

Estrutura da Matéria II (F-489)

Amir O. Caldeira

7 de Agosto de 2018

I Revisão dos conceitos básicos

I.1 A função de onda e a experiência de Young

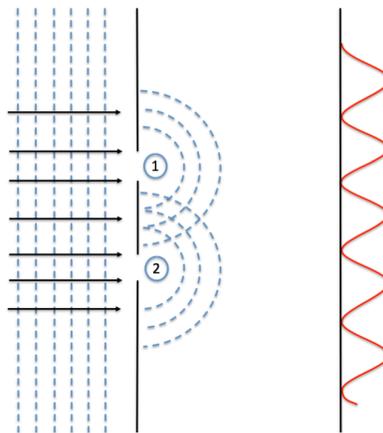
Até, praticamente, as últimas décadas do século XIX, os fenômenos físicos podiam ser entendidos através da mecânica newtoniana e do eletromagnetismo de Maxwell. A luz, em particular, era um exemplo do fenômeno ondulatório previsto pelas equações de Maxwell. Entretanto, ao longo do 1º quarto do século XX, um conjunto de experiências demonstrou que o tratamento clássico, tanto da luz quanto do movimento de partículas massivas, não era adequado para explicar os resultados experimentais obtidos na época.

A fim de explicar o que era observado em experiências como: a radiação do corpo negro, o efeito fotoelétrico, as raias do espectro do átomo de hidrogênio, o efeito Compton e a difração eletrônica de Davisson e Germer, lançou-se mão das seguintes hipóteses:

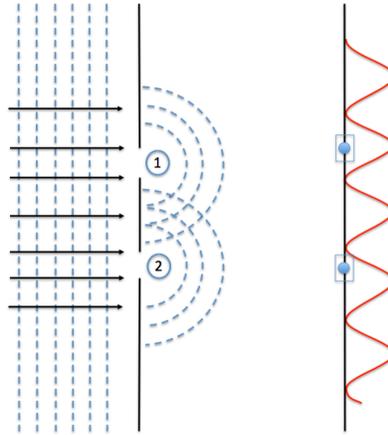
1. A luz é constituída de pacotes de energia $h\nu$ e momento linear $p = h/\lambda$ ($h = 6.62 \times 10^{-34}$ J.s é a constante de Planck), os chamados *fótons*. Esta é a *hipótese de Einstein*.
2. A matéria apresenta comportamento ondulatório com comprimento de onda $\lambda = h/p$ e frequência E/h . Esta é a *hipótese de de Broglie*.

Estas duas características nos levam, por exemplo, ao fato de a matéria absorver ou emitir radiação eletromagnética em quantidades discretas pois elas preveem, entre outros resultados, a existência de órbitas atômicas estáveis e discretas (níveis de energia). Como, então, conciliar as teorias ondulatória e corpuscular da radiação e da matéria? Vamos analisar um fenômeno tipicamente ondulatório em termos de fótons. Consideremos a experiência de Young em 3 situações distintas:

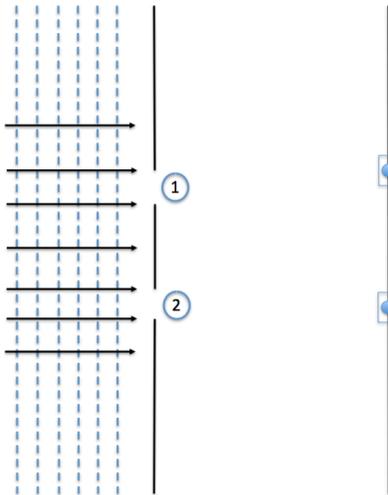
- a) Feixe de luz intenso \Rightarrow figura de interferência da intensidade detetada no anteparo.



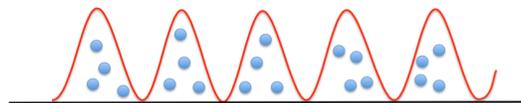
- b) Feixe de luz + detetor no anteparo \Rightarrow figura de interferência da intensidade, mas contagem discreta da chegada dos fótons, apesar de muitos deles por unidade de tempo.



- c) Feixe de luz não intenso + detetor no anteparo \Rightarrow se, por exemplo, 1 fóton atravessa a fenda dupla por segundo, 1 fóton por segundo é registrado em um detetor localizado em algum ponto do anteparo.



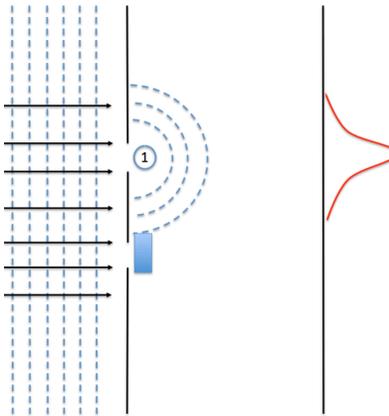
No decorrer de um longo intervalo de tempo o resultado acumulado é uma figura de interferência!



O resultado do feixe c) é compatível com o de N experiências ($N \gg 1$) de 1 fóton, identicamente preparadas e totalmente descorrelacionadas. Depois de realizadas (fótons detetados), sobrepõem-se os N anteparos atingidos em pontos diferentes (mas, cada um em apenas 1 ponto) e o resultado é um histograma em forma de interferência. Uma pergunta imediata é: “por onde passou o fóton?”

Para responder esta pergunta podemos repetir a mesma experiência fechando uma das fendas.

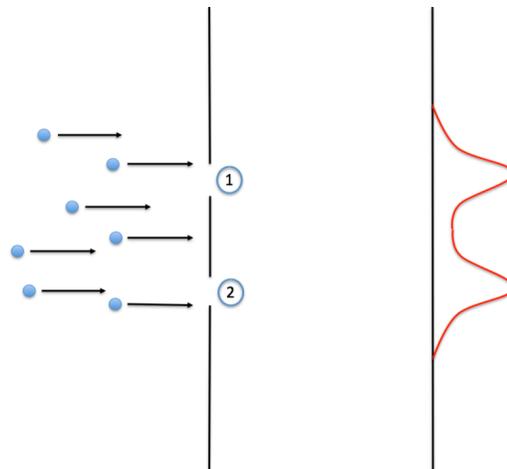
O resultado é que a figura de interferência é destruída. Portanto, ao tentarmos descrever os fótons através de trajetórias de partículas clássicas destruimos a figura de interferência.



Portanto, a informação adquirida de por onde passou o fóton fez com que o processo de interferência de alternativas não mais ocorresse.

É exatamente o processo de interferência de alternativas que está na base da formulação da mecânica quântica.

Ao lançarmos *partículas clássicas* sobre duas fendas obtemos o resultado abaixo:



O que é compatível com uma simples adição das intensidades dos feixes oriundos das fendas 1 e 2: $I = I_1 + I_2 \Rightarrow$ não há interferência.

Podemos, então, esboçar o seguinte raciocínio na tentativa de motivar a solução deste problema (cuidado! ver comentário na pág.4). A intensidade no anteparo é dada por $I(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})c$ onde $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ é a velocidade da luz e $U(\mathbf{r})$ é a densidade de energia da radiação eletromagnética (EM) dada por $\epsilon_0 E^2(\mathbf{r})$ (lembre-se que $B(\mathbf{r}) = E(\mathbf{r})/c$).

Se a radiação é composta por N fótons, a sua energia é $Nh\nu$. Consideremos, então, um campo $E(\mathbf{r})$ (apenas uma componente do campo é suficiente para a nossa argumentação) associado à presença de apenas 1 fóton (veja comentário abaixo). Através dele podemos definir uma densidade de probabilidade de se encontrar o fóton em um ponto \mathbf{r} como

$$\rho(\mathbf{r}) \equiv \epsilon_0 \frac{E^2(\mathbf{r})}{h\nu}$$

pois $\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = 1$.

Por outro lado, sabemos que o campo na placa é dado pela superposição dos campos gerados nas fendas 1 e 2, respectivamente, como $E(\mathbf{r}) = E_1(\mathbf{r}) + E_2(\mathbf{r})$. Assim, se definirmos

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{h\nu}} E(\mathbf{r})$$

temos

$$\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_0 |E|^2}{h\nu}$$

onde assumimos que $\psi(\mathbf{r})$ pode ser complexo. Desta forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r}) \Rightarrow |\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\text{Re}(\psi_1\psi_2^*) = \frac{\epsilon_0}{h\nu} \{ |E_1|^2 + |E_2|^2 + \underbrace{2\text{Re}(E_1E_2^*)}_{\text{interferência!}} \}$$

O objeto principal da teoria passa a ser $\psi(\mathbf{r})$ tal que $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ é a probabilidade (densidade de probabilidade) de se encontrar 1 fóton no ponto \mathbf{r} e $\psi(\mathbf{r})$ é a *amplitude de probabilidade* correspondente, a informação máxima que podemos ter sobre o fóton. Este é criado como uma partícula, absorvido no anteparo como uma partícula, mas entre estes eventos só podemos descrevê-lo através de $\psi(\mathbf{r})$.

No caso de partículas clássicas, $\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r})$, ou seja, $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$ onde o evento A é passar por 1 e B por 2. No caso de fótons temos que primeiro somar as amplitudes (superposição) para depois tomar o seu quadrado.

$$\Rightarrow \rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$$

onde

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r})$$

o que evidencia a profunda diferença entre os casos clássico e quântico. Portanto, a interferência se dá entre as amplitudes de probabilidade $\psi_1(\mathbf{r})$ e $\psi_2(\mathbf{r})$.

Comentário importante: Convém enfatizar neste ponto que a proporcionalidade entre $\psi(\mathbf{r})$ e $E(\mathbf{r})$ é apenas de caráter operacional. $E(\mathbf{r})$ é um campo elétrico, uma variável clássica cuja dinâmica é regida pelas equações de Maxwell. Já $\psi(\mathbf{r})$ é uma função criada para conciliar os resultados da experiência da fenda dupla para ondas e partículas. A sua interpretação é probabilística e poderíamos postulá-la sem qualquer menção ao campo $E(\mathbf{r})$. Na realidade nem faz sentido definirmos um campo clássico no caso de poucos fótons (N fixo e $\mathcal{O}(1)$). Portanto, bastaria impor o princípio de superposição para a função $\psi(\mathbf{r})$ e sua interpretação probabilística

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1.$$

Esta função é o que representa o estado da partícula numa teoria quântica. Existe sim, uma relação entre um campo clássico e a função de onda que descreve o estado quântico do campo de radiação¹, que é obtida através de um campo genuinamente quântico. Este campo quântico ainda pode ser relacionado com a função $\psi(\mathbf{r})$ que descreve o estado físico do quantum² a ele associado. Estes são tópicos relacionados com a teoria quântica de campos.

Como já mencionamos anteriormente, de Broglie postulou a existência de ondas de matéria e esta hipótese foi confirmada por Davisson e Germer. Tudo o que foi visto nos casos a), b) e c) para fótons aplica-se para elétrons ou qualquer outra partícula atômica. Assim, podemos postular diretamente $\psi(\mathbf{r})$ com as mesmas propriedades que

¹Estado coerente de campo de radiação (fase fixa).

²Estado de 1 fóton (número fixo).

definimos para os fótons. Esta função, a que chamaremos de *função de onda*, representa o estado físico dos elétrons (ou prótons ou nêutrons). Esta é a informação máxima que temos sobre a partícula entre a fonte de onde é emitida e o anteparo onde é absorvida.

A grande diferença entre os fótons e os elétrons (ou qualquer outra partícula elementar massiva) é que os primeiros surgiram como os quanta da radiação EM - um campo classicamente observável - o que não acontece com as partículas massivas. Uma pergunta inevitável é se existe um campo de matéria, ou seja, o que estaria para uma partícula massiva assim como a radiação EM está para o fóton. A resposta é sim, porém, se este campo pode ser descrito (e observado) classicamente é uma questão ainda em aberto e depende da "partícula" considerada. No caso dos elétrons, por exemplo, este campo é complexo (ao contrário do campo EM) e genuinamente quântico ³.

A nossa conclusão sobre tudo o que foi dito até o momento é que, dada uma partícula atômica ou um fóton, podemos descrevê-la através de uma função de onda $\psi(\mathbf{r})$ cuja interpretação é que $|\psi(\mathbf{r})|^2$ representa a densidade de probabilidade de encontrá-la no ponto \mathbf{r} . Assim, as propriedades ondulatória e corpuscular coexistem: este é o princípio da *dualidade onda-partícula*. Entretanto, não há nenhuma forma de estas duas propriedades serem testadas simultaneamente. Ou fazemos um esquema de medida onde o aspecto corpuscular seja evidenciado ou um que revele o caráter ondulatório do sistema em questão. Este é o *princípio da complementaridade*, que ficou bem claro na experiência de Young.

Como postulamos, $\psi(\mathbf{r})$ é uma função que descreve uma onda. Por outro lado, sabemos que independentemente da origem do fenômeno ondulatório ele é sempre regido por uma dada evolução temporal para que, dadas as condições iniciais condizentes com o problema físico, possamos determinar o elemento básico $\psi(\mathbf{r}, t)$ no instante t . Para descrevermos o resultado da experiência de Young, para fótons ou partículas massivas, basta assumir a forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (1)$$

onde $\omega = \omega(\mathbf{k})$.

Com o auxílio das relações de Planck-Einstein-de Broglie temos

$$\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \quad (\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}), \\ |\mathbf{p}| &= \frac{h}{\lambda} = \hbar|\mathbf{k}| \Rightarrow \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \end{aligned} \quad (2)$$

No caso de fótons $\omega = c|\mathbf{k}|$ enquanto que para partículas massivas

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ ou } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Neste ponto poderíamos tentar criar uma equação que descrevesse a evolução temporal de $\psi(\mathbf{r}, t)$ mas há várias conclusões a que podemos chegar mesmo antes de ter a sua forma explícita. Deixaremos a sua obtenção para mais tarde.

O resultado da experiência de Young nos mostrou que num ponto do espaço a partícula pode ser encontrada numa superposição de ondas planas,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t).$$

Podemos generalizar este conceito e criar o que chamamos de pacotes de onda como

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{i/\hbar(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - E(\mathbf{p})t)} \quad (3)$$

onde $(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$ garante que

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = \int |\psi(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = 1 \quad (4)$$

e

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) = \tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

³Outro ponto de vista é assumir a existência de quanta corpusculares nos dois casos, com ou sem massa, e obter os campos como estados particulares contendo um grande número (a rigor, indefinido) de partículas. Neste caso, nem mesmo o campo EM poderia ser considerado fundamental. Entretanto, mesmo nesta descrição não se está livre de controvérsias.

Convém notar que $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ é a transformada de Fourier de $\psi(\mathbf{r}, t)$, ou seja,

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \psi(\mathbf{r}, t) e^{-i/\hbar(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - E(\mathbf{p})t)}. \quad (5)$$

A interpretação probabilística de $\psi(\mathbf{r}, t)$ nos leva imediatamente ao conceito de valores médios de determinadas variáveis. Por exemplo,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}(t) \rangle &= \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} = \int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathbf{r} \quad \text{ou} \\ \langle r^2(t) \rangle &= \int d^3r r^2 |\psi(\mathbf{r}, t)|^2. \end{aligned} \quad (6)$$

Já os valores médios do momento linear $\mathbf{p}(t)$ e $p^2(t)$ são obtidos de outra forma. Para tal, devemos notar que estados do tipo onda plana

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - E t)/\hbar}$$

são tais que

$$-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (7)$$

o que nos permite escrever para o pacote (3)

$$-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \mathbf{p} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) e^{i/\hbar(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - E t)} \quad (8)$$

Multiplicando a equação acima por $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ à esquerda, integrando em d^3r e usando a relação (5), temos

$$\int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar\nabla) \psi(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{p} |\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2 d^3p. \quad (9)$$

Como pela condição de normalização (4) $|\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$ pode ser interpretado como a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula com momento linear \mathbf{p} (note que agora esta probabilidade está definida no espaço dos momentos lineares), podemos reescrever (9) como

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}(t) \rangle &= \int \mathbf{p} |\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar\nabla) \psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{e} \\ \langle p^2(t) \rangle &= \int p^2 |\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) (-\hbar^2\nabla^2) \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (10)$$

Assim, podemos escrever de forma geral:

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{r}) \rangle &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{e} \\ \langle g(\mathbf{p}) \rangle &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) g(-i\hbar\nabla) \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (11)$$

onde

$$g(-i\hbar\nabla) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} g^{(n)}(0) (-i\hbar\nabla)^n.$$

Em função dos resultados aqui analisados podemos montar a estrutura matemática⁴ desta teoria através dos seguintes pontos:

- i) A normalização da função de onda assim como o princípio da superposição nos leva a considerá-la como um elemento de um espaço vetorial \mathcal{F} , dotado de produto interno e cujos elementos são funções de módulo quadrado integrável.
- ii) A aplicação de operadores diferenciais do tipo $-i\hbar\nabla$ a ondas planas, resultando em um dado valor do momento linear, nos leva aos conceitos de operadores lineares, auto-funções e auto-valores (reais) destes operadores.

⁴Em linhas gerais. A sua estrutura formal será apresentada mais tarde.

- iii) A decomposição de um pacote de onda em ondas planas nos leva ao conceito da decomposição espectral da função $\psi(\mathbf{r}, t)$ em termos das auto-funções do operador momento linear com densidade de probabilidade $|\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$.
- iv) Os valores médios de operadores são formas bilineares da função $\psi(\mathbf{r}, t)$ e do operador em questão, como em (11).

I.2 A equação de Schrödinger

No caso geral do estudo da dinâmica de sistemas que possam ser descritos por um conjunto de N partículas de coordenadas \mathbf{r}_i , momentos \mathbf{p}_i e massas m_i postulamos a equação de Schrödinger correspondente a este sistema sistema como

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial t} = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t), \quad (12)$$

que no caso de uma única partícula em 1-D se reduz a

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t). \quad (13)$$

A função $\psi(\mathbf{r}, t)$ descreve a amplitude de probabilidade de se encontrar a partícula em \mathbf{r} no instante t . Assim, $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ é a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em (\mathbf{r}, t) , como já vimos anteriormente. A equação (13) implica na conservação da probabilidade de se encontrar a partícula no espaço pois, multiplicando-a por ψ^* e a sua conjugada por ψ temos

$$\begin{aligned} i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t) \psi^* \psi \\ -i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \psi \nabla^2 \psi^* + V(\mathbf{r}, t) \psi^* \psi \end{aligned}$$

que se subtraídas uma da outra dão

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

ou ainda

$$\frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

que nos leva a definir $\rho = \psi^* \psi$ e

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (14)$$

para reescrevê-la como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (15)$$

Esta é a conhecida *equação da continuidade* que, se escrita para a densidade de probabilidade (como em nosso caso), reflete a conservação da probabilidade de se encontrar a partícula no espaço, ou seja,

$$\int \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3r = 1.$$

Vamos passar a estudar o caso de um sistema conservativo, ou seja, $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$. Neste caso, devemos assumir $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$, o que nos leva a reescrever a (13) como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (16)$$

que é a equação de Schrödinger independente do tempo. Essa, sendo uma equação de autovalores, admite soluções estacionárias $\varphi_n(\mathbf{r})$ tais que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_n + V(\mathbf{r}) \varphi_n = E_n \varphi_n, \quad (17)$$

o que nos permite escrever qualquer estado $\psi(\mathbf{r}, t)$ como superposição destas soluções;

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}),$$

onde $\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r})$ é o estado inicial do sistema.

O problema, então, passa a ser a obtenção dos autoestados e autovalores de (17). Em geral, devemos escolher um sistema de coordenadas apropriado para, posteriormente, usar o método de separação de variáveis e resolver as equações diferenciais ordinárias resultantes.

Apesar de este ser o método mais geral, há uma classe particularmente importante de problemas unidimensionais onde a equação da continuidade desempenha um papel fundamental. Trata-se dos potenciais *seccionalmente constantes*, ou seja, potenciais da forma $V(x) = V_j$ se $x_j < x < x_{j+1}$. Nestes casos as soluções de (16) são tais que

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + k_j^2 \varphi = 0,$$

onde

$$k_j = \sqrt{\frac{2m(E - V_j)}{\hbar^2}}$$

se $x_j < x < x_{j+1}$, e que tem como solução

$$\varphi(x) = A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x}.$$

A determinação dos coeficientes A_j e B_j é feita através da constatação que, como estamos no regime estacionário, $\partial \rho / \partial t = 0$, e então,

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \Rightarrow (\text{em 1-D}) \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) = \text{constante}$$

o que implica em

$$\psi(x_j^{(+)}) = \psi(x_j^{(-)}) \text{ e } \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x_j^{(+)}} = \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x_j^{(-)}}. \quad (18)$$

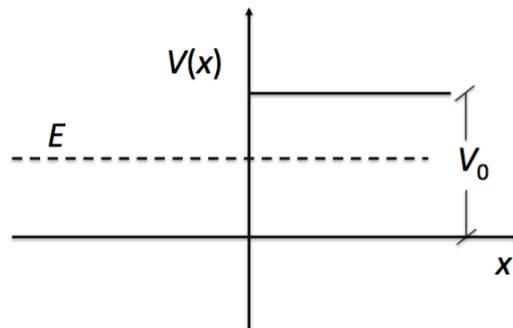
Ou seja, a função de onda e as suas derivadas são contínuas através da descontinuidade de V em torno de x_j . Se há n descontinuidades temos $2n + 2$ constantes (A_j e B_j) a serem determinadas. As $2n$ equações provenientes de (18) nos deixam apenas duas constantes a serem determinadas. Essas, finalmente, dependem da normalização a ser imposta na função de onda. Por exemplo, se em $x = \pm\infty$ tivermos $V > E$ os valores de k são complexos $k = iK$ e apenas 1 das duas constantes A ou B irá ser não-nula pois apenas uma das exponenciais será decrescente e precisamos de $\int |\psi|^2 dx = 1$.

Portanto, o procedimento para se determinar $\psi(x, t)$ quando conhecemos $\psi(x, 0)$ consiste em

- i) Resolver $H\varphi_n = E_n\varphi_n$
- ii) Escrever $\psi(x, t) = \sum_n c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ onde $c_n = \int \psi(x, 0) \varphi_n^*(x) dx$ pois $\psi(x, 0) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$.

No caso de um índice contínuo, como k da discussão acima, devemos fazer as substituições $\sum_n \rightarrow \int dk$ e $\varphi_n(x) \rightarrow \varphi_k(x)$. Obviamente os coeficientes $c_n \rightarrow \bar{\psi}(k)$. Exemplos:

i)



Se $E > V_0$,

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{se } x < 0 \\ A'e^{ik'x} + B'e^{-ik'x} & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$.

$$\begin{aligned} \psi(0^+) &= \psi(0^-) \Rightarrow A + B = A' + B' \\ \psi'(0^+) &= \psi'(0^-) \Rightarrow ik(A - B) = ik'(A' - B'). \end{aligned}$$

Incidência da esquerda $\Rightarrow B' = 0$. Então,

$$\Rightarrow \begin{cases} A + B = A' \\ ik(A - B) = ik'A' \end{cases} \Rightarrow A + B = \frac{k}{k'}A - \frac{k}{k'}B$$

ou

$$B = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right) A \quad \text{e} \quad A' = A + B = \frac{2k}{k + k'} A.$$

Mas,

$$J = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} \right)$$

e se $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ temos;

$$\begin{aligned} \psi^* \frac{d\psi}{dx} &= ik[|A|^2 - |B|^2] + 2k \text{Im}[AB^* e^{-2ikx}], \\ \Rightarrow J^{(-)} &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2), \\ \Rightarrow J^{(+)} &= \frac{\hbar k'}{m} |A'|^2. \end{aligned}$$

Como $J^{(-)} = J^{(+)}$

$$\frac{|B|^2}{|A|^2} + \frac{k'}{k} \frac{|A'|^2}{|A|^2} = 1; \quad \left| \frac{B}{A} \right|^2 \equiv R; \quad \frac{k'}{k} \left| \frac{A'}{A} \right|^2 \equiv T$$

R - Coef. reflexão; T - Coef. Trasmissão e $R + T = 1 \Rightarrow$ Mesmo se $E > V_0$ há reflexão!

Se $V_0 > E$,

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{se } x < 0 \\ A'e^{-Kx} + B'e^{Kx} & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

$k = \sqrt{2mE}/\hbar$ e $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

$$\begin{aligned} \psi(0^+) &= \psi(0^-) \Rightarrow A + B = A' + B' \\ \psi'(0^+) &= \psi'(0^-) \Rightarrow ik(A - B) = -K(A' - B') \end{aligned}$$

$B' = 0$ para que não haja partículas em $x \rightarrow \infty$

$$\Rightarrow \begin{cases} A + B = A' \\ ik(A - B) = -KA' \end{cases} \Rightarrow A + B = -\frac{ik}{K}A + \frac{ik}{K}B$$

ou

$$B = \frac{ik + K}{ik - K} A \quad \text{e} \quad A' = A + B = \frac{2ik}{ik - K} A$$

Então,

a) Mesmo que $E < V_0$, $A' \neq 0 \Rightarrow$ há probabilidade ($\neq 0$) da partícula ser encontrada em $x > 0$.

b) $|A|^2 = |B|^2 \Rightarrow$ há reflexão total mas como

$$B = \frac{-(K^2 - k^2) - 2ikK}{K^2 + k^2} A$$

\Rightarrow defasagem de $\varphi = \tan^{-1} \left(\frac{2Kk}{K^2 - k^2} \right)$ entre as ondas incidente e refletida. Se $x < 0$

$$\psi(x) = A [e^{ikx} + e^{i\varphi} e^{-ikx}]$$

ou $\varphi = -2\theta$ onde $\tan \theta = \frac{\sqrt{K_0^2 - k^2}}{k}$ e $K_0 \equiv \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$.

Uma vez conhecidas as autofunções do problema em todo o espaço para $E \geq V_0$ podemos analisar a dinâmica de pacotes de onda sujeitos a este potencial. Para tal devemos fazer a superposição das autofunções do problema que são escritas como

$$E < V_0 \Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} A (e^{ikx} + e^{-2i\theta(k)} e^{-ikx}) & \text{se } x < 0 \\ \frac{2ik}{ik+K} e^{-Kx} A & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

$$E > V_0 \Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} A \left[e^{ikx} + \frac{(k-k')}{(k+k')} e^{-ikx} \right] & \text{se } x < 0 \\ A e^{ikx} \frac{2k}{k+k'} & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

onde $\tan \theta = \frac{\sqrt{K_0^2 - k^2}}{k}$, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ e $K = ik'$.

Apesar de termos descrito a ideia geral para o estudo da evolução temporal de um pacote de onda neste potencial, seu desenvolvimento não será feito explicitamente neste curso.