vi) O limite clássico da equação de Schrödinger

Uma análise importante é a das consequências da equação de Schrödinger quando $\hbar \to 0$, ou seja, do seu limite clássico. Para tal, vamos começar com o seguinte "ansatz":

$$\psi\left(\mathbf{r},t\right) = A\left(\mathbf{r},t\right)\exp\frac{i}{\hbar}S\left(\mathbf{r},t\right). \quad (\mathrm{II}.2.56)$$

Substituindo a (II.2.56) na (II.2.51') temos, separando as suas partes real e imaginária,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A}$$
$$m \frac{\partial A}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}A \cdot \boldsymbol{\nabla}S + \frac{A}{2} \nabla^2 S = 0$$
(II.2.57)

Estas equações são rigorosamente equivalentes à equação de Schrödinger. De fato, podemos mostrar que a $2^{\underline{a}}$ equação em (II.2.57) nada mais é do que a equação da continuidade. Para tal, basta multiplicá-la por 2A para termos

$$2Am\frac{\partial A}{\partial t} + 2A\nabla A \cdot \nabla S + A^2 \nabla^2 S = m\frac{\partial A^2}{\partial t} + \nabla (A^2) \cdot \nabla S + A^2 \nabla^2 S$$
$$= m\frac{\partial A^2}{\partial t} + \nabla \cdot (A^2 \nabla S) = 0$$

Então, identificando $A^2 = \psi^* \psi \equiv \rho$
e $\boldsymbol{\nabla} S \equiv \mathbf{p}$ temos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

onde, obviamente, $\rho \mathbf{v} \equiv \mathbf{J} = \rho \mathbf{p}/m$ é a densidade da corrente.

A aproximação clássica consiste em tomar o limite $\hbar \rightarrow 0$ em (II.2.57), o que resulta em

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2}{2m} + V \approx 0, \quad \text{(II.2.58)}$$

que é exatamente a equação de Hamilton-Jacobi para a função principal de Hamilton, S, obtida na mecânica clássica.

Operando com $\boldsymbol{\nabla}$ à esquerda de (II.2.58) temos

$$\frac{\partial \boldsymbol{\nabla} S}{\partial t} + \frac{\left(\boldsymbol{\nabla} S \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) \boldsymbol{\nabla} S}{m} + \boldsymbol{\nabla} V \approx 0,$$

ou ainda, identificando $\mathbf{p}\equiv \boldsymbol{\nabla}S$ temos

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) \mathbf{p} + \boldsymbol{\nabla} V \approx 0$$

que quando multiplicada por ρ nos dá

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right)(\rho \mathbf{p}) - \mathbf{p} \cdot \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\rho\right) + \rho \boldsymbol{\nabla} V \approx 0. \quad (\text{II.2.59})$$

Mas sabemos que a derivada convectiva de $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ é dada por

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\rho = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho\mathbf{v}) - \rho\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}$$

Então, não havendo fontes nem sorvedouros para para o campo de velocidades \mathbf{v} (não há criação nem destruição de partículas), $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, e por (II.2.53) toda a equação acima se anula, fazendo também com que o 2º termo de (II.2.59) se anule. Assim, podemos reescrevê-la como

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right)(\rho \mathbf{p}) + \rho \boldsymbol{\nabla} V = 0,$$

que nada mais é que a equação que rege a evolução temporal da densidade de momento linear de um fluido incompressível. Quando integrada em um elemento de volume $\Delta\Omega$ temos

$$\frac{d\Delta \mathbf{p}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla}V \quad (\text{II}.2.60)$$

que é a conhecida lei de Newton para o elemento de volume considerado.

Vemos, então, que no limite $\hbar \to 0$ a mecânica quântica pode ser interpretada como uma teoria hidrodinâmica onde $m\rho$ é a densidade de massa de uma mistura estatística de partículas com densidade de momento linear $\rho \mathbf{p} = A^2 \nabla S$ regida por (II.2.60).

No caso estacionário podemos tentar uma solução $S(\mathbf{r},t)$ tal que $\partial S/\partial t = -E$ e $\partial A/\partial t = 0$. Então a (II.2.57) se transforma em

$$\frac{(\mathbf{\nabla}S)^2}{2m} + V = E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} \\ \mathbf{\nabla} \cdot (A^2 \mathbf{\nabla}S) = 0 \end{cases}$$
(II.2.61)

No limite $\hbar \to 0$ a 1^a equação acima se reduz a

$$\frac{\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^{2}}{2m} = E - V\left(\mathbf{r}\right)$$

 $\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2 = 2m\left(E - V\left(\mathbf{r}\right)\right).$

ou

Como ∇S é perpendicular à superfície $S(\mathbf{r}) =$ contante podemos determinar $S(\mathbf{r})$ através da integração de $\sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}$ ao longo de um caminho parametrizado pelo escalar u; $\mathbf{r} = \mathbf{r}(u)$, de forma que para cada caminho $\mathbf{r}(u)$ temos $d\mathbf{r}/du = \hat{n}(u)$ perpendicular à superfície $S(\mathbf{r}(u))$. Assim, podemos definir para cada caminho $\mathbf{r}(u)$ um comprimento de onda local dado por

$$\lambda = \frac{\hbar}{|\mathbf{p}|} \quad \text{ou} \quad \bar{\lambda} = \frac{\hbar}{|\mathbf{p}|} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\left(E - V\left(\mathbf{r}\right)\right)}} \quad (\text{II.2.62})$$

onde $|\mathbf{p}| = |\nabla S| = \sqrt{2m (E - V(\mathbf{r}))}$ em cada ponto da trajetória. Assim, podemos associar a estes caminhos $\mathbf{r}(u)$ as trajetórias das partículas do sistema considerado. Desta forma temos uma completa analogia com a ótica. As superfícies $S(\mathbf{r}, t) = \text{constante são as frentes de onda e as trajetórias são os raios de luz.}$



A analogia ótica é extremamente útil quando queremos analisar a validade da aproximação clássica para a equação de Schrödinger. Usando a (II.2.62) na (II.2.61) temos

$$\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2 = \frac{\hbar^2}{\bar{\lambda}^2} \left\{ 1 + \bar{\lambda}^2 \frac{\nabla^2 A}{A} \right\} \quad (\text{II.2.63})$$

Na aproximação clássica devemos ter $\bar{\lambda}^2 \frac{\nabla^2 A}{A} \ll 1,$ o que implica em

$$\left(\boldsymbol{\nabla}S\right)^2 = \frac{\hbar^2}{\bar{\lambda}^2}$$

que é a equação das frentes de onda na ótica geométrica. Esta equação, se integrada ao longo da trajetória parametrizada por u, resulta em

$$S(u) = S_0 + \int_0^u \nabla S \cdot \hat{n} du$$
$$= S_0 + \int_0^u \frac{\hbar}{\bar{\lambda}} du.$$

Desta forma, a função $A(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r}(u))$ fica univocamente determinada por (II.2.61) pois

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(A^2 \boldsymbol{\nabla} S \right) = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\nabla} \left(A^2 \right) \cdot \boldsymbol{\nabla} S + A^2 \nabla^2 S = 0,$$

ou

$$\frac{\hbar}{\bar{\lambda}}\frac{d}{du}A^2 + A^2\nabla^2 S = 0. \quad (\text{II}.2.64)$$

Como $S(u) \in \overline{\lambda}(u)$ são bem definidas sobre a trajetória considerada, podemos determinar A(u) através desta última equação. Então, conhecendo-se as soluções $S(\mathbf{r}) \in A(\mathbf{r})$ no limite $\hbar \to 0$, podemos computar as correções quânticas do 2º termo de (II.2.63).

Vamos analisar a validade da aproximação semiclássica. A analogia ótica nos leva a argumentar em favor das curvaturas das trajetórias serem bem menores que $\bar{\lambda}$.

O raio de curvatura R é tal que

$$\frac{mv^2}{R} = |(\boldsymbol{\nabla}V)_{\perp}|$$

onde $({\bf \nabla} V)_{\perp}$ é a força perpendicular à trajetória. Se que remos $\bar{\lambda}/R \ll 1$ devemos ter

$$\frac{\bar{\lambda}}{R} = \frac{\bar{\lambda}}{mv^2} \left| (\boldsymbol{\nabla} V)_{\perp} \right| \ll 1$$

mas $mv^2 = p^2/m$ e

$$\left(\boldsymbol{\nabla}\bar{\lambda}\right)_{\perp} = -\frac{\hbar}{2} \left[2m\left(E-V\right)\right]^{-3/2} \left(-2m\right) \left(\boldsymbol{\nabla}V\right)_{\perp}$$

ou ainda

$$\left(\boldsymbol{\nabla}\bar{\lambda}\right)_{\perp} = \frac{m}{\hbar^2}\bar{\lambda}^3 \left(\boldsymbol{\nabla}V\right)_{\perp}$$

Então:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\lambda}}{R} &= \frac{m\bar{\lambda}}{p^2} |(\nabla V)_{\perp}| \\ &= \frac{m\bar{\lambda}}{p^2} \frac{\hbar^2}{m\bar{\lambda}^3} |(\nabla \bar{\lambda})_{\perp}| \\ &= |(\nabla \bar{\lambda})_{\perp}| \ll 1 \end{aligned}$$

Por outro lado, $\nabla^2 S = \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\nabla} S) \cong \frac{d}{du} \left| (\boldsymbol{\nabla} S)_{\parallel} \right| \approx \hbar \frac{d}{du} \left(\frac{1}{\lambda} \right)$

Então, a (II.2.64) transforma-se em

$$\frac{\hbar}{\bar{\lambda}}\frac{d}{du}\left(A^{2}\right) + \hbar A^{2}\frac{d}{du}\left(\frac{1}{\bar{\lambda}}\right) \approx 0$$

que pode ser integrada sobre uma trajetória resultando em

$$A(u) = A(0) \sqrt{\frac{\overline{\lambda}(u)}{\overline{\lambda}(0)}}$$

Com esta forma explícita para $A\left(u\right)$ podemos calcular $\bar{\lambda}^{2}\frac{\nabla^{2}A}{A}$ como

$$\begin{split} \bar{\lambda}^2 \frac{\nabla^2 A}{A} &\approx \quad \frac{\bar{\lambda}^2}{A} \frac{d^2 A}{du^2} \\ &\approx \quad \frac{1}{4} \left\{ 2 \bar{\lambda} \frac{d^2 \bar{\lambda}}{du^2} - \left(\frac{d \bar{\lambda}}{du} \right)^2 \right\} \end{split}$$

A condição $\bar{\lambda}^2 \nabla^2 A / A \ll 1$ é obedecida quando $d\bar{\lambda}/du \ll 1$ que, na prática, implica em que todo o lado direito da equação acima seja $\ll 1$. Então, devemos ter $\left| \left(\boldsymbol{\nabla} \bar{\lambda} \right)_{\parallel} \right| \ll 1$ que junto com $\left| \left(\boldsymbol{\nabla} \bar{\lambda} \right)_{\perp} \right| \ll 1$ implica em $\left| \boldsymbol{\nabla} \bar{\lambda} \right| \ll 1$.

Esta condição nos diz que a aproximação só é válida nas regiões onde a variação de $\bar{\lambda}$ é lenta na escala de distâncias típicas do problema. Esta escala pode ser fornecida, por exemplo, pelo potencial $V(\mathbf{r})$. Veja o exemplo em 1-D abaixo.



O Método WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin)

Este método consiste em descrever o estado $\psi(\mathbf{r})$ através de uma expansão em potências de \hbar desprezando os termos $\mathcal{O}(\hbar^2)$. Isto é equivalente a usarmos a expansão semiclássica para a equação de Schrödinger em certas regiões do espaço. Entretanto, o método WKB é mais poderoso já que este procedimento pode ser estendido para regiões do espaço classicamente inacessíveis, por exemplo, regiões onde V > E. Aqui iremos tratar apenas dos problemas unidimensionais ou daqueles que possam ser trivialmente reduzidos a 1-D através de considerações sobre simetrias, etc.

Em 1-D a equação de Schrödinger independente do tempo é dada por

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

onde tentaremos a solução $\psi(x) = A(x) e^{iS(x)/\hbar}$.

Pela (II.2.61) temos, em 1-D,

$$S^{\prime 2} - 2m \left(E - V \right) = \frac{\hbar^2 A^{\prime \prime}}{A} \\ e \\ \frac{d}{dx} \left(A^2 S^{\prime} \right) = 0$$
 (II.2.65)

onde f'(x) = df/dx. A 2^a destas equações pode ser imediatamente integrada dando $A = (\text{constante}) (S')^{-1/2}$ que substituida na 1^a das equações acima nos leva a

$$S'^{2} = 2m \left(E - V\right) + \hbar^{2} \left[\frac{3}{4} \left(\frac{S''}{S'}\right)^{2} - \frac{1}{2} \frac{S'''}{S'}\right] \quad (\text{II.2.66})$$

que é equivalente à equação de Schrödinger. O método WKB consiste em resolvê-la aproximadamente, através de uma expansão em \hbar . Vamos supor que S possa ser escrito como

$$S = S_0 + S_1 \hbar^2 + S_2 \hbar^4 + \dots$$

Substituindo esta expressão em (II.2.66) e mantendo apenas o termo independente de \hbar temos

$$S'^2 \approx S'^2_0 = 2m [E - V(x)]$$
 (II.2.67)

de onde podemos calcular $S_{0}\left(x\right)$ em dois casos específicos

 $1^{\underline{0}}$ caso) E > V(x)

Aqui, definindo

$$\bar{\lambda}(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}} = \frac{1}{k(x)}$$

e integrando a (II.2.67) temos

$$S_{0}(x) = \pm \int_{x_{0}}^{x} \frac{dx'}{\overline{\lambda}(x')}$$
$$= \pm \int_{x_{0}}^{x} dx' k(x')$$

Usando este resultado e a expansão obtida para A(x) temos

$$\psi(x) = (\text{const.})\sqrt{\overline{\lambda}(x)} \exp \pm i \int_{x_0}^x dx' \frac{1}{\overline{\lambda}(x')}$$
$$= (\text{const.})\sqrt{\frac{1}{k(x)}} \exp \pm i \int_{x_0}^x dx' k(x') \quad (\text{II.2.68})$$

 $2^{\underline{0}}$ caso) E < V(x).

Aqui, definindo

$$l\left(x\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\left(V\left(x\right) - E\right)}} = \frac{1}{K\left(x\right)}$$

e integrando a (II.2.67) temos

$$S_{0}(x) = \pm i \int_{x_{0}}^{x} \frac{dx'}{l(x')}$$
$$= \pm i \int_{x_{0}}^{x} dx' K(x')$$

Usando este resultado e a expansão obtida para A(x) temos

$$\psi(x) = (\text{const.})\sqrt{l(x)} \exp \pm \int_{x_0}^x dx' \frac{1}{l(x')}$$
$$= (\text{const.})\sqrt{\frac{1}{K(x)}} \exp \pm \int_{x_0}^x dx' K(x') \quad (\text{II.2.69})$$

Condições de validade do método WKB

A expansão $S = S_0 + \hbar^2 S_1 + \dots$ não é uma expansão convergente mas sim assintótica, ou seja, representa a função a ser expandida se tomarmos um número conveniente de termos quando $\hbar \to 0$.

Se quisermos discutir a validade desta expansão precisamos levar em conta a correção $\mathcal{O}(\hbar)$, ou seja, o termo $\hbar^2 S_1$. Se substituirmos $S = S_0 + \hbar^2 S_1$ em (II.2.66) temos até $\mathcal{O}(\hbar^2)$

$$2S'_0S'_1 = \frac{3}{4} \left(\frac{S''_0}{S'_0}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{S'''_0}{S'_0}$$

Quando $E > V(x), S'_0 = \pm \hbar/\bar{\lambda}(x)$, que levada expressão acima resulta em

$$\hbar S_1 = \pm \left(\frac{\bar{\lambda}'}{4} - \frac{1}{8} \int \frac{\bar{\lambda}'^2}{\bar{\lambda}} dx'\right)$$

Quando E < V(x), o resultado será diferente do anterior na troca $\overline{\lambda}(x) \leftrightarrow l(x)$.

Para que $\hbar S_1 \ll 1$ devemos ter

$$\overline{\lambda}'(x) \ll 1$$
 se $E > V(x)$
 $l'(x) \ll 1$ se $E < V(x)$

Em termos do potencial V(x) estas condições podem ser reduzidas a

$$\frac{m\hbar V'(x)}{\left|2m\left(E-V\left(x\right)\right)\right|^{3/2}} \ll 1$$

e, portanto, o método WKB só é válido para altas energias ou potenciais com variação espacial muito lenta na escala de $\bar{\lambda}$ ou l. Mesmo assim não podemos nos aproximar muito dos pontos de retorno clássico onde V = E.

Fórmulas de conexão

As expressões (II.2.68 e 69) nos fornecem a forma das soluções $\psi(x)$ nas regiões classicamente acessíveis ou não como

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{k(x)}} \exp i \int_{x_0}^x k(x') \, dx' + \frac{B}{\sqrt{k(x)}} \exp -i \int_{x_0}^x k(x') \, dx' & \text{se } E > V(x) \\ \frac{C}{\sqrt{K(x)}} \exp \int_{x_0}^x K(x') \, dx' + \frac{D}{\sqrt{K(x)}} \exp - \int_{x_0}^x K(x') \, dx' & \text{se } E < V(x) \end{cases}$$
(II.2.70)

Em um problema de potenciais seccionalmente constantes, o que nos permitiria relacionar $A, B, C \in D$ seriam as condições de continuidade de $\psi(x) \in \psi'(x)$ nas descontinuidades do potencial. Entretanto, no presente caso, isto não é mais possível, haja vista que a uma dada energia E a condição de continuidade de $\psi(x) \in \psi'(x)$ deveria ser aplicada no ponto de retorno clássico, o que implicaria na divergência de $\psi(x)$ pois em (II.2.70) k(a) = K(a) = 0 (a é o ponto de retorno clássico).

A maneira de resolver esse problema consiste no abandono do método WKB (temporariamente) porque, como vimos antes, esta aproximação não é válida na vizinhança de E = V(a). Nesta região devemos estudar explicitamente as soluções da equação de Schrödinger perto de x = a. Para tal, vamos considerar o potencial abaixo



Na vizinhança de x = a o potencial V(x) pode ser escrito como

$$V(x) = V(a) + V'(a)(x - a)$$

e, portanto

$$\begin{cases} k(x) = \frac{\sqrt{-2mV'(a)(x-a)}}{\hbar} & (x < a) \\ K(x) = \frac{\sqrt{2mV'(a)(x-a)}}{\hbar} & (a < x) \end{cases}$$
(II.2.71)

onde usamos que V(a) = E.

Existem duas maneiras de se obter as fórmulas de conexão. A 1ª, como mencionamos acima, consiste na resolução de equação de Schrödinger linearizada que nos fornece as soluções nas regiões classicamante acessível (x < a) ou inacessível (x > a). Em seguida, tomamos os limites $x \to \pm \infty$ de $\psi(x)$ a fim de estudar o seu comportamento assintótico e, então, compará-los às formas WKB de (II.2.70). A idéia por trás desse método é que existe uma superposição entre as regiões de validade da aproximação WKB e da linear para o potencia V(x) (ver as regiões linearizadas na figura acima).

Entretanto, esta mesma superposição nos permite adotar um 2^{0} método, bem mais simples, para a obtenção das fórmulas de conexão. Na região onde os dois métodos são válidos podemos escrever, à direita de x = a,

$$\psi_{II}(x) = \frac{D}{\sqrt{\alpha} (x-a)^{1/4}} \exp{-\int_{a}^{x} \alpha (x'-a)^{1/2} dx'} + \frac{C}{\sqrt{\alpha} (x-a)^{1/4}} \exp{\int_{a}^{x} \alpha (x'-a)^{1/2} dx'} \quad (\text{II.2.72})$$
onde $\alpha \equiv \frac{\sqrt{2mV'(a)}}{\pi}$.

Obviamente, impondo que $\psi_{II}(\infty) = 0$ temos C = 0. Mas, não podemos esquecer a possibilidade de potenciais do tipo barreira onde $C \neq 0$. Vamos, então, tratar os dois problemas separadamente; o 1º onde $D \neq 0$ e C = 0 e o segundo onde D = 0 e $C \neq 0$.

A integral no expoente da (II.2.72) é trivialmente solúvel e nos dá

$$\int_{a}^{x} (x'-a)^{1/2} dx' = \frac{2}{3} (x-a)^{3/2}$$

Então a (II.2.72) pode ser reescrita como (para C = 0)

$$\psi_{II}(x) = \frac{D}{\sqrt{\alpha} (x-a)^{1/4}} \exp{-\frac{2\alpha}{3} (x-a)^{3/2}}$$

que só é válida em uma região $x - a \approx \rho$ como na figura abaixo. Se encararmos $\psi_{II}(x)$ como a restrição ao eixo real de uma função de variável complexa $\psi(z)$ podemos dizer que a sua fórmula só é válida em um anel de raio ρ centrado em z = a.



Se quisermos obter a forma de $\psi(z)$ para x < a basta fazer o prolongamento analítico de $\psi(z)$ pelo interior do anel da figura acima. Para tal, devemos escrever $z - a = \rho e^{i\varphi}$ e variar φ de 0 até π mantendo ρ = constante. Assim evitamos a singularidade em x = a. Temos então

$$\psi\left(z\right) = \frac{D}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}e^{i\varphi/4}} \exp\left(-\frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2}\left[\cos\frac{3\varphi}{2} + i\sin\frac{3\alpha}{2}\right] \quad (\text{II.2.73})$$

Variando φ através do semi-círculo superior temos ($\varphi = \pi$)

$$\psi(x < a) = \frac{D}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}e^{i\pi/4}} \exp \frac{2\alpha}{3}i\rho^{3/2} \\ = \frac{D}{\sqrt{\alpha}|x-a|^{1/4}} \exp i\left[\frac{2\alpha}{3}|x-a|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right]$$

Variando φ através do semi-círculo inferior temos ($\varphi = -\pi$)

$$\begin{split} \psi \left(x < a \right) &= \frac{D}{\sqrt{\alpha} \rho^{1/4} e^{-i\pi/4}} \exp{-\frac{2\alpha}{3} i \rho^{3/2}} \\ &= \frac{D}{\sqrt{\alpha} \left| x - a \right|^{1/4}} \exp{-i \left[\frac{2\alpha}{3} \left| x - a \right|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right]} \end{split}$$

O fato de termos dois resultados diferentes para ψ (x < a) é consequência de (II.2.72) ser uma forma aproximada. Se tivéssemos usado a forma exata de $\psi_{II}(x)$ os dois prolongamentos dariam o mesmo resultado. A forma de $\psi_{II}(x)$ na aproximação WKB nos faz perder a contribuição da exponencial complexa negativa (positiva) quando usamos o semi-círculo superior (inferior). Assim podemos dizer que

$$\begin{split} \psi\left(x < a\right) &= \psi_{I}\left(x\right) = \frac{A}{\sqrt{\alpha}\left(a - x\right)^{1/4}} \exp{-\frac{2i\alpha}{3}\left(a - x\right)^{3/2}} + \frac{B}{\sqrt{\alpha}\left(a - x\right)^{1/4}} \exp{\frac{2i\alpha}{3}\left(a - x\right)^{3/2}} \\ &= \frac{A}{\sqrt{\alpha}\left|x - a\right|^{1/4}} \exp{-\frac{2i\alpha}{3}\left|x - a\right|^{3/2}} + \frac{B}{\sqrt{\alpha}\left|x - a\right|^{1/4}} \exp{\frac{2i\alpha}{3}\left|x - a\right|^{3/2}} \end{split}$$

que, se comparada à expressão anterior, nos dá $A=De^{i\pi/4}$ e $B=De^{-i\pi/4}$

$$\Rightarrow \psi_{1}(x) = \frac{2D}{\sqrt{\alpha}|x-a|^{1/4}} \cos\left[\frac{2\alpha}{3}|x-a|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right]$$
$$= \frac{2D}{|k(x)|^{1/2}} \cos\left[\left|\int_{a}^{x} k(x') dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right]$$
$$\downarrow$$
$$\frac{1}{\sqrt{K(x)}} \exp\left[-\int_{a}^{x} K(x') dx'\right] \leftrightarrow \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_{x}^{a} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right] \quad (\text{II.2.74})$$

A fórmula de conexão para a exponencial crescente pode também ser obtida a partir da exponencial decrescente. Vamos considerar

$$\psi\left(z\right) = \frac{C}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}e^{i\varphi/4}} \exp\left(-\frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2}\left[\cos\frac{3\varphi}{2} + i\sin\frac{3\varphi}{2}\right] \quad (\text{II.2.75})$$

Fazendo $\varphi = 2\pi$ temos

$$\psi_1(z) = -\frac{iC}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}} \exp \frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2}$$

enquanto que se $\varphi = -2\pi$ temos

$$\psi_2\left(z\right) = \frac{iC}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}} \exp\frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2}$$

ou seja, ao retornarmos à região x > a por dois caminhos distintos $\varphi \in [0, 2\pi]$ ou $\varphi \in [0, -2\pi]$ obtemos a exponencial crescente multiplicada por $\pm i$. Portanto, para obter as fórmulas de conexão com as exponenciais crescentes vamos retornar a x < a variando, agora, φ de 2π a 3π ou -2π a -3π . Fazendo $\varphi = \pm 3\pi$ em (II.2.75) temos

$$\begin{split} \psi \left(\varphi = 3\pi \right) &= \frac{C}{\sqrt{\alpha} \rho^{1/4} e^{i3\pi/4}} \exp{-\frac{2\alpha}{3} i \rho^{3/2}} \\ \psi \left(\varphi = -3\pi \right) &= \frac{C}{\sqrt{\alpha} \rho^{1/4} e^{-i3\pi/4}} \exp{\frac{2\alpha}{3} i \rho^{3/2}} \end{split}$$

Assim

$$\begin{array}{rcl} -\frac{iC}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}}\exp\frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2} & \rightarrow & \frac{C}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}e^{i\pi}e^{-i\pi/4}}\exp-\frac{2i\alpha}{3}\rho^{3/2}\\ \frac{iC}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}}\exp\frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2} & \rightarrow & \frac{C}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}e^{-i\pi}e^{i\pi/4}}\exp\frac{2i\alpha}{3}\rho^{3/2} \end{array}$$

subtraindo a 1ª da 2ª

$$\frac{C}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}}\exp\frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2} \to -\frac{C}{\sqrt{\alpha}\rho^{1/4}}\sin\left[\frac{2\alpha}{3}\rho^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right]$$

Então

ou

$$\frac{1}{\sqrt{|K(x)|}} \exp\left|\int_{a}^{x} K(x') \, dx'\right| \leftrightarrow -\frac{1}{\sqrt{|k(x)|}} \sin\left[\left|\int_{a}^{x} k(x') \, dx'\right| - \frac{\pi}{4}\right]$$

$$\frac{1}{\sqrt{K(x)}} \exp \int_{a}^{x} K(x') \, dx' \leftrightarrow -\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin \left[\int_{x}^{a} k(x') \, dx' - \frac{\pi}{4} \right] \quad (\text{II.2.76})$$

No caso da região classicamente inacessível estar à esquerda do ponto de retorno clássico \underline{b} teremos (II.2.74 e 76)

$$\frac{1}{\sqrt{K(x)}} \exp -\int_{x}^{b} K(x') dx' \quad \leftrightarrow \quad \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[\int_{b}^{x} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right] \quad (\text{II.2.74'})$$
$$\frac{1}{\sqrt{K(x)}} \exp \int_{x}^{b} K(x') dx' \quad \leftrightarrow \quad -\frac{1}{\sqrt{k(x)}} \sin \left[\int_{b}^{x} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right] \quad (\text{II.2.76'})$$

Exemplo

i) Estados ligados

Consideremos os estados ligados do potencial da figura abaixo paraE<0



Como sabemos, à esquerda de x = b, a função de onda é uma exponencial crescente (com x crescente em módulo). Então

$$\psi_{I}(x) = \frac{C}{\sqrt{K(x)}} \exp{-\int_{x}^{b} K(x') dx'}$$

onde

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

A (II.2.74') nos diz que

$$\psi_{II}(x) \approx \frac{2C}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int\limits_{b}^{x} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right]$$

onde

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

ou ainda

$$\psi_{II}(x) = \frac{2C}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_{b}^{a} k(x') dx' - \int_{x}^{a} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right]$$

$$= \frac{2C}{\sqrt{k(x)}} \left\{ \cos\int_{b}^{a} k(x') dx' \cos\left[\int_{x}^{a} k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right] + \sin\int_{b}^{a} k(x') dx' \sin\left[\int_{x}^{a} k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right] \right\}$$

$$= \frac{2C}{\sqrt{k(x)}} \left\{ -\cos\int_{b}^{a} k(x') dx' \sin\left[\int_{x}^{a} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right] + \sin\int_{b}^{a} k(x') dx' \cos\left[\int_{x}^{a} k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right] \right\}$$

Como apenas o 2º termo pode gerar uma exponencial descrescente à direita de x = a (vide (II.2.74)) devemos ter o 1º termo nulo, o que implica em

$$\cos \int_{a}^{b} k(x) dx = 0$$
$$\int_{a}^{b} k(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

ou

Se multiplicarmos este resultado por \hbar temos

$$\int_{a}^{b} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{h}{2}$$

ou

$$2\int_{a}^{b} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)h$$

Lembrando que $2\int_{a}^{b} p(x) dx$ é a ação ao longo do período de uma órbita fechada em V(x) podemos escrever

$$J \equiv \oint p(x) \, dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) h$$

que é a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld.

No caso do oscilador harmônico, esta aproximação semiclássica coincide com o resultado exato. Neste caso, $V\left(x\right)=\frac{1}{2}m\omega^{2}x^{2}$ e

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right)}$$

e os pontos \underline{a} e \underline{b} são dados por

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = E \Rightarrow x = \pm x_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

Assim, a regra de quantização acima se reduz a

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2} \, dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

ou ainda

$$\frac{2E}{\hbar\omega} \int_{\underbrace{-1}}^{1} \sqrt{1-y^2} dy = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$$

onde $y \equiv x/x_0$.

Finalmente temos $E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ como esperado.

ii) Transmissão através de uma barreira.

Consideremos um potencial da forma



cujo coeficiente de transmissão queremos calcular.

Assumindo que não haja incidência da direita temos

$$\psi(x) = \begin{cases} A \exp -iI_1 + B \exp iI_1 & \text{se } x < a \\ C \exp -I_2 + D \exp I_2 & \text{se } a < x < b \\ F \exp iI_4 & \text{se } x > b \end{cases}$$

onde $A \equiv \frac{\tilde{A}}{\sqrt{k(x)}}, B \equiv \frac{\tilde{B}}{\sqrt{k(x)}}, C \equiv \frac{\tilde{C}}{\sqrt{K(x)}}, D \equiv \frac{\tilde{D}}{\sqrt{K(x)}} \in F \equiv \frac{\tilde{F}}{\sqrt{k(x)}},$ e ainda $I_1 \equiv \int_x^a k(x') dx', I_2 \equiv \int_a^x K(x') dx', I_3 \equiv \int_x^b K(x') dx' \in I_4 \equiv \int_b^x k(x') dx'.$

Se $x < a \ {\rm temos}$

$$\psi_I(x) = (A+B)\cos I_1 - i(A+B)\sin I_1$$

Usando que

$$\cos I_1 = \cos\left(I_1 - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{4}\right)$$
$$= \frac{\sqrt{2}}{2}\cos\left(I_1 - \frac{\pi}{4}\right) - \sin\left(I_1 - \frac{\pi}{4}\right)\frac{\sqrt{2}}{2}$$

e, analogamente

$$\sin I_1 = \sin \left(I_1 - \frac{\pi}{4} \right) \frac{\sqrt{2}}{2} + \cos \left(I_1 - \frac{\pi}{4} \right) \frac{\sqrt{2}}{2}$$

teremos (x < a)

$$\psi_I(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left[(A+B) - i (A-B) \right] \cos\left(I_1 - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{\sqrt{2}}{2} \left[(A+B) + i (A-B) \right] \sin\left(I_1 - \frac{\pi}{4}\right)$$

Então, pelas fórmulas de conexão temos

$$\widetilde{C} = \frac{\sqrt{2}}{4} \left[\left(\widetilde{A} + \widetilde{B} \right) - i \left(\widetilde{A} - \widetilde{B} \right) \right]$$

$$\widetilde{D} = \frac{\sqrt{2}}{2} \left[\left(\widetilde{A} + \widetilde{B} \right) + i \left(\widetilde{A} - \widetilde{B} \right) \right] \quad (\text{II.2.77})$$

Por outro lado, a fim de relacionar $\widetilde{C} \in \widetilde{D}$ com \widetilde{F} devemos reescrever $\psi(x)$ para a < x < b como

$$\psi_{II}(x) = C \exp{-\theta} \exp{I_3} + D \exp{\theta} \exp{-I_3}$$

onde $\theta \equiv \int_{a}^{b} K(x') dx'$, enquanto que se x > b podemos proceder de forma análoga ao que fizemos para x < a e teremos

$$\psi_{III}(x) = \frac{F\sqrt{2}}{2}(1+i)\cos\left(I_4 - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{F\sqrt{2}}{2}(1-i)\sin\left(I_4 - \frac{\pi}{4}\right)$$

que, com o auxílio das fórmulas de conexão e de $\psi_{II}(x)$ escrita da forma acima nos leva a

$$\widetilde{C}e^{-\theta} = \frac{\widetilde{F}\sqrt{2}}{2}\left[1-i\right]$$

е

$$\widetilde{D}e^{\theta} = \frac{\widetilde{F}\sqrt{2}}{4} \left[1+i\right]$$

Substituindo os valores de \tilde{C} e \tilde{D} na (II.2.77) podemos relacionar \tilde{A} , \tilde{B} e \tilde{F} . Como o coeficiente de transmissão é dado por

$$T = \frac{\left|\psi_{III}\right|^2}{\left|\psi_{I}^{(inc)}\right|^2} \frac{k_{III}}{k_I} = \frac{F^2}{\widetilde{A}^2}$$

devemos eliminar \widetilde{B} e obter \widetilde{F}^2 em função de \widetilde{A}^2 . Na equação acima $\psi_I^{(inc)}(x)$ é a parte da função de onda que incide sobre a barreira, $k_I = \lim_{x \to -\infty} k_I(x)$ e $k_{III} = \lim_{x \to \infty} k_{III}(x)$.

Uma simples manipulação algébrica nos leva, no limite em que $e^{-2\theta} \ll 1,$ a

$$T \approx e^{-2\theta} = e^{-2\int\limits_{a}^{b} K(x')dx'}$$

Assim vemos que no limite semiclássico o coeficiente de transmissão é uma exponencial de uma ação complexa $(p(x) \rightarrow ip(x))$ debaixo da barreira de potencial.

Dentro da aproximação WKB podemos resolver qualquer problema de dinâmica de pacotes de onda, assim como fizemos para os problemas de potenciais seccionalmente constantes. A única diferença é que no presente caso, os auto estados são calculados aproximadamente via as fórmulas de conexão.

Novamente devemos enfatizar que estas soluções são boas aproximações das soluções exatas quando $\lambda(x)$ é muito pequeno se comparado às variações espaciais do potencial em questão.