XI - TEORIA DE PERTURBAÇÃO IND. TEMPO

$$H = H_0 + W \quad \text{ou}$$
$$= H_0 + \lambda \hat{W} \quad ; \quad \lambda << 1$$

H_0 tem solução conhecida: $H_0 |\varphi_n^i\rangle = E_n |\varphi_n^i\rangle$

$i \rightarrow$ conta degenerescências.

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda \hat{W} \rightarrow H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$$

Se $\lambda << 1$ e assumimo $E(\lambda)$ e $|\psi(\lambda)\rangle$ contínuas em λ fazemos

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle \dots = \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle$$

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \dots = \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q$$

$$\left[H_0 + \lambda \hat{W}\right]\left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle\right] = \left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q\right]\left[\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |k\rangle\right]$$

$$\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q H_0 |q\rangle + \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^{q+1} \hat{W}|q\rangle = \sum_{q,k=0}^{\infty} \lambda^{q+k} \varepsilon_q |k\rangle$$

ORDEM 0

$$H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$$

ORDEM 1

$$H_0|1\rangle + \hat{W}|0\rangle = \varepsilon_0|1\rangle + \varepsilon_1|0\rangle$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$$

ordem 2

$$H_0|2\rangle + \hat{W}|1\rangle = \varepsilon_2|0\rangle + \varepsilon_1|1\rangle + \varepsilon_0|2\rangle$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0$$

Escolha de fases e normalização

(a) $\langle\Psi(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle = 1$

(b) $\langle 0|\Psi(\lambda)\rangle =$ real

OBS: $|\Psi'\rangle \equiv |\Psi\rangle e^{i\delta}$
$\langle 0|\Psi'\rangle = \langle 0|\Psi\rangle e^{i\delta}$
$= |\langle 0|\Psi\rangle| e^{i(\varphi+\delta)}$
$\Rightarrow$ escolhemos $\delta = -\varphi$

(a) $$\left[\langle 0| + \lambda\langle 1| + \lambda^2\langle 2| \dots\right]\left[|0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \dots\right] = 1$$

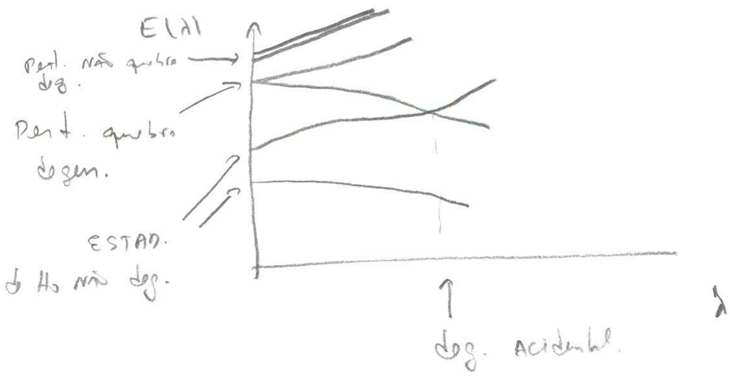
$$\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1} + \lambda\underbrace{\left[\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle\right]}_{0} + \lambda^2\underbrace{\left[\langle 2|0\rangle + \langle 0|2\rangle + \langle 1|1\rangle\right]}_{0} + \dots = 1$$

Olhando a eq. p/ ordem 0 vemos que $|0\rangle$ é auto-estado de H_0, que assumimos normalizado $\Rightarrow$ $\underline{\langle 0|0\rangle = 1}$

(b) $$\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1} + \lambda\underbrace{\langle 0|1\rangle}_{\text{real}} + \lambda^2\underbrace{\langle 0|2\rangle}_{\text{real}} \dots = \text{real} \Rightarrow \langle 0|\Psi\rangle = \text{real}$$

$$\Rightarrow \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$$
$$\langle 2|0\rangle = \langle 0|2\rangle = -\tfrac{1}{2}\langle 1|1\rangle \quad \text{etc}$$

Exemplo do que pode ocorrer



CASO NÃO-DEGENERADO

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n^0|\varphi_n\rangle$$

ordem 0 $\qquad |0\rangle = |\varphi_n\rangle \quad ; \quad \epsilon_0 = E_n^0$

ordem 1

$$\underbrace{\langle 0|H_0-\epsilon_0|1\rangle}_{0} + \langle 0|\hat{W}-\epsilon_1|0\rangle = 0$$

$$\langle 0|\hat{W}|0\rangle = \epsilon_1$$

$$\boxed{\lambda\epsilon_1 = \langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle}$$

$$\langle\varphi_p^i|H_0-\epsilon_0|1\rangle + \langle\varphi_p^i|\hat{W}|0\rangle - \underbrace{\langle\varphi_p^i|\epsilon_1|0\rangle}_{=0} = 0 \quad p\neq n$$

$$E_p^0\langle\varphi_p^i|1\rangle - \epsilon_0\langle\varphi_p^i|1\rangle + \langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\langle\varphi_p^i|1\rangle = \frac{\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle}{E_n^0-E_p^0} \quad n\neq p \quad e \quad \langle\varphi_n|1\rangle = 0$$

devido a escolha de fases.

$$|1\rangle = \sum_p\sum_i \langle\varphi_p^i|1\rangle|\varphi_p^i\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\lambda|1\rangle = \sum_{p\neq n}\sum_i \frac{\langle\varphi_p^i|W|\varphi_n\rangle}{E_n^0-E_p^0}|\varphi_p^i\rangle}$$

<u>ordem 2</u>

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 - \varepsilon_0 | 2 \rangle}_{0} + \langle \varphi_n | \hat{W} - \varepsilon_1 | 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | \hat{W} | 1 \rangle - \varepsilon_1 \underbrace{\langle \varphi_n | 1 \rangle}_{0} = \varepsilon_2$$

$$\varepsilon_2 = \langle \varphi_n | \hat{W} | 1 \rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p^i \rangle$$

$$\boxed{\lambda^2 \varepsilon_2 = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p^i \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}}$$

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_n | W | \varphi_p^i \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

Estimativa do erro na energia se paramos em 1ª ordem:

$$\lambda^2 \varepsilon_2 \leq \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{1}{\Delta E} |\langle \varphi_n | W | \varphi_p^i \rangle|^2$$

onde ΔE = espaçamento entre E_n e seu vizinho mais próximo.

$$= \sum_p \sum_i \left[\frac{1}{\Delta E} |\langle \varphi_n | W | \varphi_p^i \rangle|^2 \right] - \frac{1}{\Delta E} |\langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle|^2$$

$$= \frac{1}{\Delta E} \left[\langle \varphi_n | W^2 | \varphi_n \rangle - |\langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle|^2 \right] = \frac{1}{\Delta E} (\Delta W)^2$$

desvio quad. médio de W no estado $|\varphi_n\rangle$.

O caso degenerado

Suponha que E_n seja $g_n > 1$ degenerado $\Rightarrow H_0|\varphi_n^i\rangle = E_n|\varphi_n^i\rangle$ $i=1,\dots,g_n$.

Eq. p/ ordem zero: $H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle \Rightarrow$

$|0\rangle$ pode ser $\forall$ comb. linear dos $|\varphi_n^i\rangle$: $|0\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \upsilon_i^n |\varphi_n^i\rangle$ com $\upsilon_i^n = \langle\varphi_n^i|0\rangle$.

Eq. p/ primeira ordem:

$\rightarrow * \langle\varphi_n^i|$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$$

$$\langle\varphi_n^i|\hat{W}|0\rangle = \varepsilon_1 \langle\varphi_n^i|0\rangle$$

substituindo $|0\rangle$:

$$\sum_j \underbrace{\langle\varphi_n^i|\hat{W}|\varphi_n^j\rangle}_{(\hat{W}_n)_{ij} \,=\, \text{matriz } g_n \times g_n} \upsilon_j^n = \varepsilon_1 \upsilon_i^n$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\hat{W}_n \upsilon^n = \varepsilon_1 \upsilon^n}$$ $\rightarrow$ equação de auto-valores

$\Rightarrow$ ε_1 são os auto-valores de $\hat{W}_n$ $\rightarrow$ g_n soluções

υ^n são os auto-vetores, i.e., a combinação linear apropriada dos $|\varphi_n^i\rangle$ $\rightarrow$ aproximação ainda em ordem 0.

Aplicações da Teoria de Perturbação p/ o Caso Degenerado

(1) Efeito Zeeman no Átomo de Hidrogênio

- campo magnético uniforme na direção $\hat z$, $\vec B = B_0 \hat z$

$$\vec A = \frac{B_0}{2}(-y, x, 0) \quad ; \quad \nabla\times A = \frac{B_0}{2}\begin{vmatrix}\hat x & \hat y & \hat z\\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -y & x & 0\end{vmatrix} = B_0 \hat z$$

$$H = \frac{1}{2m}(\vec p - e\vec A)^2 - \frac{e^2}{r} = H_0 - \frac{e}{2m}(\vec p\cdot\vec A + \vec A\cdot\vec p) + \frac{e^2}{2m}A^2$$

como $\nabla\cdot\vec A = 0$ $\quad (\vec p\cdot\vec A)\psi = -i\hbar\nabla\cdot(\vec A\psi) = -i\hbar\vec A\cdot\nabla\psi = \vec A\cdot\vec p\,\psi$

$$A^2 = \frac{B_0^2}{4}(x^2+y^2) \qquad \boxed{e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}}$$

Se B_0 é pequeno, desprezamos o termo em B_0^2 e

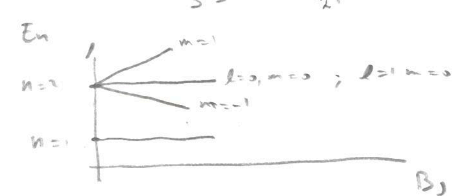
$$W = -\frac{e}{m}\vec A\cdot\vec p = -\frac{eB_0}{2m}(-p_x y + x p_y) = -L_z\frac{eB_0}{2\mu} = -\frac{B_0\mu_B}{\hbar}L_z \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu}$$

$\Rightarrow$ A matriz do sub-espaço $\mathcal{E}(n)$ é

$$\langle n l' m'|W|n l m\rangle = \frac{\hbar m e B_0}{2\mu}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \Rightarrow \text{diagonal.}$$
$$= -B_0\mu_B m\,\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

Exemplo $\quad n=2 \quad l=0,\ m=0 \quad l=1\ m=1, 0, -1 \qquad \xi = \hbar e B_0/2\mu$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix}$$



(2) Efeito Stark (campo elétrico constante na direção z)

$$\vec{E} = -\nabla\phi = E_0\hat{z} \quad \rightarrow \quad \phi = -E_0 z$$

$$W = (-e)(-E_0 z) = eE_0 z = eE_0 r\cos\theta \qquad (e>0)$$

(a) $[W, L_z] = [z, xp_y - yp_x] = 0$

$$\langle n\ell'm'|[W,L_z]|n\ell m\rangle = \hbar(m-m')\langle n\ell'm'|W|n\ell m\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \text{ se } m \neq m' \qquad \langle n\ell'm'|W|n\ell m\rangle = 0$$

(b) $$\langle n\ell m|W|n\ell m\rangle = eE_0\int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^3 dr \int |Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2 \cos\theta \sin\theta\, d\theta$$

$Y_{\ell m}$ é sempre par ou ímpar $\Rightarrow$ $|Y_{\ell m}|^2$ = par (troca $\theta \to \pi-\theta$)

e $\cos\theta\sin\theta$ = ímpar $\Rightarrow$ integral dá zero.

<u>n=1</u> $\langle 100|W|100\rangle = 0$

<u>n=2</u>

	$\|00\rangle$	$\|10\rangle$	$\|11\rangle$	$\|1-1\rangle$
$\langle 00\|$	0	$\langle 00\|W\|10\rangle$	0	0
$\langle 10\|$	$\langle 10\|W\|00\rangle$	0	0	0
$\langle 11\|$	0	0	0	0
$\langle 1-1\|$	0	0	0	0

$$\psi_{200}(r\theta\varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0} \quad ; \quad \psi_{210} = \frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}\cos\theta\, e^{-r/2a_0}$$

$$\langle 00|W|10\rangle = 2\pi e E_0 \int \frac{\cos^2\theta}{16(2\pi a_0^3)}\frac{r}{a_0}\left(2-\frac{r}{a_0}\right) r r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, e^{-r/a_0}$$

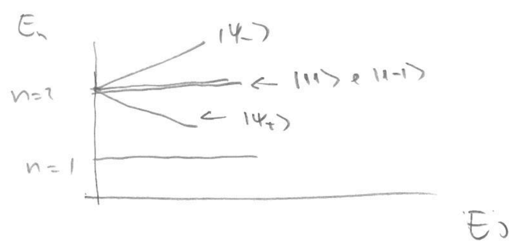
$$= \frac{e E_0}{16 a_0^4} \underbrace{\int_0^\infty r^4 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/a_0} \, dr}_{\frac{r}{a_0} = x} \underbrace{\int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta \, d\theta}_{\cos\theta = w}$$

$$= \frac{a_0 e E_0}{16} \underbrace{\int_0^\infty x^4 (2-x) e^{-x} \, dx}_{\underbrace{2 \cdot (24) - 5 \cdot 24}_{-3 \cdot 24 = -72}} \underbrace{\int_{-1}^{1} w^2 dw}_{2/3} \quad ; \quad \int_0^\infty x^n e^{-x} = n!$$

$$= -\frac{a_0 e E_0}{\cancel{16}} \cdot \frac{2}{3} \cdot (\cancel{8} \cdot 9) = -3 a_0 e E_0$$

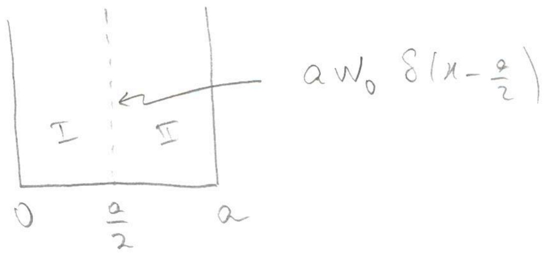
$$\Rightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & -3a_0 e E_0 \\ -3a_0 e E_0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \qquad \lambda^2 - (3 a_0 e E_0)^2 = 0 \qquad \boxed{\lambda = \pm 3 a_0 e E_0}$$

$\Rightarrow$ níveis novos são $\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|100\rangle \pm |110\rangle \right] = |\psi_\pm\rangle$



$$\begin{pmatrix} 0 & -\alpha \\ -\alpha & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha \\ -\alpha \end{pmatrix} = -\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Problem 11.1



Solução exata $\quad \psi_I = A \sin Kx \quad ; \quad \psi_{II} = B \sin K(a-x)$

1) $\psi_I(a/2) = \psi_{II}(a/2) \qquad A \sin\frac{Ka}{2} = B \sin\frac{Ka}{2}$

- $A = B$ ou
- $\sin\frac{Ka}{2} = 0 \longrightarrow \frac{Ka}{2} = n\pi \qquad K_n = \frac{2n\pi}{a}$

soluções ímpares que zeram em $\frac{a}{2}$ e não sentem a perturbação.

2) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{\frac{a}{2}-\varepsilon}^{\frac{a}{2}+\varepsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} + a W_0 \underbrace{\int_{\frac{a}{2}-\varepsilon}^{\frac{a}{2}+\varepsilon} \delta(x - a/2)\psi(x)\,dx}_{1} = E \underbrace{\int_{\frac{a}{2}-\varepsilon}^{\frac{a}{2}+\varepsilon} \psi\, dx}_{0}$$

$$\Rightarrow \psi'_{II}(\tfrac{a}{2}) - \psi'_I(a/2) = \frac{2mW_0 a}{\hbar^2}\psi(a/2)$$

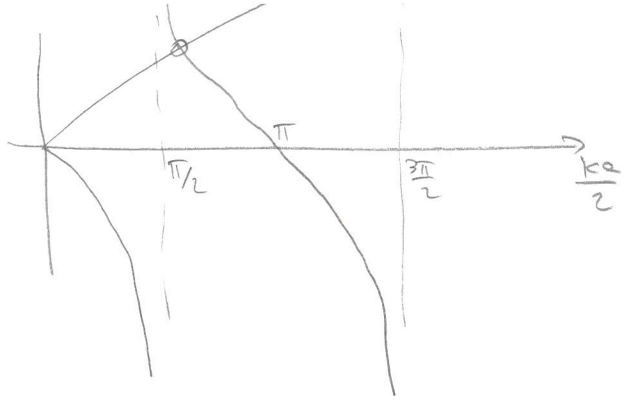
$$-BK\cos K(a - \tfrac{a}{2}) - AK\cos K(a/2) = \frac{2mW_0a}{\hbar^2} A \sin\frac{Ka}{2}$$

$$-2K\cos Ka/2 = \frac{2mW_0a}{\hbar^2}\sin Ka/2 \quad \text{ou} \quad \boxed{\frac{K\hbar^2}{maW_0} = -\operatorname{tg}\frac{Ka}{2}}$$

OBS se $\sin\frac{Ka}{2} = 0$ essa equação implica que $B = -A$ o que resulta em $\psi_{II} = -A\sin(Ka - x) = -A\sin Ka\cos x + A\sin x\cos Ka$

como $\sin Ka = 2\sin\frac{Ka}{2}\cos\frac{Ka}{2} = 0 \qquad \psi_{II} = A\sin Kx$ com $K = \frac{2n\pi}{a}$

$\cos Ka = \cos^2 Ka/2 - \sin^2 Ka/2 = 1 \qquad \Rightarrow$ solução ímpar como se $W = 0$.



Se w_0 é pequeno a solução é $\frac{ka}{2} \approx (2m-1)\frac{\pi}{2} + \Delta \cdot w_0$

Para $m=1$: $\quad \operatorname{tg} \frac{ka}{2} = \frac{\operatorname{tg}\pi/2 + \operatorname{tg}\Delta w_0}{1 - \operatorname{tg}\pi/2 \operatorname{tg}\Delta w_0} = -\frac{1}{\operatorname{tg}(\Delta w_0)} \approx -\frac{1}{\Delta w_0}$

vale p/ todo m

$$\frac{ka}{2}\left(\frac{2\hbar^2}{ma^2 w_0}\right) = -\operatorname{tg}\frac{ka}{2}$$

$$\left[(2m-1)\frac{\pi}{2} + \Delta w_0\right]\frac{2\hbar^2}{ma^2 w_0} = \frac{1}{\Delta w_0}$$

$$(2m-1)\frac{\pi}{\cancel{2}} \cdot \frac{\cancel{2}\hbar^2}{ma^2 \cancel{w_0}} \approx \frac{1}{\Delta \cancel{w_0}} \qquad \Delta = \frac{ma^2}{\pi\hbar^2}\frac{1}{(2m-1)}$$

As energias dos estados pares ficam

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{(2m-1)\pi}{a} + \frac{2ma}{\pi\hbar^2}\frac{w_0}{(2m-1)}\right]^2$$

$$\approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2m-1)^2 + \frac{\cancel{\hbar^2}}{\cancel{2m}}\frac{2\cancel{\pi}}{\cancel{a}} \cdot \frac{\cancel{2ma}}{\cancel{\pi\hbar^2}} w_0 + O(w_0^2)$$

$$E_m = E_m^0 + 2w_0 \qquad \text{p/ } m \text{ ímpar}$$

$$E_m = E_m^0 \qquad \text{p/ } m \text{ par}$$

Teoria de Perturbação 1ª ordem

estados $\begin{cases} \text{pares} \\ \text{impares} \end{cases}$ $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ $\begin{cases} n = 1, 3, 5 \ldots \\ n = 2, 4, 6 \ldots \end{cases}$

$$\mathcal{E}_1 = \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} \, \delta(x - \tfrac{a}{2}) \, W_0 a \, dx$$

$$= 2W_0 \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) = \begin{cases} 2W_0 & n \text{ impar} \\ 0 & n \text{ par} \end{cases}$$

MÉTODO VARIACIONAL

Seja $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$. Se a diagonalização de H é muito complicada, podemos tentar calcular pelo menos a energia do estado fundamental.

Se $|\Psi\rangle$ um ket qualquer. Então

$$\langle H\rangle = \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_0$$

Prova

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n|\varphi_n\rangle$$

$$\langle H\rangle = \frac{\sum_n |C_n|^2 E_n}{\sum |C_n|^2} \geq \frac{E_0 \sum_n |C_n|^2}{\sum_n |C_n|^2} = E_0$$

Isso pode ser usado para estimar E_0. Se temos algum tipo de "feeling" sobre o estado fundamental podemos tentar

$$|\Psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots \alpha_n)\rangle$$

onde α_n são parâmetros. Calculamos

$$\langle H\rangle(\underset{\sim}{\alpha})$$

e minimizamos esse valor em relação aos parâmetros.

Exemplo 1

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$\psi_\alpha(x) = e^{-\alpha x^2} \qquad \alpha > 0$$

$$\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}\frac{d^2}{dx^2}e^{-\alpha x^2}\,dx + \frac{m\omega^2}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2}\,dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int e^{-\alpha x^2}\frac{d}{dx}\left[-2\alpha x\, e^{-\alpha x^2}\right] + \frac{m\omega^2}{2}\cdot -\frac{1}{2}\frac{d}{d\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}\,dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int e^{-2\alpha x^2}\left(-2\alpha + 4\alpha^2 x^2\right)dx - \frac{m\omega^2}{4}\frac{d}{d\alpha}\left(\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\right)$$

$$= \frac{\hbar^2\alpha}{m}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} - \frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}\cdot -\frac{1}{2}\frac{d}{d\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} + \frac{m\omega^2}{8\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}$$

$$= \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\left[\frac{\hbar^2\alpha}{m} - \frac{\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\alpha}\right] = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\left[\frac{\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\alpha}\right]$$

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}$$

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{m\omega^2}{8\alpha}$$

$$\frac{d}{d\alpha}\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{8\alpha_0^2} \equiv 0 \qquad \alpha_0^2 = \frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2} \qquad \alpha_0 = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

$$\psi_{\alpha_0}(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega\sqrt{\pi}}}\; e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\langle H \rangle_{\alpha_0} = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{m\omega}{2\hbar} + \frac{m\omega^2}{8}\cdot\frac{2\hbar}{m\omega} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

O MÉTODO SEMICLÁSSICO WKB

Queremos resolver a equação

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

em condições próximas da validade da mecânica clássica, que é geralmente ALTAS energias.

Suponha que uma partícula de massa m e momento p se move em uma região de tamanho L. A condição semiclássica pode ser vista como

$$\lambda = \frac{h}{p} << L$$

ou

$$Lp >> h$$

que pode ser formalmente tomada como o limite $\hbar \to 0$.

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

p/ E fixo $\quad \underbrace{p \simeq \sqrt{2mE}}_{p_{max}}$, $\quad \underbrace{L \simeq \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}}_{x_{max}}$

$$Lp = \frac{2mE}{\omega} \gg \hbar \quad \Rightarrow \quad E \text{ grande ou } m \text{ grande ou } \omega \text{ pequeno}$$

O primeiro passo no desenvolvimento dessa aproximação é escrever

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

Para uma partícula livre $\psi(x) = e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ é solução exata. Se $V(x)$ varia pouco ao longo de $\lambda = h/p$, a partícula "enxerga" um potencial quase constante e esperamos algo similar. A condição p/ isso é

$$\left| V(x+\lambda) - V(x) \right| << \frac{p^2}{2m}$$

$$\left| \lambda V'(x) \right| << p^2/2m \quad \text{ou}$$

$$\frac{2m \hbar |F(x)|}{p^3} << 1 \quad \text{com} \quad F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} = \text{força.}$$

Veja que a condição não é satisfeita p/ $p=0$, próximo dos pontos de retorno.

Derivando $\psi(x)$ obtemos

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{i}{\hbar} \frac{dS}{dx} e^{iS/\hbar}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left[-\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \frac{d^2 S}{dx^2} \right] e^{iS/\hbar}$$

e a equação de Schrödinger fica

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S}{dx^2} = E - V$$

Se $V=0$ sabemos que $\Psi = e^{\frac{ipx}{\hbar}}$. Para um $V=V(x)$

'azemos

$$S = S_0(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right) S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(x) \ldots$$

is em cada região a partícula vê um potencial constante se λ é pequeno.

ssim obtemos:

$$\frac{1}{2m}\left[\frac{dS_0}{dx} + \left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{dS_1}{dx} + \ldots\right]^2 - \frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{d^2S_0}{dx^2} + \left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{d^2S_1}{dx^2} \ldots\right] = E - V$$

ORDEM 0

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 + V(x) = E \rightarrow \text{Eq. Hamil-Jacobi}$$

ORDEM 1

$$-\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{dS_0}{dx}\right)\left(\frac{dS_1}{dx}\right) - \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2S_0}{dx^2} = 0 \quad \text{etc}$$

$$\Rightarrow \quad S_0(x) = \pm\int^x \sqrt{2m(E-V(x'))}\,dx' \equiv \pm\int^x p(x')\,dx'$$

e

$$\left(\frac{dS_0}{dx}\right)\left(\frac{dS_1}{dx}\right) = -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2S_0}{dx^2}\right)$$

$$p(x)\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2}\frac{dp}{dx} \quad \text{ou} \quad \frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2}\frac{p'}{p} = \frac{d}{dx}\log p^{-1/2}$$

$$S_1(x) = \log p^{-1/2} \quad \text{ou} \quad e^{S_1(x)} = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}$$

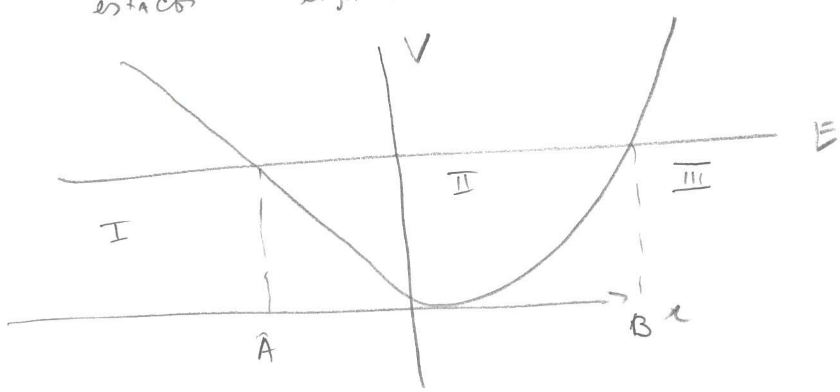
Portanto obtemos

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

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

onde $\quad |p(x)| = \sqrt{2m(V(x)-E)}$

Para estados ligados temos



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

Como obter D_1, D_2, C e φ ?

1) Aproximação não vale para x próximo de A ou B

2) Para $x \approx B$ $\quad V(x) \approx V(B) + \frac{\partial V}{\partial x}(B)\,(x-B) = E - F_B\,(x-B)$

e $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E-V)\psi \approx F_B\,(x-B)\,\psi \quad ; \quad F_B < 0$

Nesse caso a solução é conhecida exatamente:

$$\psi(x) = \frac{\psi_0}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\cos\left(\frac{u^3}{3} - \frac{u y}{\hbar^{2/3}}\right)du = \psi_0\, Ai\,(y)$$

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

$$\approx \psi_0 \begin{cases} \frac{1}{y^{1/4}}\cos\left(\frac{2y^{3/2}}{3\hbar} - \pi/4\right) & y>0 \quad (x<B\,,\ \mathrm{II}) \\ \frac{1}{2}\frac{1}{|y|^{1/4}}\, e^{-\frac{2|y|^{3/2}}{3\hbar}} & y<0 \quad (x>B\,,\ \mathrm{III}) \end{cases}$$

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

$\Rightarrow \quad \varphi = +\pi/4 \quad$ e $\quad D_2 = C$

$F_B < 0$

$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \approx \frac{p^2}{2m} + \left[E - F_B(x-B)\right]$

$\frac{p^2}{2m} = F_B\,(x-B)$

$p = \sqrt{-2mF_B(B-x)}$

3) Para $x \approx A$ $\quad V(x) = V(A) + \frac{\partial V}{\partial x}(A)(x-A) = E - F_A (x-A)$

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

idem e

$$\psi(x) \approx \psi_0 \begin{cases} \frac{1}{2}\frac{1}{|y|^{1/4}} e^{\frac{2|y|^{3/2}}{3\hbar}} & \text{si } y' < 0 \quad (x < A \Rightarrow \text{I}) \\ \frac{1}{y'^{1/4}} \cos\left(\frac{2y'^{3/2}}{3\hbar} - \pi/4\right) & \text{si } y' > 0 \quad (x > A \Rightarrow \text{II}) \end{cases}$$

$$y' \equiv (2mF_A)^{1/3}(x-A) \qquad (y' > 0 \Rightarrow x > A \Rightarrow \text{II})$$

novamente $\quad \frac{2y'^{3/2}}{3} = \frac{2}{3}(2mF_A)^{\frac{1}{2}}(x-A)^{3/2} = \int_A^x \underbrace{\sqrt{2mF_A(x-A)}}_{F_A>0}\, dx' = \int_A^x p(x')\,dx'$

$$\Rightarrow \quad D_1 = C \quad e \quad \varphi = -\pi/4$$

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

$$\int_A^x p(x')\,dx' - \frac{\pi}{4} = \int_A^B p(x')\,dx' + \int_B^x p(x')\,dx' - \frac{2\pi}{4} + \frac{\pi}{4} = \int_A^B p(x)\,dx - \frac{\pi}{2} + \left(\int_B^x p(x')\,dx' + \frac{\pi}{4}\right)$$

Para que a igualdade em II seja satisfeita impomos:

$$\alpha \equiv \frac{1}{\hbar}\int_B^x p(x')\,dx' + \pi/4$$

$$\beta \equiv \frac{1}{\hbar}\int_A^B p(x')\,dx' - \pi/2$$

$$c'\cos(\alpha) = c\cos(\alpha+\beta)$$

$$= c\cos\alpha\cos\beta - c\sin\alpha\sin\beta$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta = n\pi} \quad ; \quad \sin\beta = 0 \quad \cos\beta = (-1)^n$$

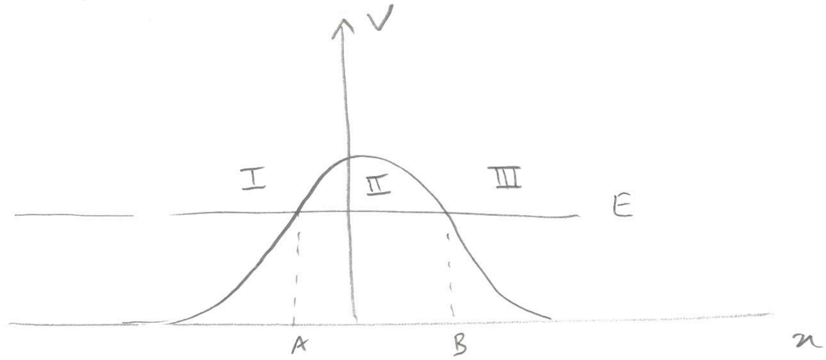
$$\boxed{c' = c\,(-1)^n}$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_A^B p(x)\,dx - \frac{\pi}{2} = n\pi \longrightarrow \boxed{\int_A^B p(x)\,dx = \pi\hbar\,(n+1/2)}$$

$$\psi(x) = \psi_0 \begin{cases} \dfrac{1}{2|p|^{1/2}}\, e^{\frac{1}{\hbar}\int_A^x |p(x')|\,dx'} & \text{em I} \\[2ex] \dfrac{(-1)^n}{\sqrt{p}}\cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\int_B^x p(x')\,dx' + \pi/4\right) = \dfrac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\int_A^x p(x')\,dx' - \pi/4\right) & \text{em II} \\[2ex] \dfrac{(-1)^n}{2|p|^{1/2}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_B^x |p(x')|\,dx'} & \text{em III} \end{cases}$$

TUNELAMENTO

Vamos agora considerar um potencial do tipo barreira



A solução semiclássica geral é

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{A}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx} + \dfrac{R}{\sqrt{p}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx} & \text{em I} \\[2ex] \dfrac{C}{\sqrt{|p|}}\, e^{\frac{1}{\hbar}\int |p|\,dx} + \dfrac{D}{\sqrt{|p|}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int |p|\,dx} & \text{em II} \\[2ex] \dfrac{T}{\sqrt{p}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,dx} \end{cases}$$

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

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

Na região III fazemos

$$\psi_{\mathrm{III}} = F\, A_i(y) + G\, B_i(y) \approx$$

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

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

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

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

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

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

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = G\left(i\, A_i(y) + B_i(y)\right)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Assim, em I teremos

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

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

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

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

$\Rightarrow$ o coeficiente de transmissão fica

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

e o de reflexão,

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

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

Veja que $t + r = 1$.

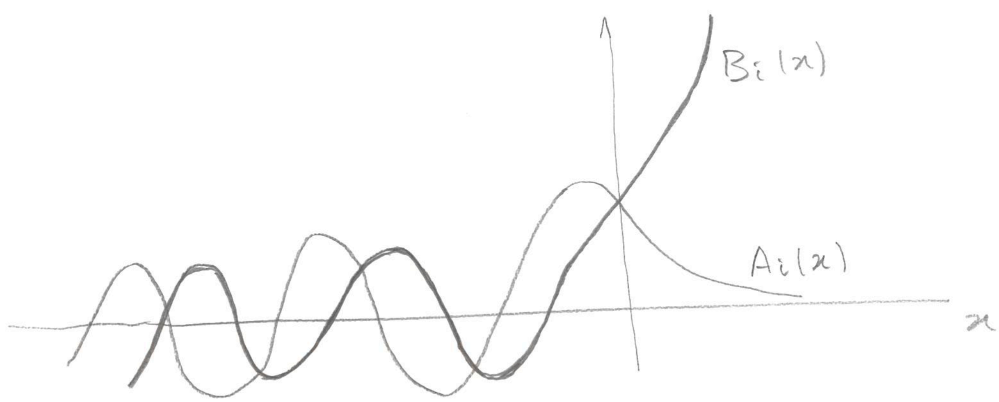
APÊNDICE: FUNÇÕES DE AIRY Ai e Bi

Ai e Bi são as soluções independentes da equação

$$y'' - z y = 0$$

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

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

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

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

A equação de Schrödinger linearizada em torno do ponto 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

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

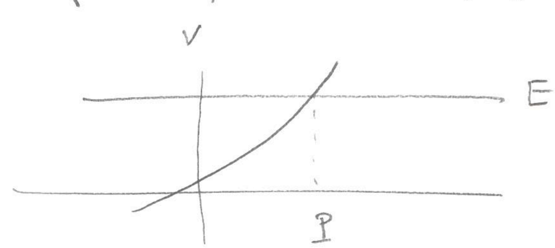
Fazendo $y \equiv a(x-P)$ obtemos

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

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

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y\psi = 0$$

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



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

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

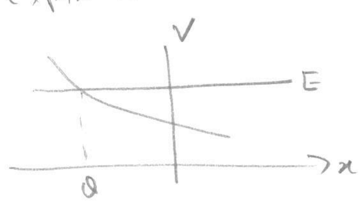
Note que $\sin(\xi + \pi/4) = \sin(\xi - \pi/4 + \pi/2) = \cos(\xi - \pi/4)$, portanto primeiro termo t.b. pode ser escrito com $\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,x^{1/4}} \cos\left(\frac{2x^{3/2}}{3} - \pi/4\right)$ e

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

Para $x > P$ temos

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

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 :

(A4)

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

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

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

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

APÊNDICE — Solução da Equação $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = F_B\,(x-B)\psi$; $F_B<0$

Seja $H = \frac{P^2}{2m} + \alpha X$. Na representação de momentos temos

$$\langle p|H|\psi\rangle = E\langle p|\psi\rangle$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + i\hbar\alpha\frac{\partial}{\partial p}\right)\psi(p) = E\,\psi(p)$$

e

$$\langle x|H|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$$

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

A solução que queremos tem $E = -F_B B$ e $\alpha = -F_B > 0$.

A solução p/ $\psi(p)$ pode ser escrita na forma

$$\psi(p) = A\,e^{i[Cp + Dp^3]}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial p} = \left[iC + 3iDp^2\right]\psi$$ e obtemos

$$\frac{p^2}{2m} + i\hbar\alpha\left[iC + 3iDp^2\right] = E \rightarrow \begin{matrix} E = -\hbar\alpha C & C = -\frac{E}{\hbar\alpha} \\ \frac{1}{2m} = 3\hbar\alpha D & D = \frac{1}{6m\alpha\hbar}\end{matrix}$$

Assim,

$$\psi(p) = A\,e^{\frac{i}{\hbar\alpha}\left(p^3/6m - Ep\right)}$$ e

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|p\rangle\,dp\,\langle p|\psi\rangle = A\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar} + \frac{i}{\hbar\alpha}\left(p^3/6m - Ep\right)}\,dp$$

$$= A\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^3}{6m\alpha} - \left(\frac{E-x}{\alpha}\right)p\right]}\,dp = A\int_{-\infty}^{\infty}\cos\left[\frac{p^3}{6m\hbar\alpha} - \left(\frac{E}{\alpha\hbar} - \frac{x}{\hbar}\right)p\right]dp$$

onde usamos $e^{if(p)} = \cos f(p) + i\sin f(p)$ e que $f(p)$ é uma função impar de p. A integral acima é ainda $2\times\int_0^\infty$.

Fazendo agora $u = \frac{p}{(2m\hbar\alpha)^{1/3}}$ e usando $E = -F_B B$, $\alpha = -F_B > 0$

$$\frac{p^3}{6m\hbar\alpha} - \frac{p}{\hbar}\left(\frac{E}{\alpha} - x\right) = \frac{u^3}{3} - \frac{(2m\hbar\alpha)^{1/3}}{\hbar} u \left(B - x\right)$$

$$= \frac{u^3}{3} - \frac{(-2mF_B)^{1/3}}{\hbar^{2/3}}(B-x)\, u \qquad \text{e}$$

$$\psi(x) = A' \int_0^\infty \cos\left[u^3/3 - u\,y/\hbar^{2/3}\right] du \qquad \text{com} \qquad y = (-2mF_B)^{1/3}(B-x)$$

Do lado esquerdo, próximo de $x = A$ a equação é $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = F_A(x-A)$; $F_A > 0$

e $E = -AF_A$; $\alpha = -F_A < 0$. O argumento do cosseno fica

$$\frac{p^3}{6m\hbar\alpha} - \frac{p}{\hbar}\left(\frac{E}{\alpha} - x\right) = -\frac{p^3}{(6m\hbar F_A)} + \frac{p}{\hbar}\left(x - A\right) = -\left[\frac{p^3}{(6m\hbar F_A)} - \frac{p}{\hbar}(x-A)\right]$$

Como o cosseno é par o sinal não importa. Fazendo $u = \frac{p}{(2m\hbar F_A)^{1/3}}$ $\quad y' = (2mF_A)^{1/3}(x-A)$

$$\psi(x) = A' \int_0^\infty \cos\left[u^3/3 - u\,y'/\hbar^{2/3}\right] du$$