A EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER

O estado de partículas deve ser descrito por ondas que dependem da posição e do tempo, $\Psi(x,t)$. Precisamos entender como associar ondas à cada estado da partícula e como prever o estado futuro a partir do estado inicial. Precisamos de uma equação que envolva $\Psi(x,t)$ e as forças que atuam na partícula.

Vamos mostrar que a EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER (ES) é uma equação plausível para essa descrição. Queremos satisfazer as seguintes condições:

- relações de De Broglie $\lambda = h/p$; $\nu = E/h$. Em termos de $k = 2\pi/\lambda$ e $\omega = 2\pi\nu$ essas relações ficam $k = p/\hbar$; $E = \hbar\omega$
- consistência com $E = p^2/2m + V(x)$
- equação deve ser linear em Ψ, pois precisamos superpor ondas para descrever interferência. Se Ψ_1 e Ψ_2 são soluções, $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ também deve ser solução.
- para $V(x) = V_0 = \text{const}$, partícula livre, as soluções devem ter a forma $\Psi(x,t) = \sin(2\pi x/\lambda - 2\pi\nu t) = \sin(kx - \omega t)$

Toda nossa argumentação será baseada na partícula livre. Nesse caso

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0 \quad \text{ou}$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

Usando uma função do tipo $A_0 \sin(kx - wt)$ vemos que

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -w A_0 \cos(kx - wt) .$$

A derivada segunda $\partial^2/\partial x^2$ produz um termo proporcional à energia cinética e $\partial/\partial t$ produz um termo proporcional à energia total.

Propomos então uma equação da forma

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \beta \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Vemos imediatamente que fazendo $V = V_0$ e $\Psi = A_0 \sin(kx - wt)$ não conseguiremos satisfazer essa equação. Tomamos então uma solução mais geral para a partícula livre:

$$\Psi(x,t) = A_0 \left[\sin(kx - wt) + \gamma \cos(kx - wt) \right]$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -w A_0 \left[\cos(kx - wt) - \gamma \sin(kx - wt) \right]$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 A_0 \left[\sin(kx - wt) + \gamma \cos(kx - wt) \right]$$

e

$$-\alpha k^2 \left[\sin(kx - wt) + \gamma \cos(kx - wt) \right] + V_0 \left[\sin(kx - wt) + \gamma \cos(kx - wt) \right] = -\beta w \left[\cos(kx - wt) - \gamma \sin(kx - wt) \right]$$

Igualando os coeficientes dos senos e cossenos chegamos em

$$-\alpha k^2 + V_0 = \beta w \gamma \longrightarrow -\alpha \gamma k^2 + \gamma V_0 = \beta w \gamma^2$$

$$-\alpha k^2 \gamma + V_0 \gamma = -\beta w$$

Então $-\beta\omega = \beta\omega\gamma^2$, $\gamma^2 = -1$ e $\gamma = \pm i$. Escolhemos

$$\boxed{\gamma = -i}$$

Assim $-\alpha k^2 + V_0 = -i\omega\beta$.

Comparando com $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0 = \hbar\omega$ fixamos

$$\boxed{\alpha = -\frac{\hbar^2}{2m}} \quad e \quad \boxed{\beta = i\hbar}$$

A equação fica

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\,\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}} \equiv \text{Eq. Schrödinger}$$

e a solução da partícula livre fica

$$\Psi(x,t) = -i A_0\left[\cos(kx-\omega t) + i\sin(kx-\omega t)\right] = B e^{i(kx-\omega t)}$$

Exercício. Mostrar que $\Psi(x,t) = A\, e^{-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar}x^2 - \frac{i}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}\,t}$

satisfaz a E.S. para $V(x) = \frac{kx^2}{2}$.

Interpretação de Born da Função de Onda

- $\Psi(x,t)$ é geralmente complexa, portanto NÃO mensurável
- $\Psi(x,t)$ descreve completamente o ESTADO da partícula
- $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)$ = densidade de probabilidade de se encontrar a partícula no ponto x no instante t.

$$\text{Densidade de Probabilidade} = \frac{\text{Probabilidade}}{\text{comprimento}}$$

$P(x,t)\,dx$ = prob. de se encontrar a partícula entre x e $x+dx$.

Exercício Encontrar a constante A do problema anterior de forma que $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)\,dx = 1$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = |A|^2 \int e^{-\frac{\sqrt{km}}{\hbar}x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\sqrt{km}}} \equiv 1$$

$$|A| = \left[\frac{\sqrt{km}}{\pi\hbar}\right]^{1/4} \quad \text{(podemos escolher } A \text{ real)}$$

Exercício Encontre a probabilidade clássica de se achar a partícula do oscilador harmônico no ponto $\underline{x}$ no instante $\underline{t}$.

A probabilidade clássica de se observar a partícula entre x e $x+dx$ é proporcional ao tempo que a partícula passa nesse intervalo:

$$P_c(x,t)\,dx = B\,dt = \frac{B\,dx}{v}$$

Como $E = \frac{mv^2}{2} + \frac{kx^2}{2}$, $\quad v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)}$ e

$$P_c(x,t) = \begin{cases} \dfrac{B}{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)}} & \text{se } -\sqrt{\frac{2E}{k}} < x < \sqrt{\frac{2E}{k}} \\ 0 & \text{se } |x| > \sqrt{\frac{2E}{k}} \end{cases}$$

Encontramos B normalizando a probabilidade clássica:

$$1 = \int_{-\sqrt{\frac{2E}{k}}}^{+\sqrt{\frac{2E}{k}}} \frac{B\,dx}{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)}} = 2B\int_0^{\pi/2} \frac{\sqrt{\frac{2E}{k}}\cos\theta\,d\theta}{\sqrt{\frac{2E}{m}}\cos\theta} = 2B\sqrt{\frac{m}{k}}\,\frac{\pi}{2} = \pi B\sqrt{\frac{m}{k}} = 1$$

(fizemos $x = \sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\theta$) e $\quad \boxed{B = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\omega}{\pi}}$

OBS: $B = 2/\tau$, já que $\int_0^{\tau/2} \frac{dt}{\tau/2} = 1$

Comparando os resultados clássico e quântico temos:

Valores Esperados ou Valores Médios

Uma partícula descrita por $\Psi(x,t)$ tem densidade de probabilidade dada por $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$. Em geral NÃO sabemos a posição exata da partícula, temos apenas a probabilidade de ela estar em determinado lugar.

O valor médio de x no instante t é dado por

$$\overline{x} = \int x \, P(x,t) \, dx = \int \Psi^*(x,t) \, x \, \Psi(x,t) \, dx$$

O valor médio de x^2 é

$$\overline{x^2} = \int x^2 \, P(x,t) \, dx = \int \Psi^*(x,t) \, x^2 \, \Psi(x,t) \, dx$$

O desvio quadrático médio do valor de x é definido como

$$\Delta x \equiv \sqrt{\overline{x^2} - \overline{x}^2}$$

2 significa que a partícula pode ser encontrada com grandes chances no intervalo entre $\overline{x} - \Delta x$ e $\overline{x} + \Delta x$.

O valor médio de uma função qualquer $f(x,t)$ é

$$\overline{f} = \int \Psi^*(x,t) \, f(x,t) \, \Psi(x,t) \, dx$$

O cálculo do valor médio do momento é mais complicado. Fazer algo como $\int \Psi^*(x,t)\, p\, \Psi(x,t)\, dx$ não faz sentido, pois $|\Psi(x,t)|^2$ é a probabilidade da partícula estar em x e não de ela ter um momento p.

A dica vem novamente da partícula livre, onde $\Psi(x,t) = B e^{i(kx-wt)}$. Vemos que $\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik\Psi$ e, portanto, $-i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \hbar k \Psi = p\Psi$

O momento p é então substituído pelo <u>OPERADOR</u> $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

$$p \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$p^2 \longrightarrow \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

e

$$\overline{p} = \int \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) dx$$

$$\overline{p^2} = \int \Psi^*(x,t)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) dx$$

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \overline{p}^2}$$

Da mesma forma vemos que $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iw\Psi$ e $i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hbar w \Psi = E\Psi$, de forma que

$$\overline{E} = \int \Psi^* i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}\, dx = \int \Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) dx + \int \Psi^* V(x,t)\,\Psi\, dx$$

e

$$E \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Substituindo os operadores p e E na relação de energia

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

obtemos

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

que é a eq. de Schrödinger. No <u>APÊNDICE</u> tem uma discussão diferente de porque podemos atribuir o operador $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ ao momento.

<u>Exemplo</u> Calcule Δx e Δp para o estado do oscilador harmônico do exercício anterior.

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} - \frac{i\omega t}{2}\right\} \qquad \text{com} \qquad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

O cálculo de $\overline{x}$ e $\overline{p}$ envolve a integral $\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2\alpha} dx = 0$, que resulta em $\overline{x} = \overline{p} = 0$.

$$\overline{x^2} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx \qquad \text{e} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

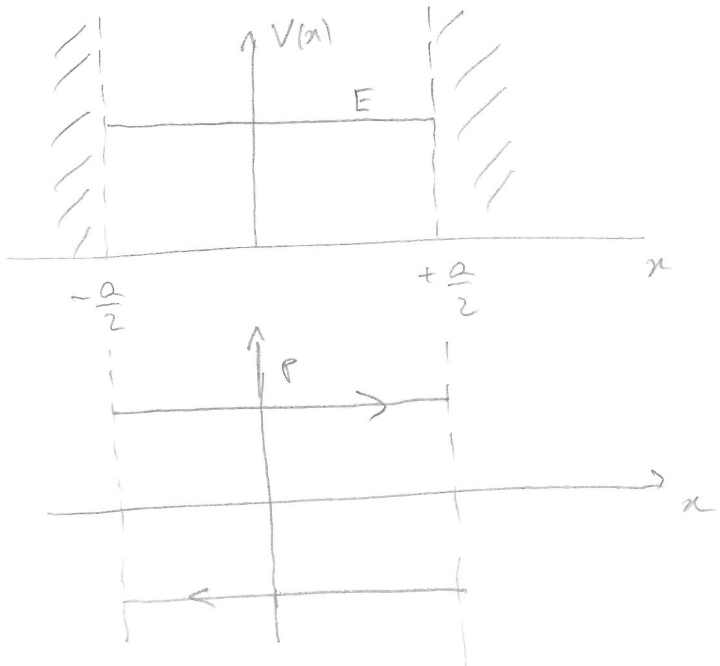
$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\overline{p^2} = -\hbar^2\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right)\right] = \frac{m\omega\hbar}{2} \qquad \text{(mostre!)}$$

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad ; \quad \Delta p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \quad ; \quad \Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

PARTÍCULA EM UM POÇO DE POTENCIAL INFINITO

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se} \quad x < -a/2 \\ 0 & \text{se} \quad -a/2 < x < a/2 \\ \infty & \text{se} \quad x > a/2 \end{cases}$$



$$E = \frac{p^2}{2m}$$

Dentro da região $-a/2 < x < +a/2$ o movimento é livre. As soluções da equação de Schrödinger devem ser

$$\psi(x,t) = A\, e^{-iEt/\hbar} \cos(kx + \varepsilon)$$

onde $E = \hbar^2 k^2/2m$

e

$$\psi\left(\frac{a}{2}, t\right) = \psi\left(-\frac{a}{2}, t\right) = 0 \, .$$

Re-escrevendo

$$\Psi(x,t) = A\, e^{-iEt/\hbar}\left[\cos kx \cos\xi - \sin kx \sin\xi\right]$$

$$\equiv e^{-iEt/\hbar}\left[C_1 \cos kx + C_2 \sin kx\right]$$

As condições de contorno ficam

$$C_1 \cos\frac{ka}{2} + C_2 \sin\frac{ka}{2} = 0$$

$$C_1 \cos\frac{ka}{2} - C_2 \sin\frac{ka}{2} = 0 \quad .$$

Temos então dois casos:

1 $\quad C_2 = 0 \quad ; \quad \frac{ka}{2} = (2n+1)\frac{\pi}{2} \Rightarrow k = (2n+1)\frac{\pi}{a}$

$$\Psi_n^{(1)}(x,t) = C_1\, e^{-iE_nt/\hbar} \cos\left[\frac{(2n+1)\pi x}{a}\right] \quad ; \quad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2(2n+1)^2}{2ma^2}, \; n=0,1,2$$

2 $\quad C_1 = 0 \quad ; \quad \frac{ka}{2} = n\pi \Rightarrow k = \frac{2n\pi}{a}$

$$\Psi_n^{(2)}(x,t) = C_2\, e^{-iE_nt/\hbar} \sin\left[\frac{2n\pi x}{a}\right] \quad ; \quad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2(2n)^2}{2ma^2} \; ; \; n=1,2,$$

Os dois resultados podem ser combinados:

$$\Psi_n(x,t) = C\, e^{-iE_nt/\hbar} \cos\left[\frac{n\pi x}{a} + (n+1)\frac{\pi}{2}\right]$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Exercício: verifique que as soluções 1 e 2 estão contidas nessa solução geral.

Vamos tomar agora apenas o estado fundamental. Definindo

$$\boxed{\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\,\varphi(x)} \; ; \quad \varphi(x) = \begin{cases} A\cos\frac{\pi x}{a} & \text{se } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{se } x < -\frac{a}{2} \text{ ou } x > \frac{a}{2} \end{cases} \; ; \quad |\Psi| = |\varphi|$$

Normalização

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} |A|^2 \cos^2\frac{\pi x}{a}\, dx = |A|^2 \frac{a}{2} \rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

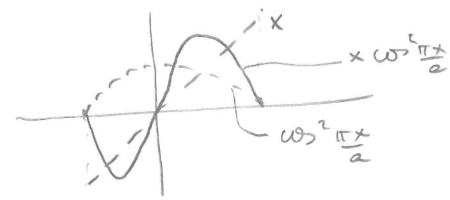
ou $A = \sqrt{\frac{2}{a}}\, e^{i\delta}$, δ = real = fase de A.

Escolhemos $\delta = 0$, mas qualquer valor serve, pois $|\varphi(x)|^2$ não depende de δ.

$$\Rightarrow \varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, e^{-iE_1t/\hbar} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \qquad \text{p/ } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$$

Valores médios

$$\overline{x} = \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x\cos^2\frac{\pi x}{a}\, dx = 0$$



$$\overline{p} = \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left(\cos\frac{\pi x}{a}\right)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(\cos\frac{\pi x}{a}\right)\right] = \frac{+i\hbar 2}{a}\frac{\pi}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{a/2} \cos\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\, dx = 0$$

$$\overline{x^2} = \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x^2\cos^2\frac{\pi x}{a}\, dx = \frac{4a^2}{\pi^3}\underbrace{\int_0^{\pi/2} u^2\cos^2 u\, du}_{\frac{\pi}{8}\left(\frac{\pi^2}{6}-1\right)} = \frac{a^2}{2}\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2}\right) \simeq 0.033a^2$$

$$\overline{p^2} = \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left(\cos\frac{\pi x}{a}\right)\left[-\hbar\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\cos\frac{\pi x}{a}\right)\right]dx = \frac{2\hbar^2\pi^2}{a^3}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos^2\frac{\pi x}{a}\,dx = \frac{\hbar^2\pi^2}{a^2}$$

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \overline{x}^2} = \sqrt{\overline{x^2}} \simeq 0.18\,a$$

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \overline{p}^2} = \sqrt{\overline{p^2}} = \frac{\pi\hbar}{a}$$

$$\Delta x\,\Delta p \approx 0{,}18\pi\hbar \approx 0{,}57\hbar$$

A Equação de Schrödinger Independente do Tempo

Uma das técnicas para se resolver equações diferenciais parciais é por separação de variáveis. Para a equação de Schrödinger (ES)

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

tentamos uma solução da forma

$$\Psi(x,t) = \varphi(x)\, f(t) .$$

Substituindo na ES e dividindo os dois lados por Ψ obtemos

$$\frac{1}{\varphi}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V\varphi\right] = \frac{1}{f}\left[i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\right]$$

Se $V = V(x)$ (independente do tempo), cada lado deve ser constante:

$$\frac{1}{f}\left[i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\right] = E$$

$$\frac{1}{\varphi}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V\varphi\right] = E$$

A primeira equação tem solução $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$ e a segunda,

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V\varphi = E\varphi}$$

é a Eq. Schrödinger Independente do tempo. As soluções $\varphi(x)$ são chamadas de auto-funções da energia.

Como a ES é linear, a solução geral dessa equação pode ser escrita como combinação linear de suas auto-funções: Se a energia é quantizada a ESIT só tem solução para alguns valores de E:

$$\Psi_n(x,t) = e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x)$$

e a solução geral é

$$\Psi(x,t) = \sum_n C_n e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x) .$$

Se a energia não é quantizada, temos solução para todo valor de E e

$$\Psi(x,t) = \int C(E) e^{-iEt/\hbar} \varphi_E(x) \, dE$$

Exemplos

1) Para a partícula na caixa

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{\frac{2}{a}} e^{-\frac{i n^2 \pi^2 \hbar t}{2ma^2}} \cos\left[\frac{n\pi x}{a} + (n+1)\frac{\pi}{2}\right]$$

2) Para a partícula livre

$$\Psi(x,t) = \int_{-0}^{\infty} C(E) e^{i(kx - Et/\hbar)} dE \qquad \text{onde} \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

ou

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} C(k) e^{i(kx - \hbar k^2 t/2m)} dk$$

Consequências Importantes

Uma partícula cujo estado é da forma $\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\,\varphi(x)$ tem

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = |\varphi(x)|^2 = \text{indep. do tempo.}$$

Por outro lado, se

$$\Psi(x,t) = c_1\, e^{-iE_1t/\hbar}\,\varphi_1(x) + c_2\, e^{-iE_2t/\hbar}\,\varphi_2(x)$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = |c_1|^2|\varphi_1(x)|^2 + |c_2|^2|\varphi_2(x)|^2 + c_1^*c_2\, e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\,\varphi_1^*(x)\,\varphi_2(x) + c_1c_2^*\, e^{+i(E_2-E_1)t/\hbar}\,\varphi_1(x)\,\varphi_2^*(x)$$

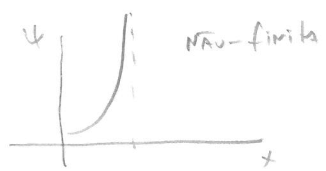
que dá uma distribuição de probabilidade dependente do tempo. A frequência de oscilação temporal é

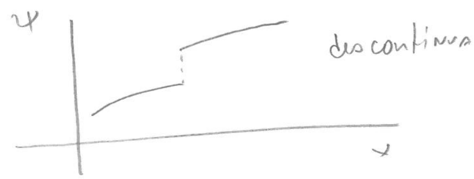
$$\nu = \frac{E_2-E_1}{2\pi\hbar} = \frac{\Delta E}{h}$$

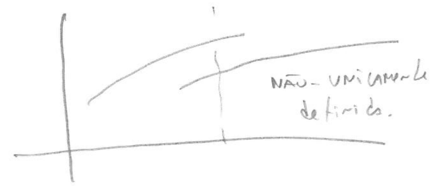
Se o potencial depende do tempo, $V = V(x,t)$, a ES não pode ser separada. Nesse caso não existem auto-estados da energia.

Quantização da Energia

A função de onda representa o estado da partícula, e $|\Psi|^2$ sua probabilidade de estar x no instante t. Além disso, no cálculo do valor médio de p, precisamos de $\partial\Psi/\partial x$. Para que $|\Psi|^2$ seja finita e $\partial\Psi/\partial x$ também, impomos que as Ψ "aceitáveis" devem ser FINITAS e CONTÍNUAS, além de serem UNICAMENTE definidas.





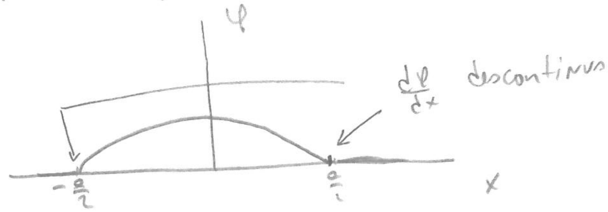


No caso de estarmos resolvendo a ESIT, essas propriedades aplicam-se também à $\varphi(x)$. Além disso,

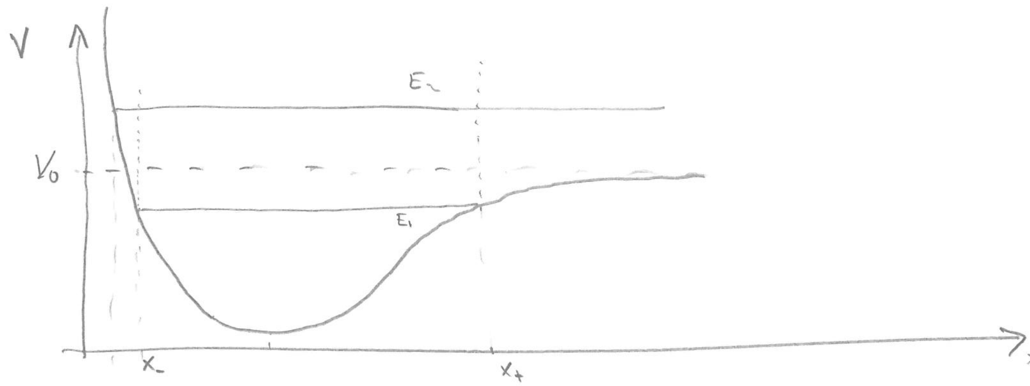
$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\varphi$$

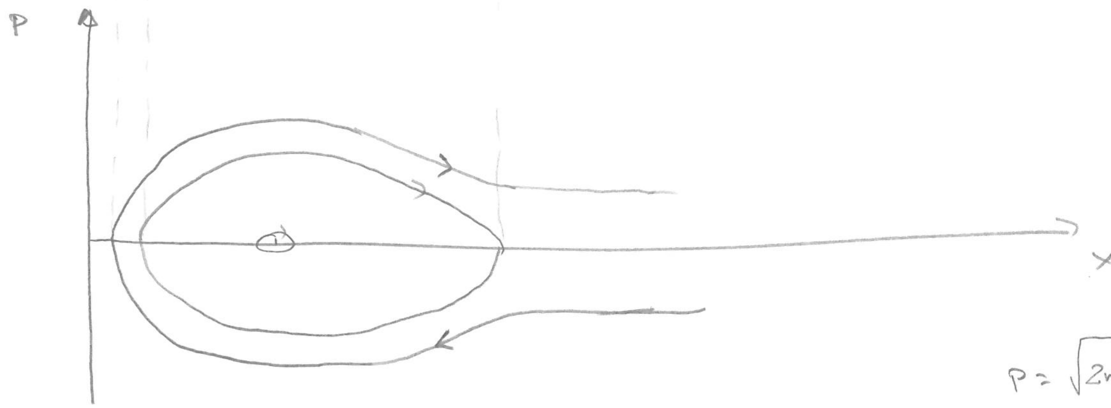
Se $V(x)$ é sempre finito, $d^2\varphi/dx^2$ também deve ser finita e, portanto, $d\varphi/dx$ deve ser contínua.

OBS No caso da CAIXA, $V(x) \to \infty$ em $x = \pm a/2$. O estado fundamental, por exemplo é



Vamos considerar o movimento no potencial abaixo:





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

Classicamente, quando $E = E_1$, $x_- \leq x \leq x_+$. As regiões

$$x < x_- \longrightarrow \text{REGIÃO I}$$

$$x > x_+ \longrightarrow \text{REGIÃO III}$$

são ditas classicamente proibidas. Só a região

$$x_- < x < x_+ \longrightarrow \text{REGIÃO II}$$

é acessível à partícula.

Quanticamente vemos que $\dfrac{d^2\varphi}{dx^2} = \dfrac{2m}{\hbar^2}(V - E)\,\varphi$ e

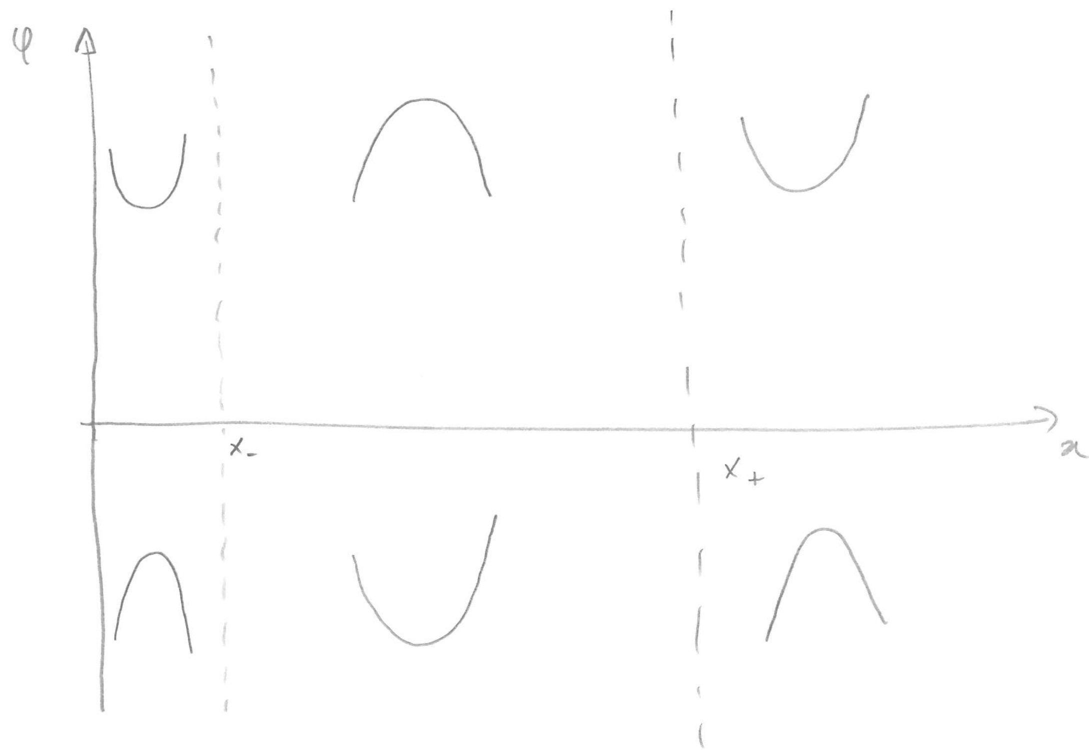
$$\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E_1) = \begin{cases} > 0 & \text{em I} \\ < 0 & \text{em II} \\ > 0 & \text{em III} \end{cases}$$

e

$$\left.\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right|_{\substack{x \in I \\ \text{ou} \\ x \in III}} = \begin{cases} > 0 & \text{se} \quad \varphi > 0 \\ < 0 & \text{se} \quad \varphi < 0 \end{cases}$$

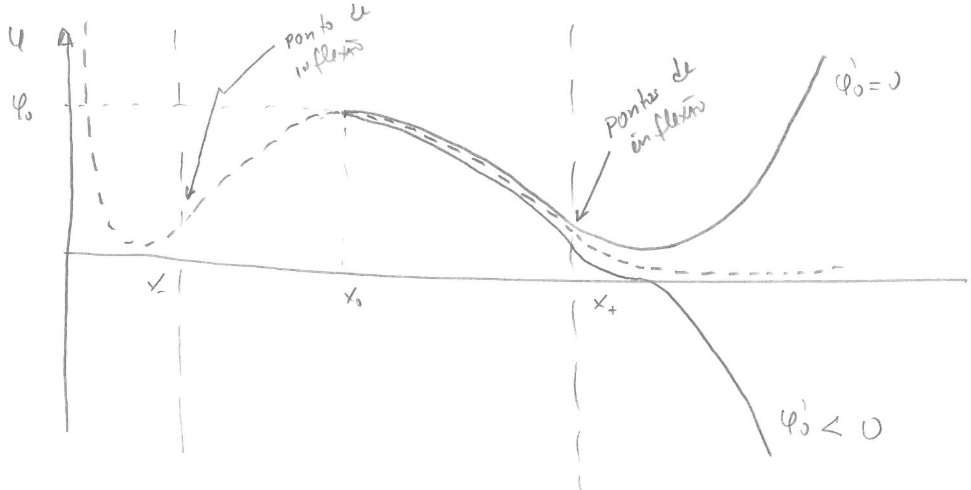
$$\left.\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right|_{x \in II} = \begin{cases} < 0 & \text{se} \quad \varphi > 0 \\ > 0 & \text{se} \quad \varphi < 0 \end{cases}$$

e temos o seguinte esquema para a concavidade de $\varphi(x)$:



Como a equação $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\varphi$ é de 2º grau, precisamos de $\varphi(x_0)$ e $\frac{d\varphi}{dx}(x_0)$ para determinar uma solução completamente.

Vamos fazer um cálculo imaginário de $\varphi(x)$, dado φ_0 e $\varphi_0' = 0$!!



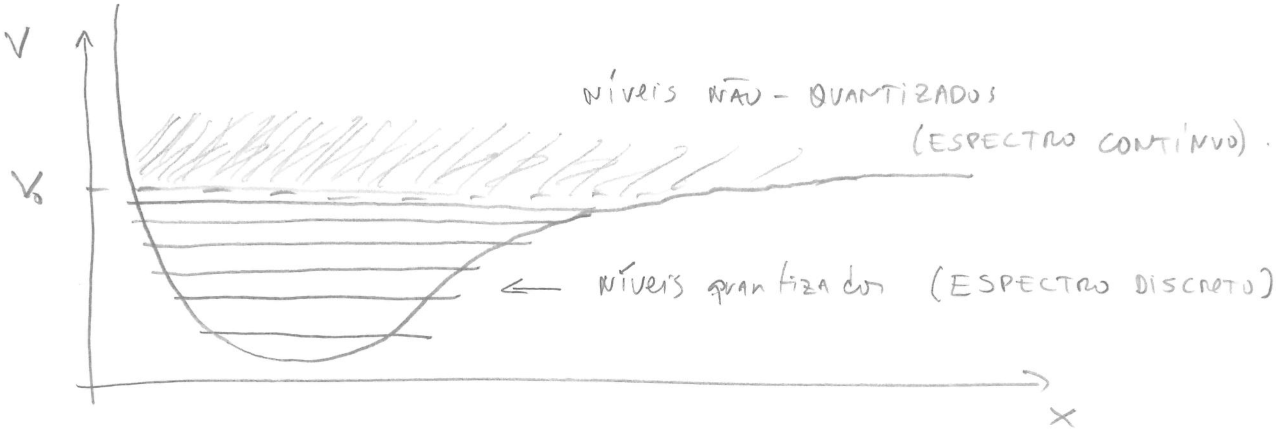
- nos pontos x_-, x_+, $\varphi'' = 0 \Rightarrow$ são sempre pontos de inflexão.
- podemos ajustar φ_0' de forma que $\varphi(x) \to 0$ na região III.
- esse ajuste não garante que $\varphi(x) \to 0$ na região I.

Como ajustar $\varphi(x)$ dos dois lados? <u>VARIANDO E</u>!! Mudando um pouco E, o valor de φ_0' que ajusta $\varphi(x)$ na região III muda. O comportamento de $\varphi(x)$ na região I também muda, podendo passar de $\varphi(x) \to +\infty$ para $\varphi(x) \to -\infty$, da mesma forma que ocorre em III ao mudarmos φ_0'. Dessa forma, para alguns E será possível ajustar os dois lados, mas só para esses valores.

Note que a distância entre dois valores de E que ajustam $\varphi(x)$ nos dois lados é finita. Se mudarmos E de um valor infinitesimal vamos fazer com que $\varphi(x)$ seja divergente em pelo menos um dos lados.

A imposição de condições de contorno é a origem matemática da quantização da energia.

Note que se $E > V_0$ só precisamos ajustar $\varphi(x)$ em I, o que é sempre possível para qualquer E. Nesse caso a energia não é quantizada:



APLICAÇÃO AO OSCILADOR HARMÔNICO : $V(x) = \frac{kx^2}{2}$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{kx^2}{2} - E\right)\varphi$$

Se E é grande e $x \simeq 0$ $\left|\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right| \simeq \left|\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi\right|$ é grande. Para uma região pequena de x podemos aproximar

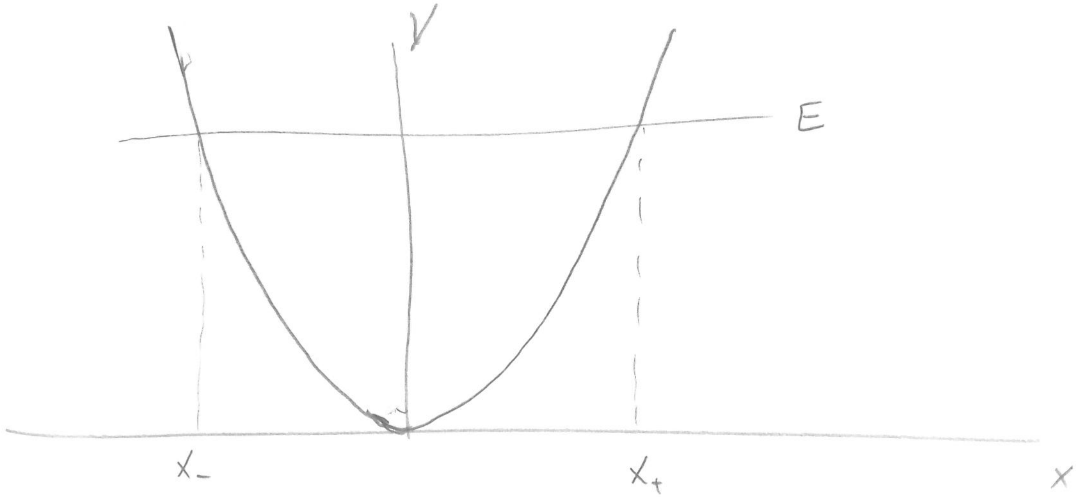
$$\varphi(x) = A\cos\Omega x$$

$$\varphi'' = -\Omega^2\varphi \implies \Omega^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V).$$

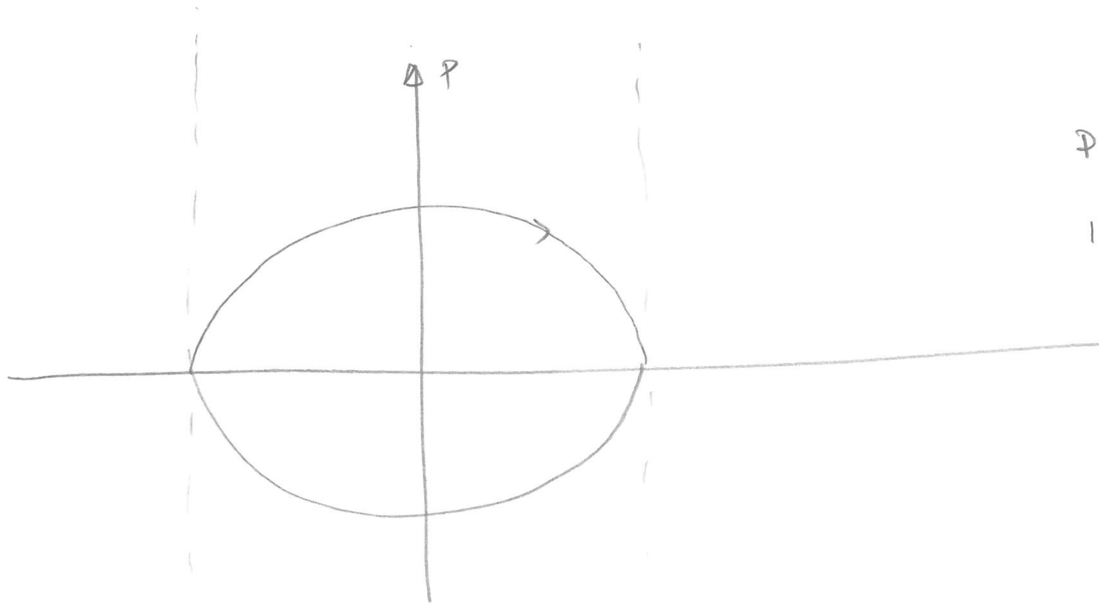
O comprimento de onda da oscilação é $\simeq$ $\lambda = \frac{2\pi}{\Omega} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}}$.

- conforme x fica perto de x_+ ou x_-, $V(x) \simeq E$ e λ aumenta.
- perto dos máximos da oscilação $\frac{d\varphi}{dx} = 0$ mas $\frac{d^2\varphi}{dx^2}$ é grande. Então, perto de x_+ e x_-, como Ω^2 diminui, φ aumenta para que φ'' continue grande.

O resultado é :

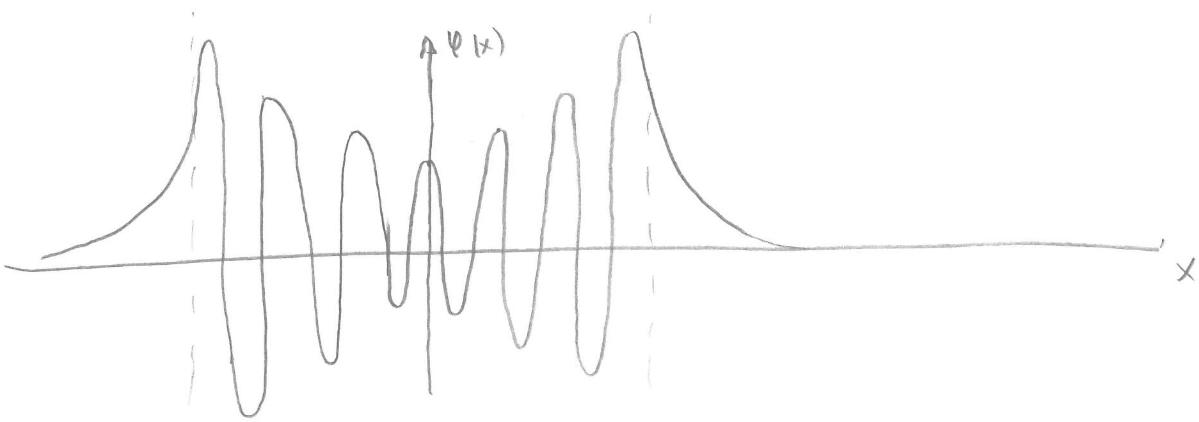


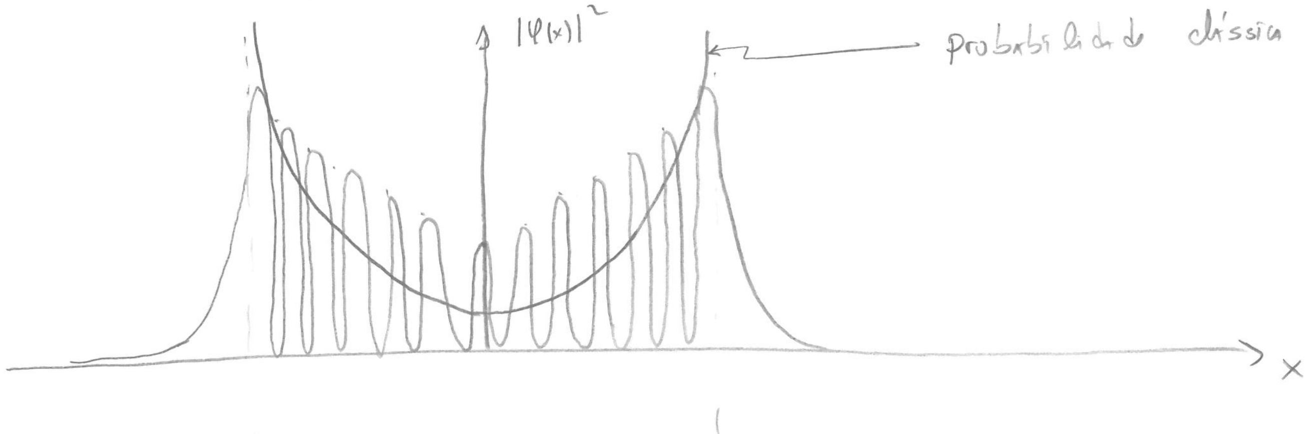
$$V = \frac{kx^2}{2}$$



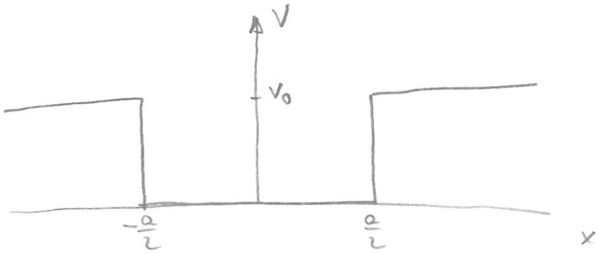
$$P = \sqrt{2m\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)}$$

$$1 = \frac{P^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/k}$$





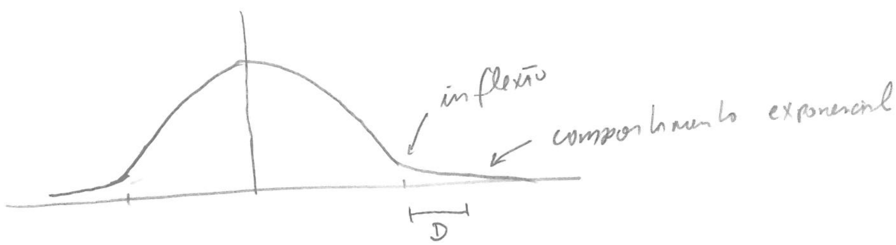
Exemplo — Poço de potencial finito



(a) Verifique que, p/ $x > \frac{a}{2}$ $\quad \varphi(x) = A\, e^{-\sqrt{2m(V_0-E)}\, x/\hbar}$ é solução

(b) Verifique que, p/ $x < -\frac{a}{2}$ $\quad \varphi(x) = A\, e^{+\sqrt{2m(V_0-E)}\, x/\hbar}$ é solução

(c) Faça um esboço do estado fundamental $\varphi_1(x)$:



(d) Na região $x > \frac{a}{2}$ $\quad |\varphi(x)|^2 = A^2\, e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}\, x/\hbar}$. Então a partícula pode ser encontrada na região classicamente proibida. Uma estimativa da região onde $|\varphi(x)|^2$ é apreciável é dada por

$$+2\sqrt{2m(V_0-E)}\,\frac{D}{\hbar} = 1 \quad , \text{ou}$$

$$D = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0-E)}}$$ = proporcional à $\hbar$ que é muito pequeno.

Note que $p = \sqrt{2m(E-V_0)}$ = momento da partícula e $D = \frac{\hbar}{2|p|}$

TÓPICO EXTRA : A REPRESENTAÇÃO DE MOMENTO

Funções $\varphi(x)$ suaves podem ser escritas em termos de sua TRANSFORMADA DE FOURIER $\tilde{\varphi}(p)$:

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\varphi}(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp \tag{1}$$

USANDO AS propriedades da FUNÇÃO DELTA DE DIRAC , $\delta(x)$,

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p-p')x/\hbar}\, dx = \delta(p-p') \tag{2}$$

$$\int f(p)\, \delta(p-p')\, dp = f(p') \tag{3}$$

podemos inverter a 1ª equação e escrever

$$\tilde{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x)\, e^{-ipx/\hbar}\, dx \quad . \tag{4}$$

Na eq. (1) $\varphi(x)$ pode ser interpretada como uma combinação de "ondas planas" $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, que representam partícula com momento p . O peso de cada uma dessas ondas em $\varphi(x)$ é $\tilde{\varphi}(p)$ e interpretamos

$|\tilde{\varphi}(p)|^2 dp$ = prob. da partícula com função de onda $\varphi(x)$ ter momento entre p e $p+dp$.

Então,

$\varphi(x) =$ Amplitude de probabilidade da partícula estar em x

$\tilde{\varphi}(p) =$ " " " ter momento p.

Vamos supor que $\varphi(x)$ está normalizada, i.e.,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1 .$$

Então,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\varphi}(p)|^2 dp = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \int dx \int dx' \, \varphi^*(x)\,\varphi(x')\, e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p}$$

$$= \int dx\, dx' \, \varphi^*(x)\,\varphi(x')\,\delta(x-x') = \int dx\, |\varphi(x)|^2 = 1$$

ou seja, $\tilde{\varphi}(p)$ também está normalizada. O valor médio do momento pode então ser escrito como

$$\bar{p} = \int p\, |\tilde{\varphi}(p)|^2 dp = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \int dx \int dx' \, \varphi^*(x)\,\varphi(x')\, p\, e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p}$$

usamos agora o truque $\quad p\, e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p} = +i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\left[e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p} \right] \quad$ e

$$\bar{p} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx \int dx'\, \varphi^*(x)\,\varphi(x') \left[+i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \underbrace{\left(\int e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p}\, dp \right)}_{2\pi\hbar\,\delta(x-x')} \right]$$

$$\bar{p} = +i\hbar \int dx \int dx' \, \varphi(x') \, \varphi^*(x) \, \frac{d}{dx'}\left(\delta(x-x')\right)$$

Agora vemos que $\displaystyle\int dx' \, \varphi(x') \, \delta'(x-x') = -\int dx' \left(\frac{d\varphi}{dx'}\right) \delta(x-x')$

e

$$\bar{p} = -i\hbar \int dx \int dx' \, \varphi^*(x) \, \frac{d\varphi}{dx'} \, \delta(x-x') = -i\hbar \int dx \, \varphi^*(x) \frac{d\varphi}{dx}$$

$$= \int dx \, \varphi^*(x) \left[-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right]$$

Da mesma forma, partindo de $\bar{x} = \int x \, |\varphi(x)|^2 dx$ podemos mostrar que $\bar{x} = \displaystyle\int \tilde{\varphi}(p) \left[i\hbar \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial p}\right] dp$. Assim,

Na <u>representação de coordenadas</u>

$\varphi(x)$ $\qquad \bar{x} = \displaystyle\int x \, |\varphi(x)|^2 dx \qquad \bar{p} = \int \varphi^*(x) \left[-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right] dx$

$$p \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Na <u>representação de momentos</u>

$\tilde{\varphi}(p)$ $\qquad \bar{x} = \displaystyle\int \tilde{\varphi}^*(p) \left[i\hbar \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial p}\right] dp \qquad \bar{p} = \int |\tilde{\varphi}(p)|^2 p \, dp$

$$x \longrightarrow +i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$