^+|n\rangle = d|n+1\rangle$$

supondo que os $|n\rangle$ são normalizados temos que

$$\langle n|a^+a|n\rangle = |c|^2\langle n-1|n-1\rangle = n$$

$$n = |c|^2 \;\rightarrow\; |c| = \sqrt{n} \;\rightarrow$$

DAQUI VEM TAMBÉM QUE $n \geq 0$

$$\langle n|aa^+|n\rangle = |d|^2\langle n+1|n+1\rangle$$

$$\langle n|a^+a+1|n\rangle = |d|^2$$

$$n + 1 = |d|^2 \;\rightarrow\; |d| = \sqrt{n+1}$$

$$|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\,a|n\rangle$$

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\,a^+|n\rangle$$

Como $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ que tem autovalor $n-1$, a aplicação sucessiva de a pode gerar autovalores negativos, o que não é permitido pois $n \geq 0$. Então n deve ser inteiro p/ que $a|0\rangle = 0$ e a série termina. Assim

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

$$|1\rangle = a^+|0\rangle$$

$$|2\rangle = \frac{a^+}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{a^{+2}}{\sqrt{2}}|0\rangle$$

$$\vdots$$

$$|n\rangle = \frac{a^{+n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

O estado fundamental pode ser calculado na representação $|x'\rangle$:

$$0 = \langle x'|a|0\rangle = \langle x'|\left(x + \frac{ip}{m\omega}\right)|0\rangle = \left(x' + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x'}\right)\langle x'|0\rangle$$

$$\langle x'|0\rangle = A\,e^{\alpha x'^2}$$

$$\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|0\rangle = \frac{2\hbar\alpha x'}{m\omega}\langle x'|0\rangle \Rightarrow x' + \frac{2\hbar\alpha x'}{m\omega} = 0$$

$$\boxed{\alpha = -\frac{m\omega}{2\hbar}}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\langle x'|0\rangle|^2 dx' = |A|^2 \int e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x'^2} dx' = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$\langle x'|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x'^2}{2\hbar}}$$

Os estados excitados são obtidos pela aplicação sucessiva de a^+:

$$\langle x'|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(x' + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x'}\right)^n e^{-\frac{m\omega x'^2}{2\hbar}}$$

Exercício Calcule, para o estado fundamental

$$\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0$$

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \longrightarrow \left\langle \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2}\langle H\rangle$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \longrightarrow \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2}\langle H\rangle$$

$$\langle \Delta x^2\rangle\langle \Delta p^2\rangle = \hbar^2/4$$

EVOLUÇÃO TEMPORAL

As equações de mov. de Heisenberg são

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x, H] = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}[x, p^2] = p/m$$

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x$$

Em termos de a e a^+ as equações desacoplam:

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\frac{dx}{dt} + \frac{i}{m\omega}\frac{dp}{dt}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\frac{p}{m} - i\omega x\right) = -i\omega a$$

$$\frac{da^+}{dt} = i\omega a$$

As soluções são
$$a(t) = a(0)\, e^{-i\omega t}$$
$$a^+(t) = a^+(0)\, e^{i\omega t}$$

Invertendo as relações de a e a^+ obtemos

$$a + a^+ = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x \quad \longrightarrow \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a + a^+)$$

$$a - a^+ = \frac{1}{m\omega}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, i p \quad \longrightarrow \quad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,(a^+ - a)$$

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[a(0)e^{-i\omega t} + a^+(0)e^{i\omega t}\right] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a(0) + a^+(0))\cos\omega t$$
$$+ \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(-a(0) + a^+(0))\, i\sin\omega t$$

$$\begin{cases} x(t) = x(0)\cos\omega t + \dfrac{p(0)}{m\omega}\sin\omega t \\ p(t) = -m\omega\, x(0)\sin\omega t + p(0)\cos\omega t \end{cases}$$

Exercício : Obtenha $x(t)$ a partir de $x(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}}\, x\, e^{-iHt/\hbar}$.

Exercício : Estados coerentes do osc. harmônico são definidos como autoestados de a:

$$a|z\rangle = z|z\rangle$$

(A) Mostre que $|z\rangle = e^{-|z|^2/2}\, e^{za^+}|0\rangle$

Escrevendo $|z\rangle = \sum_n c_n(z)|n\rangle$

$$a|z\rangle = \sum_n c_n\sqrt{n}\,|n-1\rangle \equiv z|z\rangle$$

$$\Rightarrow \quad c_n\sqrt{n} = z\, c_{n-1} \quad \rightarrow \quad c_n = \frac{z}{\sqrt{n}}\, c_{n-1}$$

DADO c_0 temos $c_1 = z c_0$; $c_2 = \frac{z}{\sqrt{2}} c_1 = \frac{z^2}{\sqrt{2}} c_0$, ...

$$c_n = \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\, c_0 \quad \text{e}$$

$$|z\rangle = \sum \frac{z^n c_0}{\sqrt{n!}}|n\rangle = c_0 \sum_n \frac{z^n a^{+n}}{n!}|0\rangle$$

$$|z\rangle = c_0\, e^{z a^\dagger} |0\rangle$$

$$\langle z | z \rangle \equiv 1 = |c_0|^2 \sum_{n,m} \frac{z^{*m} z^n}{\sqrt{n!\,m!}} \langle m | n \rangle = |c_0|^2 \sum_n \frac{|z|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|z|^2}$$

$$\Rightarrow \quad |c_0| = e^{-|z|^2/2}$$

(B) Calcule $|z;t\rangle$ p/ $H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$

$$e^{-iHt/\hbar} |z\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} c_0 |n\rangle = \sum_n \frac{z^n c_0 e^{-i\omega t(n+1/2)}}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

$$= \sum_n \frac{\left(z e^{-i\omega t}\right)^n}{\sqrt{n!}} c_0 |n\rangle\, e^{-i\omega t/2}$$

$$= |z e^{-i\omega t}\rangle\, e^{-i\omega t/2}$$

(C) Mostre que $\langle z_1 | z_2 \rangle = e^{z_1^* z_2 - \frac{|z_1|^2}{2} - \frac{|z_2|^2}{2}}$

(veja pg. 73)

2.4 A equação de onda de Schrödinger

A função de onda $\psi(x',t) = \langle x' | \alpha, t_0 ; t\rangle$ satisfaz uma eq. diferencial que pode ser deduzida a partir da equação dinâmica geral

$$i\hbar \frac{d|\alpha\rangle}{dt} = H|\alpha\rangle \, .$$

Para $$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$ vemos que

$$\langle x' | \frac{p^2}{2m} | \alpha\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$$

$$\langle x' | V(x) | \alpha\rangle = V(x')\psi$$

$$\langle x' | \frac{d}{dt} | \alpha\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\langle x'|\alpha\rangle = \frac{\partial\psi}{\partial t}$$

de forma que

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi}$$

(usaremos agora x em vez de x', pois não há mais operadores).

ESTADOS ESTACIONÁRIOS

Nesse caso $|\alpha, 0; t\rangle = e^{-iE't/\hbar}|\alpha\rangle$

onde $H|\alpha\rangle = E'|\alpha\rangle \longrightarrow |\alpha\rangle \equiv |u_{E'}\rangle$

A função de onda fica $\psi(x,t) = \langle x | e^{-iEt/\hbar} | u_E\rangle$

$$= u_E(x)\, e^{-iEt/\hbar}$$

e a equação para $u_E(x)$ fica

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_E + V(x)\, u_E = E\, u_E}$$ Eq. Schr. Ind. Tempo

O aluno deve estar familiarizado com essa equação de autovalores e com a maneira pela qual a quantização dos níveis de energia segue da imposição de condições de contorno sobre $u_E(x)$ no caso de movimento limitado.

O aluno deve ser capaz de resolver os seguintes problemas:

- potencial degrau (1-D)
- barreira de potencial quadrada (1-D)
- poço de potencial quadrado finito e infinito (1-D)
- oscilador harmônico (1-D)
- Átomo de Hidrogênio (3-D)

INTERPRETAÇÃO DA FUNÇÃO DE ONDA : módulo e fase

Como $\psi(x,t) = \langle x \,|\, \alpha\, t_0 ; t \rangle$,

$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 =$ densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em x

Escrevendo

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi \longrightarrow \times\, \psi^*$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^* \longrightarrow \times\, \psi$$

subtraindo (-)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \left[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right]$$

Definimos então o fluxo de probabilidade, ou corrente, por

$$\mathbf{j}(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right] = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}(\psi^* \nabla \psi)$$

e obtemos a equação de continuidade

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0} \quad = \text{ conservação da probabilidade}$$

O fluxo de probabilidade deve estar ligado ao momento, pois se a partícula se desloca, deve carregar consigo a probabilidade associada.

De fato vemos que

$$\int \mathbf{j}(x,t)\, d^3x = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left[\int \psi^* \nabla \psi\right] = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left[\frac{i}{\hbar}\int \psi^* \mathbf{p}\, \psi\, d^3x\right]$$

$$= \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle_t$$

Escrevendo

$$\psi(x,t) = \sqrt{\rho}\; e^{\frac{i}{\hbar} S(x,t)}$$

vemos que

$$\psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho}\, e^{-\frac{i}{\hbar}S}\left[\frac{1}{2\sqrt{\rho}} \nabla \rho\, e^{iS/\hbar} + \frac{i}{\hbar}\sqrt{\rho}\, \nabla S\, e^{iS/\hbar}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\nabla \rho + \frac{i}{\hbar}\rho \nabla S$$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{j} = \frac{1}{m}\rho \nabla S \equiv \rho\, \text{"}v\text{"}$$

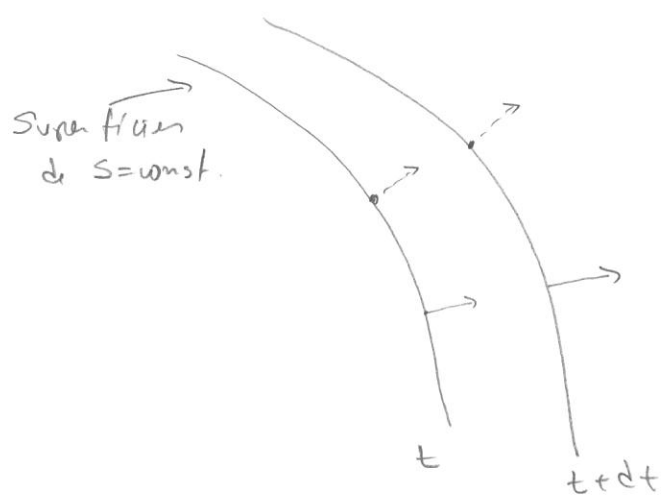
Veja que o fluxo $\mathbb{j}$ está na direção do gradiente de $S(x,t)$, ou seja, é perpendicular à superfície de $S = \text{const}$.

Interpretando $\nabla S = \mathbb{P}$ (veja adiante) temos uma imagem dinâmica parecida com a da óptica geométrica:

$S(x,t) = a$ define uma "frente de onda"

$S(x, t+dt) = a$ é a frente de onda propagada

A "trajetória" da partícula é obtida seguindo $\mathbb{P} = \nabla S$, e são como "raios de luz", perpendiculares às frentes de onda:



LIMITE SEMICLÁSSICO - WKB

Substituindo $\psi(x,t) = \sqrt{\rho}\, e^{iS/\hbar}$ na eq. de onda

obtemos:

$$\nabla^2\psi = \nabla\cdot(\nabla\psi) = \nabla\cdot\left[\frac{1}{2\sqrt{\rho}}\nabla\rho\, e^{iS/\hbar} + \frac{i}{\hbar}\nabla S\sqrt{\rho}\, e^{\frac{i}{\hbar}S}\right]$$

$$= \frac{\nabla^2\rho}{2\sqrt{\rho}}\, e^{iS/\hbar} + \nabla\rho\cdot\left[-\frac{e^{iS/\hbar}}{4\rho\sqrt{\rho}}\nabla\rho + \frac{i}{2\hbar\sqrt{\rho}}\nabla S\right]$$

$$+ \frac{i}{\hbar}\nabla^2 S\sqrt{\rho}\, e^{\frac{i}{\hbar}S} + \nabla S\cdot\left[\frac{i}{2\hbar\sqrt{\rho}}\nabla\rho\, e^{\frac{i}{\hbar}S} - \frac{1}{\hbar^2}\sqrt{\rho}\,\nabla S\right]$$

onde usamos $\nabla\cdot(f\vec{v}) = f\,\nabla\cdot\vec{v} + \nabla f\cdot\nabla v$. Então

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{2\sqrt{\rho}}\nabla^2\rho - \frac{1}{4\rho\sqrt{\rho}}|\nabla\rho|^2 + \frac{i}{\hbar\sqrt{\rho}}\nabla\rho\cdot\nabla S + \frac{i}{\hbar}\sqrt{\rho}\,\nabla^2 S - \frac{\sqrt{\rho}}{\hbar^2}|\nabla S|^2\right]$$

$$+ V\sqrt{\rho} = i\hbar\left[\frac{1}{2\sqrt{\rho}}\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\sqrt{\rho}\,\frac{\partial S}{\partial t}\right]$$

que envolve termos de ordem $\hbar^2$, $\hbar^1$ e $\hbar^0$. Supondo que $\hbar$ é pequeno em relação às grandezas envolvidas podemos olhar apenas os termos de ordem $\hbar^0$:

$$\boxed{\frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$$

que é a Equação de Hamilton-Jacobi. A função

$S(x,t)$ = função principal de Hamilton = ação clássica.

Em 1-D podemos escrever

$$S(x,t) = \underset{\substack{\uparrow\\ \text{função característica de Hamilton}}}{W(x)} - Et$$

que corresponde aos estados estacionários

$$\psi(x,t) = \sqrt{\rho(x)}\; e^{\frac{i}{\hbar}W - iEt/\hbar}$$

se impomos também que ρ não depende do tempo.

Assim,

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + V = E \rightarrow W(x) = \pm\int^x \sqrt{2m(E-V(x'))}\, dx' = \pm\int^x p(x')dx'$$

Como $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, $0 = \frac{\partial}{\partial x}(j) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\rho}{m}\frac{\partial S}{\partial x}\right)$ e

$$\frac{\rho}{m}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right) = \frac{\rho}{m}\sqrt{2m(E-V(x))} = \text{const}$$

e
$$\sqrt{\rho} = \frac{\text{const}}{[2m(E-V(x))]^{1/4}} = \frac{\text{const}}{\sqrt{p(x)}}.$$

A forma explícita da função de onda estacionária vai depender da região espacial, pois podemos ter $V(x) < E$ ou $V(x) > E$. Omitindo a fase temporal $e^{-iEt/\hbar}$ temos

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar}\int^x p(x')dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int^x p(x')dx'} \quad \text{se} \quad E > V(x)$$

e

$$\psi(x) = \frac{D_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int^x |p(x')|dx'} + \frac{D_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{+\frac{1}{\hbar}\int^x |p(x')|dx'} \quad \text{se} \quad E < V(x)$$

onde $|p(x)| = \sqrt{2m(V(x)-E)}$; $p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))}$. Essas formas são conhecidas como <u>aproximações WKB</u> para a função de onda.

Antes de tratar o caso específico de estados ligados, notamos que os termos de ordem $\hbar$ na eq. geral no topo da página 56 podem ser escritos como

$$-\frac{1}{m\sqrt{\rho}}\nabla\rho\cdot\nabla S - \frac{\sqrt{\rho}}{m}\nabla^2 S = \frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial\rho}{\partial t} \qquad \text{ou}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{m}\nabla S\cdot\nabla\rho + \frac{\rho}{m}\nabla^2 S = 0$$

Lembrando que $\mathbf{j} = \frac{1}{m}\rho\nabla S$ isso pode ser reescrito como

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\frac{\rho}{m}\nabla S\right) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j} = 0$$

que é a equação da continuidade.

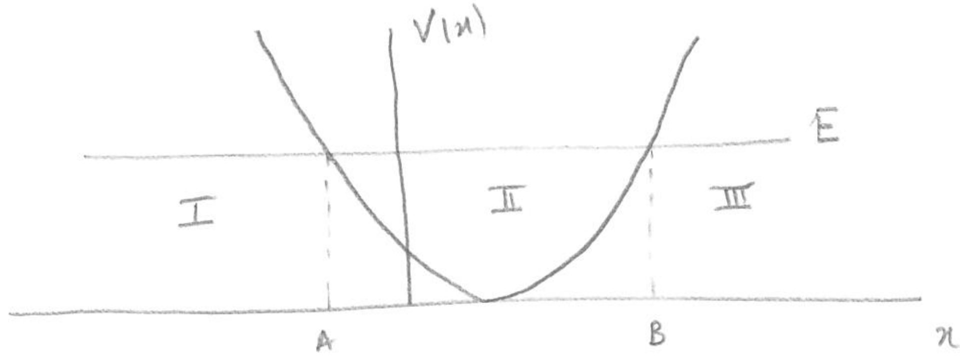
Com isso, o único termo que ficou de fora foi $-\frac{\hbar^2}{4m\sqrt{\rho}}\nabla^2\rho$.

Esse termo pode ser incluído no potencial fazendo

$$V \rightarrow V - \frac{\hbar^2}{4m\rho}\nabla^2\rho \equiv V_Q$$

na equação de Hamilton-Jacobi. Ao fazer isso temos uma equação exata, idêntica à eq. de Schrödinger. O "potencial quântico" V_Q foi introduzido por Bohm, que procurava uma descrição em termos de trajetórias clássicas. Note que esse potencial depende da própria função de onda e que ele diverge quando $|\psi|^2 = \rho \rightarrow 0$.

Vamos considerar então o caso de estados ligados:



Para cada E o eixo x fica dividido em três regiões. Para que a função de onda fique finita em $x \to \pm\infty$ devemos ter

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{D_1}{2\sqrt{|p|}} \, e^{\frac{1}{\hbar}\int^x |p(x')|\,dx'} & \text{em I} \\ \dfrac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\int^x p(x')\,dx' + \varphi \right) & \text{em II} \\ \dfrac{D_2}{2\sqrt{|p(x)|}} \, e^{-\frac{1}{\hbar}\int^x |p(x')|\,dx'} & \text{em III} \end{cases}$$

Como essas três partes representam aproximações para uma mesma função de onda, os coeficientes D_1, D_2, C e φ devem estar todos relacionados, sobrando apenas uma constante independente que é obtida por normalização.

O problema é que, nos pontos de conexão $x = A$ e $x = B$, $V(x) = E$ e $p(x) = 0$. Nesses pontos (e em suas vizinhanças) a aproximação WKB não vale.

A saída está em resolver a equação de Schrödinger diretamente para $x \approx B$ e $x \approx A$. Começamos com $x \approx B$.

Expandindo

$$V(x) \approx V(B) + \frac{\partial V}{\partial x}(B)\,(x-B) = E - F_B\,(x-B) \quad ; \quad F_B < 0$$

$$= E - |F_B|\,(B-x)$$

Então $\quad p(x) = \sqrt{2m\,(E-V(x))} \simeq \sqrt{2m|F_B|\,(B-x)}$ e

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = (E - V(x))\,\psi \approx F_B\,(B-x)\,.$$

Acontece que essa equação tem solução exata (veja no apêndice ao final desta seção) em termos de duas funções especiais de Airy, $Ai(x)$ e $Bi(x)$. Como $Bi(x)$ diverge p/ $x \to \pm\infty$ ficamos com $Ai(x)$ apenas:

$$\psi(x) = C\,Ai(x) = \frac{C}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} - \frac{uy}{\hbar^{2/3}}\right) du \qquad \text{onde}$$

$$y \equiv (2m|F_B|)^{1/3}\,(B-x)$$

Embora complicada, essa função tem comportamento assintótico simples para $y >> 0$ ($x << B$, i.e., na região II) e para $y << 0$ (região III):

$$\psi(x) \approx \begin{cases} \dfrac{C}{y^{1/4}}\cos\left(\dfrac{2y^{3/2}}{3\hbar} - \dfrac{\pi}{4}\right) & y >> 0 \quad (x < B\,,\ \mathrm{II}) \\[2ex] \dfrac{C}{2}\dfrac{1}{|y|^{1/4}}\exp\left\{-\dfrac{2|y|^{3/2}}{3\hbar}\right\} & y << 0 \quad (x > B\,,\ \mathrm{III}) \end{cases}$$

Essas expressões tem a forma WKB. De fato veja que

$$\frac{2y^{3/2}}{3} = \frac{2}{3}\left(2m|F_B|\right)^{1/2}(B-x)^{3/2} = -\int_B^x \sqrt{2m|F_B|(B-x')}\,dx' = -\int_B^x p(x')\,dx' .$$

e a forma assintótica pode ser re-escrita como (veja que $y(x) \simeq p^2(x)$)

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_B^x p(x')\,dx' + \pi/4\right) & \text{em II} \\[2ex] \dfrac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_B^x |p(x')|\,dx'\right\} & \text{em III} \end{cases}$$

Comparando com a expressão WKB vemos que

$$\boxed{D_2 = C} \qquad \boxed{\varphi = \pi/4}$$

Vamos agora refazer essa análise para $x \simeq A$ e impor a compatibilidade das expressões na região II, comum a ambas as análises. Para $x \propto A$ temos

$$V(x) \simeq V(A) + \frac{\partial V}{\partial x}(A)(x-A) = E - F_A(x-A) \quad ; \quad F_A > 0$$

$$p(x) = \sqrt{2m(E-V(x))} \simeq \sqrt{2mF_A(x-A)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = (E-V(x))\psi \simeq F_A(x-A)$$

$$\psi(x) = c' A_i(x) = \frac{c'}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} - \frac{u y'}{\hbar^{2/3}}\right) du$$

$$y' \equiv (2mF_A)^{1/3}(x-A)$$

Novamente vemos que $y'(x) \sim p'(x)$ e que

$$\frac{2y'^{3/2}}{3} = \frac{2}{3}\left(2mF_A\right)^{1/2}(x-A)^{3/2} = \int_x^A \sqrt{2mF_A(x-A)} = \int_x^A p(x')\,dx' .$$

Nessa região as expressões assintóticas de $\psi(x)$ são:

$$\psi(x) \simeq \begin{cases} \dfrac{c'}{2|y'|^{1/4}} \exp\left\{\dfrac{-2|y'|^{3/2}}{3\hbar}\right\} = \dfrac{c'}{2\sqrt{|p(x')|}} \exp\left\{\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_A^x |p(x')|\,dx'\right\} & \text{em I} \\[2ex] \dfrac{c'}{|y|^{1/4}} \cos\left(\dfrac{2y'^{3/2}}{3\hbar} - \dfrac{\pi}{4}\right) = \dfrac{c'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^A p(x')\,dx' - \dfrac{\pi}{4}\right) & \text{em II} \end{cases}$$

e obtemos $\boxed{D_1 = C}$ e $\boxed{\varphi = -\pi/4}$

Em resumo, a solução WKB deve ser da forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{c'}{2|p|^{1/2}}\, e^{\frac{1}{\hbar}\int_A^x |p(x')|\,dx'} & ;\ \text{I} \\[2ex] \dfrac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_B^x p(x')\,dx' + \pi/4\right) = \dfrac{c'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_A^x p(x')\,dx' - \pi/4\right) & ;\ \text{II} \\[2ex] \dfrac{C}{2|p(x)|^{1/2}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_B^x |p(x')|\,dx'} & ;\ \text{III} \end{cases}$$

Para compatibilizar as soluções na região II fazemos

$$\frac{1}{\hbar}\int_A^x p(x')\,dx' - \frac{\pi}{4} = \underbrace{\frac{1}{\hbar}\int_A^B p(x')\,dx' - \frac{\pi}{2}}_{\xi} + \frac{1}{\hbar}\int_B^x p(x')\,dx' + \frac{\pi}{4}$$

Impondo que $\xi = n\pi$ teremos

$$c' \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_A^x p(x')\,dx' - \pi/4\right) = c' \underbrace{\cos(n\pi)}_{(-1)^n} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_B^x p(x')\,dx' + \pi/4\right)$$

e precisamos impor ainda que $c = c'(-1)^n$. Então só existe solução consistente para energias E_n que satisfazem

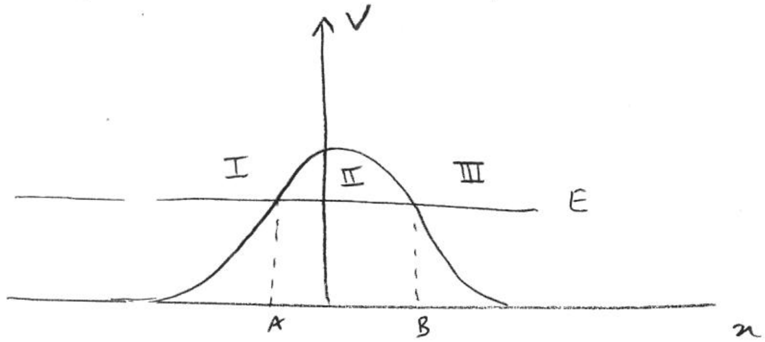
$$\boxed{\int_A^B \sqrt{2m(E-V(x))}\,dx = (n+1/2)\pi\hbar} \equiv \text{regra de quantização Bohr-Sommerfeld.}$$

e, para essas energias

$$\psi_n(x) \simeq \begin{cases} \dfrac{c'}{2\sqrt{|p|}}\, e^{\frac{1}{\hbar}\int_A^x |p(x')|\,dx'} & ;\ \text{em I} \\[2ex] \dfrac{c'}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_A^x p(x')\,dx' - \pi/4\right) & ;\ \text{em II} \\[2ex] \dfrac{(-1)^n c'}{2\sqrt{|p(x)|}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_B^x |p(x')|\,dx'} & ;\ \text{em III} \end{cases}$$

TUNELAMENTO

Vamos agora considerar um potencial do tipo barreira



A solução semiclássica geral é

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{A}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} + \dfrac{R}{\sqrt{p}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} & \text{em I} \\ \dfrac{C}{\sqrt{|p|}}\, e^{\frac{1}{\hbar}\int |p| dx} + \dfrac{D}{\sqrt{|p|}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p| dx} & \text{em II} \\ \dfrac{T}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} \end{cases}$$

para uma onda que vem da esquerda.

Próximo do ponto de retorno B temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = F_B(x-B) \qquad \text{com} \qquad F_B = -\frac{\partial V}{\partial x}(B) > 0$$

A solução agora deve envolver a função $Bi(y)$ também:

$$\psi(x) = F\, Ai(y) + G\, Bi(y) \quad ; \quad y = (2mF_B)^{\frac{1}{3}}(B-x)$$

A função $Bi(y)$ satisfaz a mesma equação que $Ai(y)$, sendo L.I. Seu comportamento assintótico é dado por

$$Bi(y') \simeq \begin{cases} \dfrac{1}{|y'|^{\frac{1}{4}}} e^{2|y'|^{3/2}/3} & \text{si} \quad y' > 0 \quad (\text{em II}) \\ \dfrac{1}{|y'|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|y'|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & \text{si} \quad y' < 0 \quad (\text{em III}) \end{cases}$$

Na região III fazemos

$$\psi_{III} = F\,Ai(y) + G\,Bi(y) \approx$$

$$\frac{F}{|y|^{1/4}} \sin\left(\frac{2|y|^{3/2}}{3} + \pi/4\right) + \frac{G}{|y|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|y|^{3/2} + \pi/4\right) \Rightarrow \boxed{F = iG}$$

$$= \frac{G}{|y|^{1/4}} e^{\frac{2i}{3}|y|^{3/2} + i\pi/4}$$

OBS $Ai(y) \sim \frac{1}{y^{1/4}} \cos(u - \pi/4)$

$= \frac{1}{y^{1/4}} \cos(u + \pi/4 - \pi/2)$

$= \frac{1}{y^{1/4}} \sin(u + \pi/4)$

veja que, na região III $(x > B)$,

$$\frac{2}{3}|y|^{3/2} = \frac{2}{3}\sqrt{2mF_B}\,(x-B)^{3/2} = \int_B^x \sqrt{2mF_B}\,(x'-B)^{1/2}\,dx' = \int_B^x p(x')\,dx'$$

Na região II ficamos com

$$\psi_{II}(x) = G\left(i\,Ai(y) + Bi(y)\right)$$

$$\approx \frac{iG}{2\,y^{1/4}} e^{-2y^{3/2}/3\hbar} + \frac{G}{y^{1/4}} e^{+2y^{3/2}/3\hbar}$$

$$\Rightarrow \boxed{T = Ge^{i\pi/4}} \qquad C = G, \quad D = iG/2$$

$$\boxed{C = Te^{-i\pi/4}} \qquad \boxed{D = \tfrac{1}{2} i T e^{-i\pi/4}}$$

Na fronteira entre as regiões I e II fazemos a mesma coisa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = F_A(x-A) = -F_A(A-x) \quad ; \quad F_A = -\frac{\partial V}{\partial x}(A) < 0$$

$$\psi(x) = \alpha\, A_i(y) + \beta\, B_i(y) \quad ; \quad y = \left(-2mF_A\right)^{1/3}(A-x) \Rightarrow \begin{array}{l} y>0 \Rightarrow \mathrm{III} \\ y<0 \Rightarrow \mathrm{II} \end{array}$$

Em III

$$\psi(x) \approx \frac{\alpha}{y^{1/4}}\sin\left(\frac{2y^{3/2}}{3}+\pi/4\right) + \frac{\beta}{y^{1/4}}\cos\left(\frac{2y^{3/2}}{3}+\pi/4\right)$$

$$= \frac{(\beta-i\alpha)}{2}\frac{1}{y^{1/4}}\, e^{\frac{2i}{3}y^{3/2}+i\pi/4} + \frac{(\beta+i\alpha)}{2y^{1/4}}\, e^{-\frac{2i}{3}y^{3/2}-i\pi/4}$$

$$\tfrac{1}{2}(\beta-i\alpha)\, e^{i\pi/4} = A$$

$$\tfrac{1}{2}(\beta+i\alpha)\, e^{-i\pi/4} = R$$

Em II

$$\psi(x) \simeq \frac{\alpha}{2|y|^{1/4}}\, e^{-\frac{2|y|^{3/2}}{3\hbar}} + \frac{\beta}{|y|^{1/4}}\, e^{+\frac{2|y|^{3/2}}{3\hbar}}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\alpha}{2} = D \qquad \beta = C \qquad \text{com}$$

$$\frac{2}{3}|y|^{3/2} = \frac{2}{3}\sqrt{-2mF_A}\,(x-A)^{3/2} = \int_A^x \sqrt{-2mF_A}\,(x'-A)^{1/2}\,dx'$$

$$= \int_A^B |p(x')|\,dx' + \int_B^x |p(x')|\,dx' \quad \Rightarrow \quad \Delta \equiv \int_A^B |p(x')|\,dx'$$

$$\frac{\alpha}{2}\, e^{-\Delta/\hbar} = D = \tfrac{1}{2} i T e^{-i\pi/4}$$

$$\beta\, e^{\Delta/\hbar} = C = T e^{-i\pi/4}$$

Assim, em I teremos

$$A = \frac{(\beta - i\alpha)}{2} e^{i\pi/4} = \frac{1}{2}\left(T e^{-i\pi/4} e^{-\Delta/\hbar}\right) e^{i\pi/4} - \frac{i}{2}\left(iT e^{-i\pi/4} e^{\Delta}\right) e^{i\pi/4}$$

$$= \frac{T}{2} e^{-\Delta/\hbar} + \frac{T}{2} e^{\Delta/\hbar} = T\left(\frac{e^{-\Delta/\hbar} + e^{\Delta/\hbar}}{2}\right) = T\cosh \Delta/\hbar$$

$$R = \frac{(\beta + i\alpha)}{2} e^{-i\pi/4} = \frac{1}{2}\left(T e^{-i\pi/4} e^{-\frac{\Delta}{\hbar}}\right) e^{-i\pi/4} + \frac{i}{2}\left(iT e^{-i\pi/4} e^{\frac{\Delta}{\hbar}}\right) e^{-i\pi/4}$$

$$= -i\frac{T}{2} e^{-\Delta/\hbar} + i\frac{T}{2} e^{\Delta/\hbar} = -iT\left(\frac{e^{-\Delta/\hbar} - e^{\Delta/\hbar}}{2}\right) = iT\sinh \Delta/\hbar$$

$\Rightarrow$ o coeficiente de transmissão fica

$$t = \frac{|T|^2}{|A|^2} = \frac{1}{\left(\frac{e^{\Delta/\hbar} + e^{-\Delta/\hbar}}{2}\right)^2} = \simeq 4e^{-2\Delta/\hbar} = 4e^{-\frac{2}{\hbar}\int_A^B |p(x')|\,dx'}$$

e o de reflexão,

$$r = \frac{|R|^2}{|A|^2} = \frac{|T|^2\left(e^{-\Delta/\hbar} - e^{\Delta/\hbar}\right)^2}{|T|^2\left(e^{-\Delta/\hbar} + e^{\Delta/\hbar}\right)^2} = \mathrm{tgh}^2\frac{\Delta}{\hbar} \simeq 1$$

$$\simeq 1 - 4e^{-2\Delta/\hbar} = 1 - 4e^{-\frac{2}{\hbar}\int_A^B |p(x')|\,dx'}$$

Veja que $t + r = 1$.

$$
\begin{cases}
\dfrac{T\cosh\Delta/\hbar}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x')dx'} + \dfrac{iT\sinh\Delta/\hbar}{\sqrt{p}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x')dx'} \\[2ex]
\dfrac{T e^{-i\pi/4}}{\sqrt{|p|}}\, e^{\frac{1}{\hbar}\int |p(x')|dx'} + \dfrac{i}{2}\dfrac{T e^{-i\pi/4}}{\sqrt{|p|}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int^{x} |p(x')|dx'} \\[2ex]
\dfrac{T}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x')dx'}
\end{cases}
$$

$$
t = \frac{|T|^2}{|A|^2} = 4\, e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p(x')|dx'}
$$

Exemplos

1) $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Para E fixo os ptos de retorno são dados por $x_\pm = \pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$. Como a trajetória no plano $x-p$ é uma elipse:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \longrightarrow \frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/m\omega^2} = 1$$

então

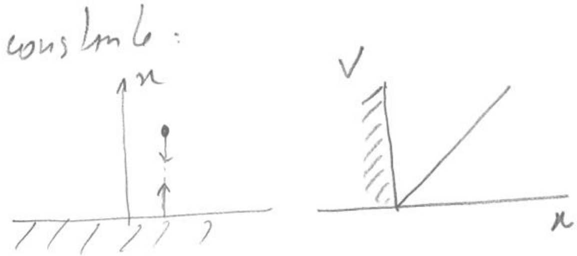
$$\int_{x_-}^{x_+} p(x,E)\,dx = \frac{1}{2}\pi a b = \frac{\pi}{2}\sqrt{2mE}\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \frac{\pi E}{\omega}$$

e

$$\frac{\pi E}{\omega} = (n+1/2)\pi\hbar \longrightarrow E_n = (n+1/2)\hbar\omega = \text{exato}$$

2) Partícula pulando em campo gravitacional constante:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x \leq 0 \\ mgx & \text{se } x > 0 \end{cases}$$



Como $\psi(0) = 0$ podemos considerar as soluções ímpares do problema $V(x) = mg|x|$. Os ptos de retorno são $x_\pm = \pm E/mg$ e

$$\int_{x_-}^{x_+} p(x,E)\,dx = 2\int_0^{E/mg}\sqrt{2m(E-mgx)}\,dx = 2\sqrt{2mE}\int_0^{E/mg}\sqrt{1-\frac{mgx}{E}}\,dx$$

$$= 2\sqrt{2mE}\,\frac{E}{mg}\underbrace{\int_0^1\sqrt{1-y}\,dy}_{-\frac{2}{3}(1-y)^{3/2}\Big|_0^1 = \frac{2}{3}} = \frac{4}{3g}\sqrt{\frac{2}{m}}\,E^{3/2} = (n+\tfrac{1}{2})\pi\hbar$$

com $n = 1, 3, 5$

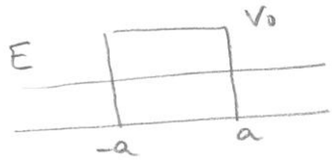
ou ainda

$$\frac{2}{3g}\sqrt{\frac{2}{m}}\,E^{3/2} = \left(n-\frac{1}{4}\right)\pi\hbar \qquad n=1,2,3,\ldots$$

e

$$E_n = \left[\frac{3(n-1/4)\pi}{2}\right]^{2/3}\left(\frac{mg^2\hbar^2}{2}\right)^{1/3}$$

3) Tunelamento por um barreira quadrada $(E < V_0)$



$$t = 4\,e^{-2\int_{-a}^{a}|p(x)|\,dx}$$

$$\frac{p^2}{2m} + V_0 = E \qquad |p| = \sqrt{(V_0-E)2m}$$

$$t = 4\exp\left\{-4a\sqrt{2m(V_0-E)}\right\}$$

4) FUNÇÃO DE ONDA WKB p/ o oscilador harmônico:

Precisamos calcular, na região II

$$I_2 = \int_B^{x} p(x')\,dx' = \int_B^{x} \sqrt{2m\left(E - \frac{m\omega^2 x'^2}{2}\right)}\,dx' = \sqrt{2mE}\int_B^{x}\sqrt{1 - \frac{m\omega^2 x'^2}{2E}}\,dx'$$

FAZENDO $x' = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin\theta$ $\quad dx' = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\cos\theta\,d\theta$

$$I_2 = \frac{2E}{\omega}\int_{\theta_B}^{\theta_x}\cos^2\theta\,d\theta = \frac{E}{\omega}\left[\theta + \frac{\sin 2\theta}{2}\right]_{\theta_B}^{\theta_x} = \frac{E}{\omega}\left[\theta + \sin\theta\cos\theta\right]_{\theta_B}^{\theta_x}$$

$$= \frac{E}{\omega}\left[\arcsin\left(x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\right) - \arcsin\left(B\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\right) + x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\sqrt{1-\frac{m\omega^2 x^2}{2E}} - B\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\sqrt{1-\frac{m\omega^2 B^2}{2E}}\right]$$

Como $\frac{m\omega^2 B^2}{2} = E$,

$$\boxed{I_2 = \frac{E}{\omega}\left[\arcsin\left(x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\right) + x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\sqrt{1-\frac{m\omega^2 x^2}{2E}} - \frac{\pi}{2}\right]}$$

Na região III a integral é

$$I_3 = \sqrt{2mE}\int_B^{x}\sqrt{\frac{m\omega^2 x'^2}{2E} - 1}\,dx'$$

. Fazemos agora $x' = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\cosh\theta$

$dx' = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sinh\theta$

$$= \frac{2E}{\omega}\int_{\theta_B}^{\theta_x}\sinh^2\theta\,d\theta = \frac{E}{\omega}\left[-\theta + \sinh\theta\cosh\theta\right]_{\theta_B}^{\theta_x}$$

$$= \frac{E}{\omega}\left[-\operatorname{arccosh}\left(x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\right) + \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}\,x\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}x^2 - 1}\right]$$

Para $x \gg B$, $\quad I_3 \approx \frac{E}{\omega}\cdot\frac{m\omega^2}{2E}x^2 = \frac{m\omega x^2}{2} \Rightarrow \psi(x) \sim e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$

que é o comportamento correto.

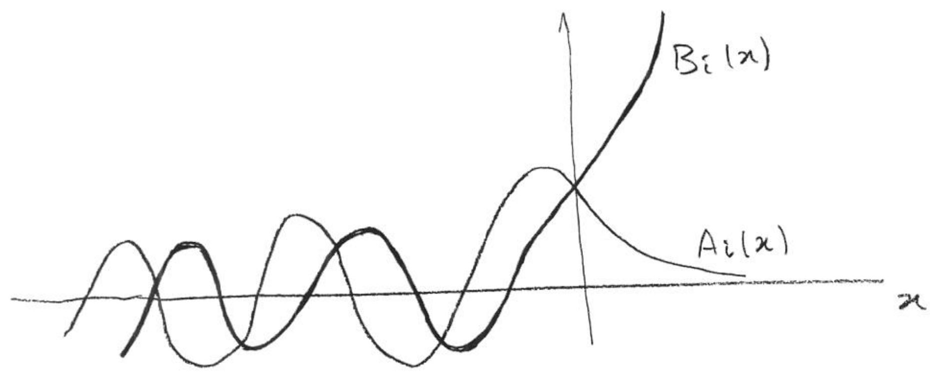
APÊNDICE-A: FUNÇÕES DE AIRY Ai e Bi

Ai e Bi são as soluções independentes da equação

$$y'' - zy = 0$$

$$y(z) = \alpha\, Ai(z) + \beta\, Bi(z)$$

O comportamento dessas funções é ilustrado abaixo:



As formas integrais são:

$$Ai(x) = \int_0^\infty \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) dt$$

$$Bi(x) = \int_0^\infty \left[e^{-\frac{t^3}{3} + xt} + \sin\left(\frac{t^3}{3} + xt\right)\right] dt$$

e

$$Ai(+x) \simeq \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\pi}\, x^{1/4}} \sin\left[\dfrac{2|x|^{3/2}}{3} + \pi/4\right] & p/ \quad x \to -\infty \\[2ex] \dfrac{1}{2\sqrt{\pi}\, x^{1/4}}\, e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}} & p/ \quad x \to \infty \end{cases}$$

NOTE QUE $\sin(u + \pi/4) = \sin(u - \pi/4 + \pi/2) = \cos(u - \pi/4)$

$$Bi(x) \simeq \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\pi}\, x^{1/4}} \cos\left[\dfrac{2|x|^{3/2}}{3} + \dfrac{\pi}{4}\right] & x \to -\infty \\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{\pi}\, x^{1/4}}\, e^{\frac{2}{3}x^{3/2}} & x \to +\infty \end{cases}$$

A equação de Schrödinger linearizada em torno do ponto de retorno P é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = \Big(E - V(P) - V'(P)(x-P)\Big)\psi = -V'(P)(x-P)\psi(x)$$

ou

$$\psi'' - \frac{2mV'(P)}{\hbar^2}(x-P)\psi = 0$$

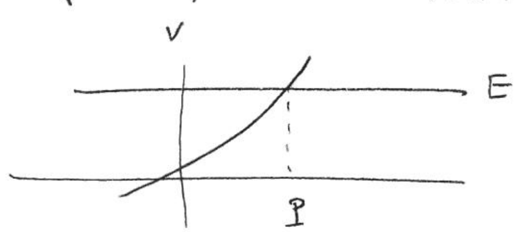
Fazendo $y \equiv a(x-P)$ obtemos

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - \frac{2mV'(P)}{a^2\hbar^2}\frac{y}{a}\psi = 0$$

Escolhendo $\dfrac{2mV'(P)}{\hbar^2} = a^3$ e supondo $V'(P) > 0$ obtemos

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y\psi = 0 \qquad y = \left(\frac{2mV'(P)}{\hbar^2}\right)^{1/3}(x-P)$$

$$\psi(x) = \alpha\, Ai(y) + \beta\, Bi(y) = \alpha\, Ai\left(\left(\frac{2mV'}{\hbar^2}\right)^{1/3}(x-P)\right) + \beta\, Bi\left(\left(\frac{2mV'}{\hbar^2}\right)^{1/3}(x-P)\right)$$



(A3)

Quando os argumentos são negativos as funções oscilam. Isso ocorre para $x < P$:

$$\psi(x) \approx \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,|y|^{1/4}} \sin\left(\frac{2|y|^{3/2}}{3} + \pi/4\right) + \frac{\beta}{\sqrt{\pi}\,|y|^{1/4}} \cos\left(\frac{2|y|^{3/2}}{3} + \pi/4\right) \quad \text{p/ } x < P \text{ ou } y < 0$$

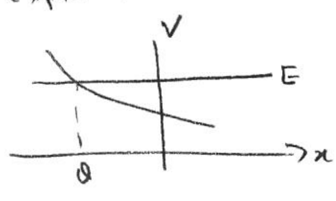
Note que $\sin(\xi + \pi/4) = \sin(\xi - \pi/4 + \pi/2) = \cos(\xi - \pi/4)$, portanto o primeiro termo t.b. pode ser escrito com $\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,x^{1/4}} \cos\left(\frac{2x^{3/2}}{3} - \pi/4\right)$ e

$$|y|^{3/2} = \frac{(2mV'(P))^{1/2}}{\hbar}(P - x)^{3/2}.$$

Para $x > P$ temos

$$\psi(x) \simeq \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}\,y^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}y^{3/2}} + \frac{\beta}{\sqrt{\pi}\,y^{1/4}} e^{\frac{2}{3}y^{3/2}} \quad ; \quad y^{3/2} = \frac{\sqrt{2mV'(P)}}{\hbar}(x - P)^{3/2}.$$

Se expandimos em torno de um ponto Q onde $V'(Q) < 0$,



a equação fica $\frac{d^2\psi}{dy^2} - y\psi = 0$ e $a^3 = \frac{-2mV'(Q)}{\hbar^2}$.

$$y = a(Q - x)$$

Nesse caso obtemos :

Se $x > Q$, $y < 0$ e

$$\psi(x) \simeq \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,|y|^{1/4}} \sin\left(\frac{2\,|y|^{3/2}}{3} + \pi/4\right) + \frac{\beta}{\sqrt{\pi}\,|y|^{1/4}} \cos\left(\frac{2\,|y|^{3/2}}{3} + \pi/4\right) \; ; \; |y|^{3/2} = \frac{\sqrt{-2mV'}}{\hbar} (x-Q)^{\frac{3}{2}}$$

Se $x < Q$, $y > 0$

$$\psi(x) \simeq \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}\,y^{1/4}} e^{-\frac{2}{3} y^{3/2}} + \frac{\beta}{\sqrt{\pi}\,y^{1/4}} e^{+\frac{2}{3} y^{3/2}} \; ; \qquad y^{3/2} = \frac{\sqrt{-2mV'(0)}}{\hbar} (Q-x)^{3/2}$$

Finalmente, vamos resolver a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -V'(x_0)\,(x-x_0)\,\psi(x) .$$

Na representação de momento $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \to p$ e $x \to i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$:

$$\frac{p^2}{2m} \psi(p) = -V'(x_0)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p} - x_0\right)\psi(p) \quad \text{ou}$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} - V'(x_0)\,x_0\right)\psi(p) = -i\hbar V'(x_0)\frac{\partial \psi}{\partial p}$$

A solução dessa equação é da forma $\psi(p) = \bar{A}\, e^{i\alpha p^3 + i\beta p}$, pois

$$\frac{\partial \psi}{\partial p} = \left(3i\alpha p^2 + i\beta\right)\psi \quad \text{e}$$

$$\frac{p^2}{2m} - V'(x_0)\,x_0 = -i\hbar V'(x_0)\left(3i\alpha p^2 + i\beta\right) \quad \text{o que leva à}$$

$$\boxed{\alpha = \frac{1}{6m\hbar V'(x_0)}} \qquad \boxed{\beta = -x_0/\hbar}$$

(A5)

Na representação de coordenadas teremos

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp = A \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha p^3 + \frac{ip}{\hbar}(x - x_0)}\, dp$$

fazendo $\quad (3\alpha)^{1/3} p = t$

$$\psi(x) = A' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{it^3/3 + \frac{it(x-x_0)}{\hbar(3\alpha)^{1/3}}}\, dt$$

chamando $\quad y = \dfrac{x - x_0}{\hbar(3\alpha)^{1/3}} = \left(\dfrac{2mV'(x_0)}{\hbar^2}\right)^{1/3}(x - x_0)$

$$\psi(x) = A' \int_{-\infty}^{+\infty} e^{it^3/3 + ity}\, dt = 2A \int_0^{\infty} \cos\left(t^3/3 + ty\right) dt$$