6. SOLUÇÕES DA EQ DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

6.1 POTENCIAL NULO

* Partícula livre $\Rightarrow V = cte$. Por simplicidade, podemos fazer $V = 0$.

A EQSCH indep do tempo é dada por

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

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

* se $E<0$, podemos definir

$$k = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \rightsquigarrow k \text{ é real}$$

de forma que

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = k^2\psi(x)$$

As sols são

$$\psi(x) = e^{kx} \quad \text{e} \quad \psi(x) = e^{-kx}$$

$e^{kx} \to \infty$ se $x \to \infty$, e não é uma "boa" solução.

$e^{-kx} \to \infty$ se $x \to -\infty$, e não é uma "boa" solução.

Conclusão: E não pode ser negativo.

* se $E > 0$, definimos

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

de forma que

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

As sols são

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad \text{e} \quad \psi(x) = e^{-ikx}$$

Essas sols não tendem a infinito e vamos considerá-las aqui:

* As funções de onda são

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\Psi(x,t) = e^{i(-kx-\omega t)}$$

Lembre-se que $e^{-iEt/\hbar} = e^{-i\omega t}$

* A parte real de $\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$ é $\cos(kx-\omega t)$. Os nós dessa função ocorrem para

$$kx_n - \omega t = (n+\tfrac{1}{2})\pi$$

$$\Rightarrow x_n = (n+\tfrac{1}{2})\frac{\pi}{k} + \frac{\omega}{k}t$$

Portanto, essa função representa uma onda viajando para a direita com velocidade (de fase) $v_f = \omega/k$.

Se tivéssemos tomado a crista em vez de um nó, ou a parte imaginária em vez da parte real, chegaríamos à mesma conclusão: a fase da onda viaja para a direita com velocidade $v_f = \omega/k$.

* Analogamente,

$$\Psi(x,t) = e^{i(-kx-\omega t)}$$

representa uma onda viajando para a esquerda com velocidade de fase $v_f = -\omega/k$.

* Valor esperado de p.

Considere $\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)}$

onde A é uma cte de normalização.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik\,\Psi$$

de forma que

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\, dx = \hbar k \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi\, dx$$

Como

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi\, dx = 1,$$

$$\bar{p} = \hbar k = \sqrt{2mE} \quad \rightarrow$$ note que não foi necessário calcular A.

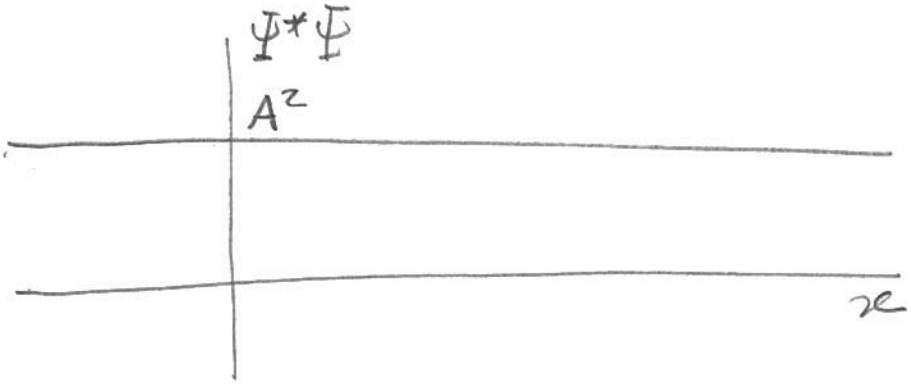
Como p é bem definido, o valor esperado é o próprio valor de p.

$p > 0 \Rightarrow$ partícula viajando para a direita.

* Por outro lado,

$$P(x) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = A^2$$

ou seja, a densidade de probabilidade de encontrar a partícula independe de x.



* Sabemos exatamente o momento ($p = \hbar k$), de forma que

$$\Delta p = 0$$

Não sabemos nada sobre a posição da partícula, de forma que

$$\Delta x = \infty$$

* se tivéssemos considerado

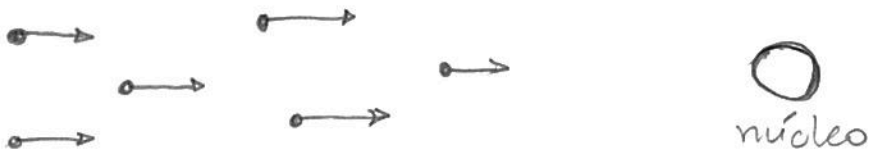
$$\Psi(x,t) = e^{i(-kx - \omega t)},$$

obteríamos $\overline{p} = -\sqrt{2mE}$ e o mesmo $P(x)$.

* Um exemplo de problema onde uma função de onda da forma

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)}$$

poderia ser usada é o de um feixe monoenergético de prótons incidindo sobre um núcleo pesado em repouso.



Não sabemos onde o próton está, mas conhecemos sua energia, momento e velocidade.

* Uma sol geral da EQSCH independente do tempo seria uma combinação do tipo

$$\psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

Nesse caso,

$$\frac{d\psi}{dx} = ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx})$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) = -k^2\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \boxed{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

Nesse caso conhecemos a energia exatamente, mas não o momento.

* Há uma dificuldade de normalizar a função de onda

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)}.$$

$$P(x) = A^2 \quad \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} P(x)\,dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \to \infty$$

Muitas vezes, como no cálculo de $\bar{p}$ acima, essa normalização pode ser evitada.

* Outra possibilidade é adotar a "Normalização em uma caixa" de comprimento L. Supõe-se que a partícula está entre $-\frac{L}{2}$ e $\frac{L}{2}$, de forma que

$$A^2 \int_{-L/2}^{L/2} dx = A^2 L = 1 \quad \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

L seria, por exemplo, uma distância típica do experimento.
No caso do feixe de prótons, seria a distância que os prótons viajam no laboratório: distância entre a fonte e o detetor.

* Revisitando o pacote de ondas.

Como vimos no Cap 3, uma descrição razoável de uma partícula livre viajando em 1D é dada por um pacote de ondas. Vamos revisitar o problema considerando o pacote (ou grupo) de ondas complexas

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, \exp\{i[kx - \omega(k)t]\}$$

Agora $A(k)$ pode ser complexo.

Se $A(k) \neq 0$ somente nas vizinhanças de $k = k_0$,

$$\omega(k) \simeq \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} (k - k_0)$$

$$\equiv \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)(k - k_0)$$

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp\{i[(k - k_0 + k_0)x - \omega_0 t - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)(k - k_0)t]\}$$

$$= \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \times \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp\{i(k - k_0)\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)t\right]\} dk$$

Como

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp\{i(k - k_0)\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)t\right]\} dk \equiv g\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)t\right]$$

→ Ver cap 3.

$$\Psi(x,t) = \underbrace{g\left[x - \left(\frac{dw}{dk}\right)t\right]}_{\text{envelope}} \underbrace{\exp\left[i(k_0 x - \omega t)\right]}_{\text{onda plana}}$$

O envelope viaja com velocidade (de grupo)

$$v_g = \left(\frac{dw}{dk}\right)_{k=k_0}$$

* Considere uma partícula sujeita a um potencial $V(x,t)$. Uma "conciliação" entre as descrições clássica e quântica é fornecida pelo Teorema de Ehrenfest, que vamos demonstrar em seguida.

(1) A posição clássica da partícula pode ser associada ao valor esperado

$$\bar{x} = \int \Psi^* x \Psi \, dx \quad \rightarrow \text{Integral sem limite é } \int_{-\infty}^{\infty} \ldots dx$$

A sua velocidade pode ser associada a

$$\frac{d}{dt}\bar{x} = \int \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi \, dx$$

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

complexo conjugado da Eq acima $\leftarrow$

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

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \int \Psi^* x \left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{iV}{\hbar}\Psi\right] dx + \left[-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{iV}{\hbar}\Psi^*\right] x \Psi \, dx$$

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int\left[\Psi^* x \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right]dx$$

Vamos integrar o 2º termo por partes duas vezes:

(i) $$\frac{\partial}{\partial x}\left(x\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} + x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = x\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}dx$$

como $\Psi \to 0$ se $x \to \infty$ ou $x \to -\infty$, o termo do meio é zero.

(ii) $$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\Psi^*\right] = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi)\Psi^* + \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}dx = \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi)\Psi^*\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi)dx$$

Novamente, $\Psi^* \to 0$ se $x \to \infty$ ou $x \to -\infty$, de forma que o termo do meio é zero.

De (i) e (ii),

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = +\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial}{\partial x^2}(x\Psi)dx$$

e

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left[x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi)\right]dx$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = x\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\Psi) = x\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} = x\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + 2\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

Assim

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\, dx$$

ou $$\boxed{\frac{d\bar{x}}{dt} = \frac{\bar{p}}{m}}$$

que é o análogo da relação clássica

$$p = m\frac{dx}{dt} = mv$$

(2) De forma semelhante, pode-se mostrar que (não farei)

$$\boxed{\frac{d\bar{p}}{dt} = -\overline{\frac{\partial V}{\partial x}}}$$

que é o análogo da 2ª Lei de Newton

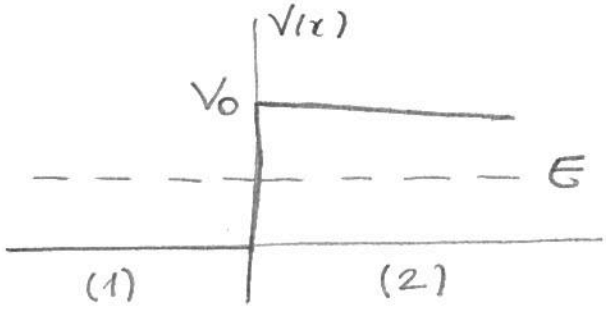
$$\boxed{\frac{dp}{dt} = F}$$

A segunda lei de Newton é válida para os valores esperados. No limite macroscópico, as flutuações em torno da média são

desprezíveis e a barra que indica valor esperado não se faz necessária. A segunda Lei de Newton pode ser obtida a partir da Equação de Schrödinger no limite de sistemas macroscópicos.

6.3 O POTENCIAL DEGRAU ($E < V_0$)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$



* Região classicamente proibida.

Na região 2, $K = E - V_0 < 0$.

Como $K = \frac{1}{2}mv^2$ não poder ser negativo, a partícula não pode estar nessa região.

* Solução da EQSCH indep tempo

(1) Região 1

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1 \quad \rightarrow \quad V = 0 \text{ nessa região}$$

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1$$

Definindo $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$,

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = -k_1^2\psi_1$$

cuja sol geral é

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$$

(2) Região 2

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + V_0\psi_2 = E\psi_2$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi_2}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi_2$$

Definindo

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar},$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = k^2\psi_2$$

cuja sol geral é

$$\psi_2(x) = Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x}$$

* Exigências para as autofunções e condições de contorno.

(1) $e^{k_2 x} \to \infty$ se $x \to \infty$, logo esta não é uma boa solução na região 2.

Portanto, $C = 0$, e

$$\psi_2(x) = De^{-k_2 x}$$

(2) $\psi(x)$ deve ser contínua em $x = 0$.

Assim

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \Rightarrow A + B = D \quad (1)$$

(2) $\frac{d\psi}{dx}$ deve ser contínua em $x=0$

$$\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}$$

$$\frac{d\psi_1}{dx} = ik_1(Ae^{ik_1x} - Be^{-ik_1x})$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = -k_2 D e^{-k_2x}$$

$$\Rightarrow ik_1(A-B) = -k_2 D$$

$$\Rightarrow A - B = \frac{ik_2}{k_1} D \qquad (2)$$

$$(1)+(2) \Rightarrow A = \frac{D}{2}\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)$$

$$(1)-(2) \Rightarrow B = \frac{D}{2}\left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right)$$

→ veja que $A^* = B$

A sol da EQSCH indep tempo é

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2}\left(1 + i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{ik_1x} + \frac{D}{2}\left(1 - i\frac{k_2}{k_1}\right)e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ D\, e^{-k_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

A cte D poderia ser calculada impondo-se a normalização de $\psi(x)$, mas para a maioria das aplicações isso não é necessário.

e^{ik_1x} descreve uma partícula se deslocando para a direita (onda incidente).

e^{-ik_1x} descreve uma partícula se deslocando para a esquerda (onda refletida).

* considerando que

$$e^{ik_1x} = \cos k_1x + i\,\text{sen}\,k_1x$$

$$e^{-ik_1x} = \cos k_1x - i\,\text{sen}\,k_1x$$

$\psi(x)$ pode ser escrita como

$$\psi(x) = \begin{cases} D\cos k_1x - D\frac{k_2}{k_1}\,\text{sen}\,k_1x & x \leq 0 \\ D e^{-k_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Vemos que para $x \leq 0$ temos ondas estacionárias, pois as localizações dos nós não dependem do tempo.

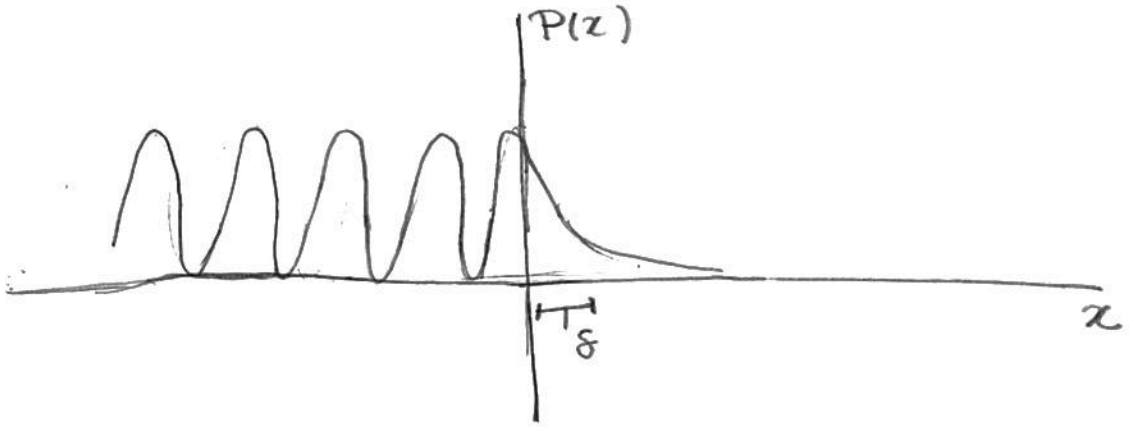
↳ Os nós são dados por $\text{tg}\,k_1x = \frac{k_1}{k_2}$

* $P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$

$$= D^2\left\{\cos^2 k_1x - \frac{k_2}{k_1}\,\text{sen}\,k_1x\right\}^2 \qquad x \leq 0$$

↳ é uma função oscilatória positiva (ou zero)

$$P(x) = \psi^*(x)\,\psi(x) = D^2e^{-2k_2x} \qquad \text{para} \quad x \geq 0$$



* Penetração na região classicamente proibida (um efeito puramente quântico)

seja $$\delta = \frac{1}{k_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

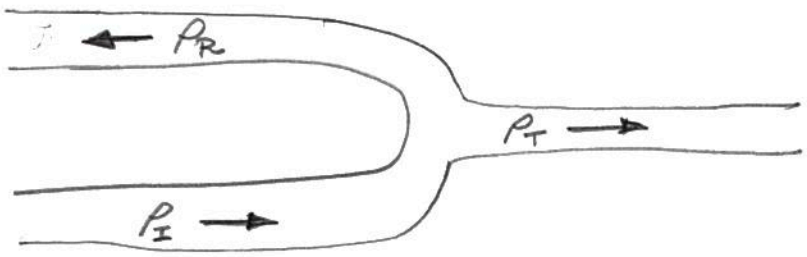
$$\psi_2(\delta) = D e^{-k_2 \delta} = D e^{-1} \Rightarrow \psi_2(\delta) = \frac{1}{e}\psi_2(0)$$

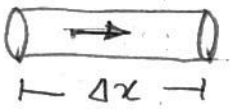
$$P(\delta) = \frac{1}{e^2} P(0) \sim 0{,}135\, P(0)$$

δ dá uma ideia de quanto a partícula penetra na região classicamente proibida. Quanto maior k_2 (maior a diferença $V_0 - E$), menos a partícula pode penetrar na região 2.

δ é chamado distância de penetração.

* Fluxo de massa em um fluido compressível





$$\Delta m = \rho A \Delta x$$

$$\frac{\Delta m}{\Delta t} = \rho A \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad \Rightarrow \quad \frac{dm}{dt} = \rho A v$$

O coeficiente de transmissão é definido como

$$T = \frac{(dm/dt)_T}{(dm/dt)_I}$$

Supondo que A é o mesmo nos três tubos

$$T = \frac{\rho_T v_T}{\rho_I v_I}$$

Analogamente, o coeficiente de reflexão é definido como

$$R = \frac{(dm/dt)_R}{(dm/dt)_I} \quad \Rightarrow \quad R = \frac{\rho_R v_R}{\rho_I v_I}$$

* Na mecânica quântica, vamos fazer a analogia

$$\rho_I \rightarrow \psi_I^* \psi_I$$

$$\rho_T \rightarrow \psi_T^* \psi_T$$

$$\rho_R \rightarrow \psi_R^* \psi_R$$

* Voltando ao potencial degrau ($E < V_0$)

$$v_I = v_R = v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$v_T = 0$ pq a onda não propaga no lado 2

$$R = \frac{\psi_R^* \psi_R \cancel{v_1}}{\psi_I^* \psi_I \cancel{v_1}} = \frac{B^* B}{A^* A} = 1$$

note (pg 13) que $B^* = A$ e $A^* = B$

Por sua vez, $T = 0$.

A partícula é sempre refletida

* Ex 6.1. Distância de penetração para uma partícula esférica de poeira com: $R = 10^{-6}\,m$, $\rho = 10^4\,kg/m^3$, $v = 10^{-2}\,m/s$ e $V_0 = 2K$.

Sol.

$$m = \frac{4\pi}{3} R^3 \rho = 4 \times 10^{-14}\,kg$$

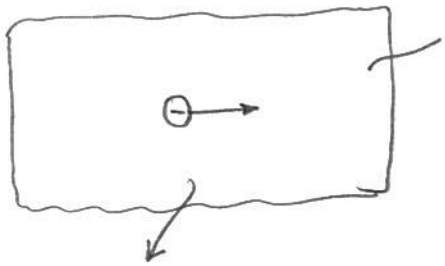
$$K = \frac{1}{2} m v^2 = 2 \times 10^{-18} J$$

$$V_0 - E = 2K - K = K = 2 \times 10^{-18} J$$

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2mK}} \simeq 2 \times 10^{-19} m.$$

δ é muito menor que o raio típico do núcleo atômico (a penetração na região classicamente proibida é desprezível). A partícula se comporta classicamente.

* Ex. 6.2 Elétron de condução em um bloco de cobre.



fora $V = V_0$

$E < V_0$ e $V_0 - E \sim 4\,eV$ ← energia necessária para remover o elétron do bloco

dentro, $V = 0$

$$m = 9{,}1 \times 10^{-31} kg$$

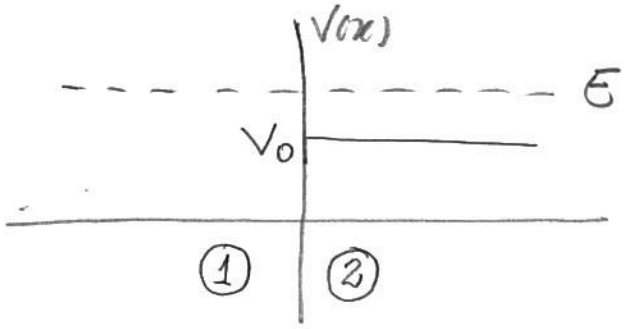
$$V_0 - E \sim 4\,eV \sim 6 \times 10^{-19} J$$

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \sim 10^{-10} m$$

δ é da ordem do tamanho de um átomo. A partícula se comporta quanticamente.

6.4 POTENCIAL DEGRAU ($E > V_0$)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$



* Na região 1,

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$$

onde $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

* Na região 2,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi$$

Definindo $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$, → note que $k_1 > k_2$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k_2^2\psi$$

$$\Rightarrow \psi_2(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x}$$

* $De^{-ik_2 x}$ descreveria uma partícula viajando para a esquerda na região 2, o que não tem significado físico. Assim, vamos fazer $D = 0$. Os outros termos representam:

Ae^{ik_1x} → onda incidente

Be^{-ik_1x} → onda refletida

Ce^{ik_2x} → onda transmitida.

* Continuidade de $\psi(x)$ em $x=0$:

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$$

$$\Rightarrow A + B = C \qquad (3)$$

* Continuidade de $\frac{d\psi(x)}{dx}$ em $x=0$:

$$\frac{d\psi_1}{dx} = ik_1(Ae^{ik_1x} - Be^{-ik_1x})$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = ik_2 Ce^{ik_2x}$$

$$\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0} \Rightarrow k_1(A-B) = k_2C$$

$$\Rightarrow A - B = \frac{k_2}{k_1}C \qquad (4)$$

$$(3)+(4) \Rightarrow 2A = \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)C$$

$$\boxed{C = \frac{2k_1}{k_1+k_2}A}$$ → Aqui convém expressar B e C em termos de A.

De (3), $\boxed{B = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}A}$

A autofunção é dada por

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + A \dfrac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} & x \leq 0 \\ A \dfrac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} & x \geq 0 \end{cases}$$

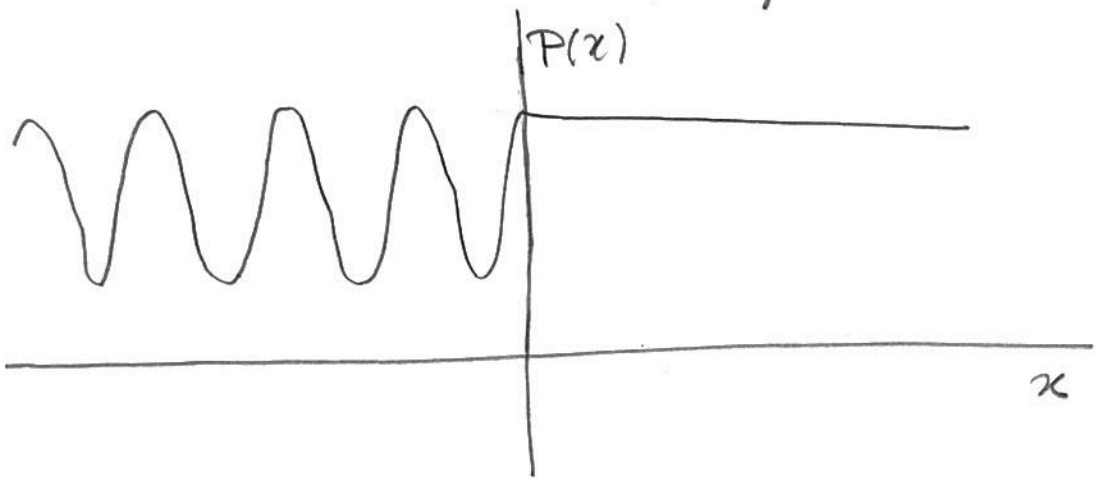
* Densidade de probabilidade:

P/ $x \leq 0$

$P(x) = \psi_1^*(x)\,\psi_1(x)$ → é uma função senoidal de x.

P/ $x \geq 0$

$$P(x) = \psi_2^*(x)\,\psi_2(x) = \frac{4k_1^2}{(k_1+k_2)^2} A^2$$ → não depende de x.



* Coeficiente de reflexão

$$R = \frac{B^* B \, v_1}{A^* A \, v_1} \Rightarrow \boxed{R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2}$$

lembre-se que $v_R = v_I = v_1$

* É interessante expressar R em termos de V_0 e E.

$$R = \left(\frac{1 - k_2/k_1}{1 + k_2/k_1}\right)^2$$

Mas

$$\frac{k_2}{k_1} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}$$ → definições na pg 19

Assim

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2$$

→ classicamente, não poderia haver reflexão para $E > V_0$.

* Coeficiente de transmissão.

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \Rightarrow \quad \frac{v_2}{v_1} = \frac{k_2}{k_1}$$

$$v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

$$T = \frac{\psi_T^* \psi_T \, v_2}{\psi_I^* \psi_I \, v_1} = \frac{C^* C}{A^* A} \frac{k_2}{k_1}$$

$$= \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 \frac{k_2}{k_1}$$

$$T = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Note que $R + T = 1$

* Agora podemos reunir os resultados das duas seções e fazer gráficos de R e T em função de E/V_0.

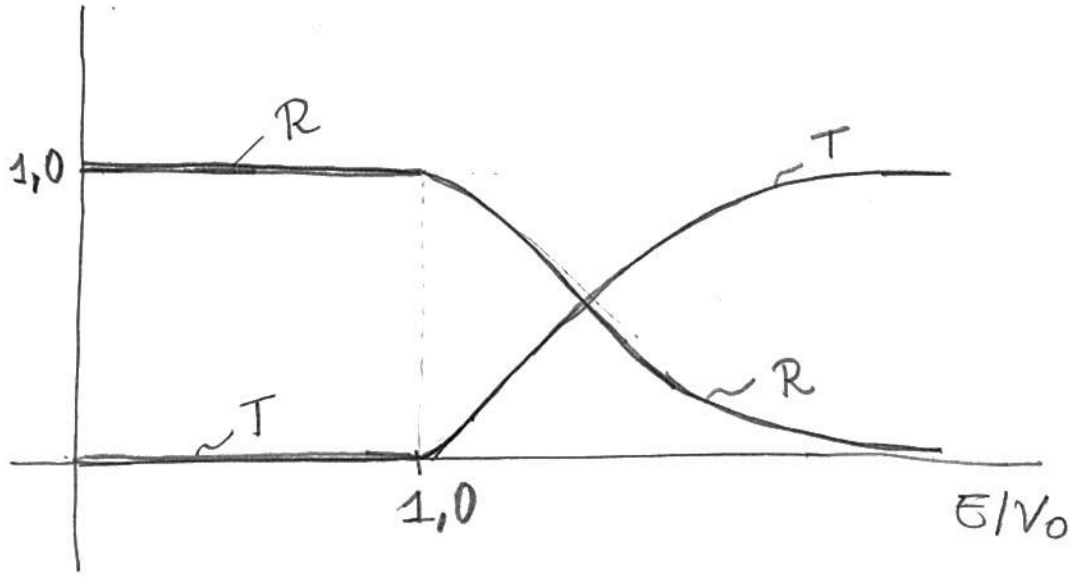
(1) se $E/V_0 < 1$, $R = 1$ e $T = 0$.

(2) se $E/V_0 > 1$, R é dado pela Eq. acima.

$E/V_0 \to \infty \Rightarrow V_0/E \to 0 \Rightarrow \sqrt{1 - V_0/E} \to 1$

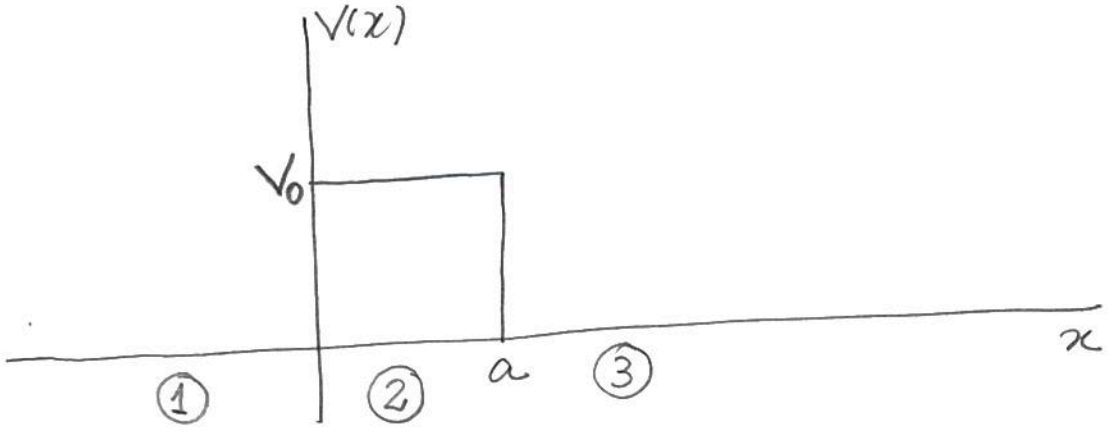
$\Rightarrow R \to 0$

Como $R + T = 1$, $T \to 1$.



6.5 BARREIRA DE POTENCIAL

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0 \quad \text{ou} \quad x > a \end{cases}$$



CASO $E < V_0$.

(1) Nas regiões 1 e 3,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

Definindo $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k_1^2 \psi$$

$$\psi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \qquad x \leq 0$$

$$\psi_3(x) = C e^{ik_1 x} + D e^{-ik_1 x} \qquad x \geq a$$

Mas $De^{-ik_1 x}$ representaria uma partícula indo para a esquerda na região 3, e portanto deve ser descartada. Assim

$$\psi_3(x) = C e^{ik_1 x} \qquad x \geq a$$

Na região 2,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi$$

Definindo $k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = k_2^2 \psi$$

$$\psi_2(x) = F e^{-k_2 x} + G e^{k_2 x}$$

* $\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$

$$A + B = F + G \qquad (5)$$

* $\psi_2(x=a) = \psi_3(x=a)$

$$F e^{-k_2 a} + G e^{k_2 a} = C e^{i k_1 a} \qquad (6)$$

Derivadas:

$$\frac{d\psi_1}{dx} = i k_1 (A e^{i k_1 x} - B e^{-i k_1 x})$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = k_2 (G e^{k_2 x} - F e^{-k_2 x})$$

$$\frac{d\psi_3}{dx} = i k_1 C e^{i k_1 x}$$

* $\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}$

$$i k_1 (A - B) = k_2 (G - F) \qquad (7)$$

* $\left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a}$

$$k_2 (G e^{k_2 a} - F e^{-k_2 a}) = i k_1 C e^{i k_1 a} \qquad (8)$$

Temos 4 eqs [(5)–(8)] que permitem escrever B, C, F e G em termos de A. Os cálculos são bastante extensos, e o que nos interessa aqui é a relação entre C e A. Pode-se mostrar (não vou fazer as contas) que

$$C = \left[1 + \frac{\operatorname{senh}^2 k_2 a}{\frac{4E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1/2}$$

de forma que o coeficiente de transmissão é

$$T = \frac{C^* C \, \vartheta_3}{A^* A \, \vartheta_1} = \left[1 + \frac{\operatorname{senh}^2 k_2 a}{\frac{4E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1}$$

Note que $\vartheta_1 = \vartheta_3 = \hbar k_1 / m$.

A partir de T, podemos calcular o coeficiente de reflexão como

$$R = 1 - T$$

* Densidade de probabilidade

(1) Na região 1, $\psi(x)$ é oscilatória e $P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$ é oscilatória.

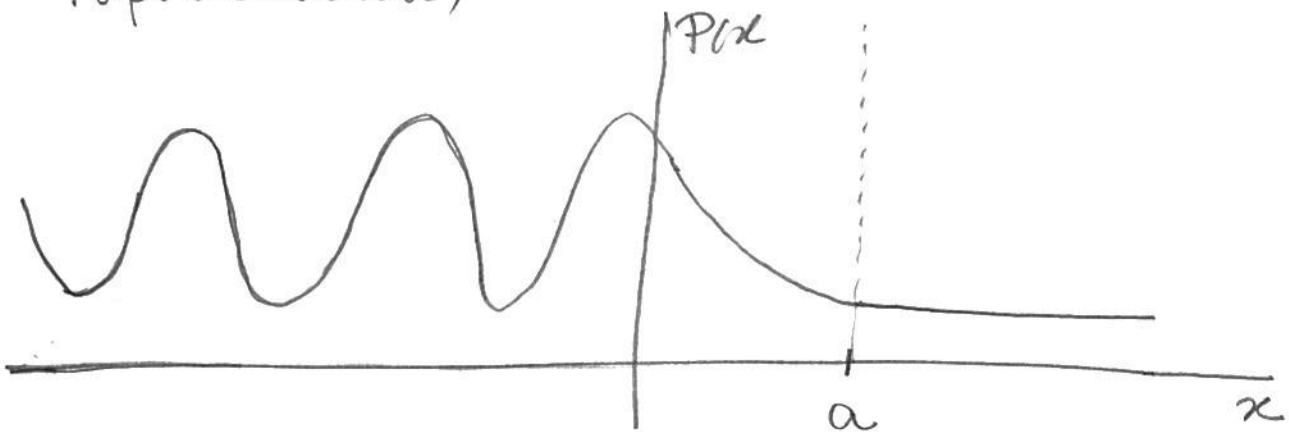
(2) Na região 2, $P(x)$ combina exponenciais crescente e decrescente, com predominância decrescente.

(3) Na região 3,

$$P(x) = \psi_3^*(x)\psi_3(x) = C^* C$$

que é cte (não depende de x)

Tipicamente,



* Caso especial: $k_2 a \gg 1$

$$\operatorname{senh} k_2 a = \frac{e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}}{2} \sim \frac{e^{k_2 a}}{2}$$

O 2º termo no [ ] em T é $\gg 1$.

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_2 a}$$

que é muito pequeno (a exp fica pequena).

* Note (da definição da pg 24) que se m, V_0 e E forem grandes, k_2 será grande. Se a também for grande, T é pequeno.

O limite clássico corresponde a m, V_0, E e a grandes. Nesse limite o coeficiente de transmissão é desprezível.

CASO $E > V_0$.

Na região 2, $\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi$

Agora definimos

$$k'_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

→ o livro chama de k_3, mas achei que isso confundiria com região 3.

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k'^2_2\,\psi$$

$$\psi_2(x) = Fe^{ik'_2x} + Ge^{-ik'_2x}$$

As sols nas regiões 1 e 3, continuam sendo

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\psi_3(x) = Ce^{ik_1x}$$

* $\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0)$

$$A + B = F + G \qquad (9)$$

* $\psi_2(x=a) = \psi_3(x=a)$

$$Fe^{ik'_2a} + Ge^{-ik'_2a} = Ce^{ik_1a} \qquad (10)$$

Derivadas:

$$\frac{d\psi_2}{dx} = ik'_2(Fe^{ik'_2x} - Ge^{-ik'_2x})$$

$\frac{d\psi_1}{dx}$ e $\frac{d\psi_3}{dx}$ não mudaram (ver pag 25)

$$* \left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}$$

$$k_1(A-B) = k_2'(F-G) \qquad (11)$$

$$* \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a}$$

$$k_2'(Fe^{ik_2'a} - Ge^{-ik_2'a}) = k_1 C e^{ik_1 a} \qquad (12)$$

Resolvendo as eqs (9)-(12) e calculando C/A, pode-se calcular T:

$$T = \frac{C^*C \cancel{\psi_3}}{A^*A \cancel{\psi_1}} = \left[1 + \frac{\operatorname{sen}^2 k_2' a}{\frac{4E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}\right]^{-1}$$

Em resumo, trocamos $k_2 \to ik_2'$ de forma que $\operatorname{senh} k_2 a \to \operatorname{sen} k_2' a$

Note que, neste caso, o coeficiente de transmissão tem um caráter oscilatório. Imagine que podemos fazer E crescer a partir do valor inicial $E = V_0$, de forma que k_2' também cresce. Toda vez que tivermos

$$k_2' a = n\pi \qquad n = 1, 2, \cdots$$

teremos

$$\operatorname{sen} k_2' a = 0 \quad \Rightarrow \quad T = 1.$$

Nesse caso, temos

$$a = \frac{n}{2}\,\frac{2\pi}{k_2'} = n\,\frac{\lambda_2'}{2}$$

A largura da barreira corresponde a um número inteiro de meios comprimentos de onda (dentro da barreira).

Para essas energias ($n = 1, 2, \ldots$) a transmissão ocorre com probabilidade igual a 1.

* Classicamente, $T = 1$ para $E > V_0$. Se $E > V_0$, a partícula não pode ser refletida.

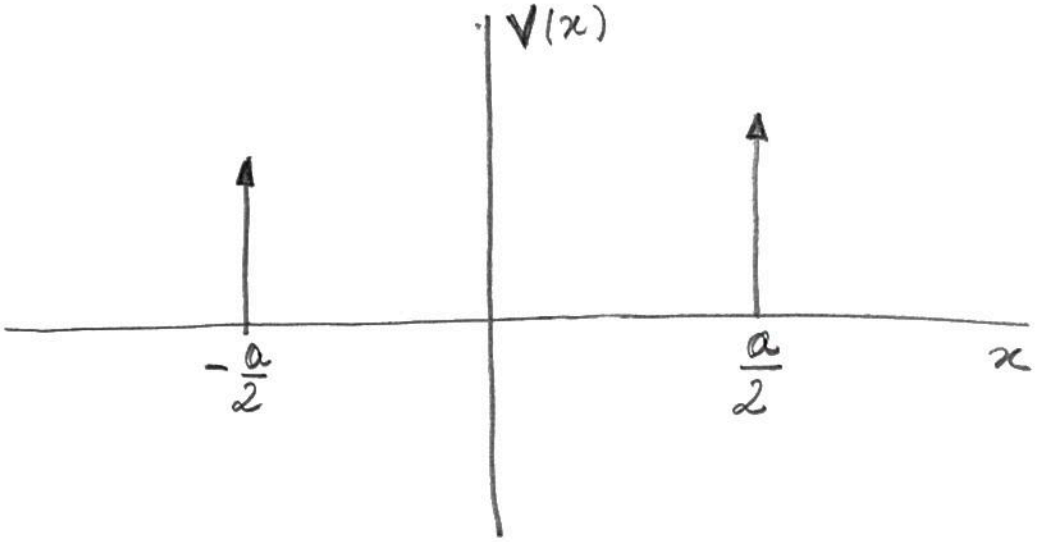
* Veja um exemplo numérico no livro (Ex. 6.4). Veja o gráfico.

* O resultado obtido nesta seção tem uma analogia direta com a transmissão (ou reflexão) da luz em películas finas. Pense nisso!

* Leia a seção **6.5** no livro: Ela contém exemplos físicos que se comportam como barreiras de potencial (não quadradas).

6.8 POÇO DE POTENCIAL QUADRADO INFINITO (partícula em uma caixa 1D)

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



Como $V = \infty$ fora da caixa, a partícula tem que estar dentro da caixa, de forma que

$$\psi(x) = 0 \qquad \text{fora da caixa } \left(x < -\frac{a}{2} \text{ ou } x > \frac{a}{2}\right)$$

Dentro da caixa

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \implies \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k_1^2\psi$$

A sol geral tem a forma

$$\psi(x) = A\,\mathrm{sen}\,kx + B\cos kx$$

* ψ também poderia ser escrito como combinação de exp complexas, como nas ~~seções~~ anteiores. Obteríamos o mesmo resultado final, com mais trabalho. Em geral é conveniente usar exp complexas para partículas não ligadas e seno e cosseno para partículas ligadas.

* $\psi(x)$ deve ser contínua em $x = \frac{a}{2}$.

$$A\,\mathrm{sen}\left(\frac{ka}{2}\right) + B\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \qquad (13)$$

* $\psi(x)$ deve ser contínua em $x = -\frac{a}{2}$

$$A\,\mathrm{sen}\left(-\frac{ka}{2}\right) + B\cos\left(-\frac{ka}{2}\right) = 0$$

$$\Rightarrow -A\,\mathrm{sen}\left(\frac{ka}{2}\right) + B\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \qquad (14)$$

$$(8)+(9) \Rightarrow \quad B\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \qquad (15)$$

$$(8)-(9) \Rightarrow \quad A\,\mathrm{sen}\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \qquad (16)$$

* Este é um daqueles problemas onde $d\psi/dx$ não é contínua. Da EQSCH

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

Vemos que, se $V=\infty$, $d^2\psi/dx^2=\infty$ e $d\psi/dx$ não é contínua.

No nosso problema, $d\psi/dx$ não é contínua em $x=\pm a/2$.

* Em princípio, parece que podemos resolver as Eqs (15) e (16) para obter A e B, de forma que não sobraria uma cte (indeterminada) para normalização. Mas, isso é um engano. Não é possível satisfazer (15) e (16) sem fazer A ou B nulo:

$\operatorname{sen}\left(\frac{ka}{2}\right)$ e $\cos\left(\frac{ka}{2}\right)$ não podem ser ambos nulos.

Como fazer $A=B=0$ não faz sentido, restam duas possibilidades:

(1) $A=0$ e $\cos\left(\frac{ka}{2}\right)=0$

$\Rightarrow ka = n\pi \qquad n=1,3,5,\cdots$

$$k=\frac{n\pi}{a}$$

$\psi_n(x) = B_n \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ n ímpar

$B_n \rightarrow$ cte de normalização.

(2) $B = 0$ e $\operatorname{sen}\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$

$\Rightarrow ka = n\pi \qquad n = 2, 4, 6, \ldots$

$k = \frac{n\pi}{a}$ → mesma fórmula, mas aqui n é par.

$\psi_n(x) = A_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \qquad n$ par

$A_n \rightarrow$ cte de normalização.

* Energia.

Em ambos os casos (n par e n ímpar)

$$k = \frac{n\pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

$n = 1, 2, 3, 4, \ldots$

A energia é quantizada: somente alguns valores de energia (discretos) são permitidos.

Note que a quantização da energia aparece pq impuzemos que $\psi(x)$ é contínua em $x = \pm a/2$.

* Por que não podemos ter $n = 0$, e consequentemente $E = 0$?

(1) Pq teríamos

$\psi_0(x) = A_0 \operatorname{sen}(0 \cdot x) = 0$ → o que não faz sentido.

(2) Também porque:

$n=0 \Rightarrow p=0 \Rightarrow \Delta p=0$ → se sabemos o momento, a incerteza é zero.

Mas $\Delta x = a$ (a partícula está na caixa)

$\Delta p \Delta x = 0$, o que viola o pcp da incerteza.

* Como n não pode ser zero, o estado fundamental corresponde a $n=1$.

Para este estado,

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow p_1 = \pm\sqrt{2mE_1} = \pm\frac{\pi\hbar}{a}$$

$+ \longrightarrow$ partícula p/ direita

$- \longrightarrow$ " p/ esquerda

Grosseiramente,

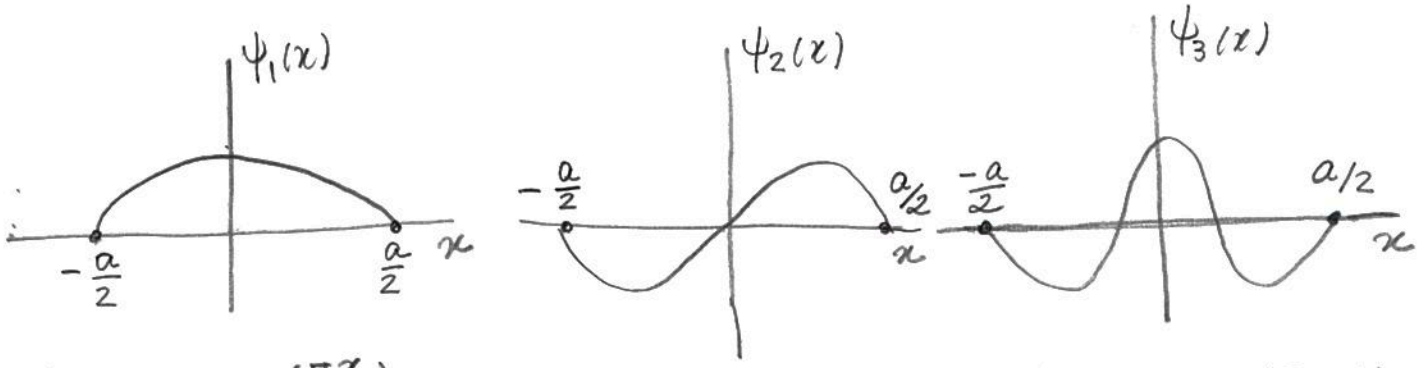
$$\Delta p \sim 2\frac{\pi\hbar}{a}$$

$$\Delta p \Delta x = \frac{2\pi\hbar}{a} \cdot a = 2\pi\hbar > \frac{\hbar}{2}$$ → de acordo com o pcp da incerteza

Cálculos mais precisos de Δx e Δp foram feitos no Ex. 5.10. Volte lá!

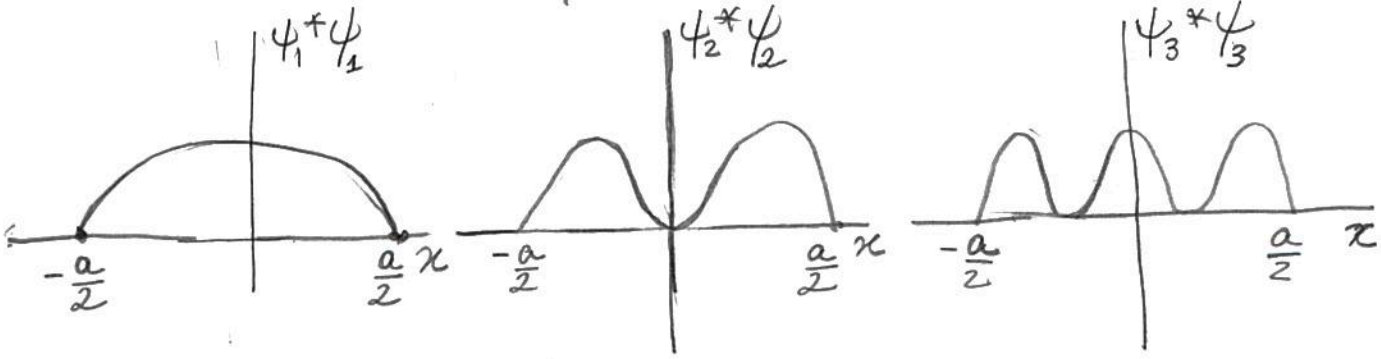
* A menor energia possível para um sistema ligado (que não é zero) é chamada energia de ponto zero. No poço infinito, a energia de ponto zero é $E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$.

* Autofunções



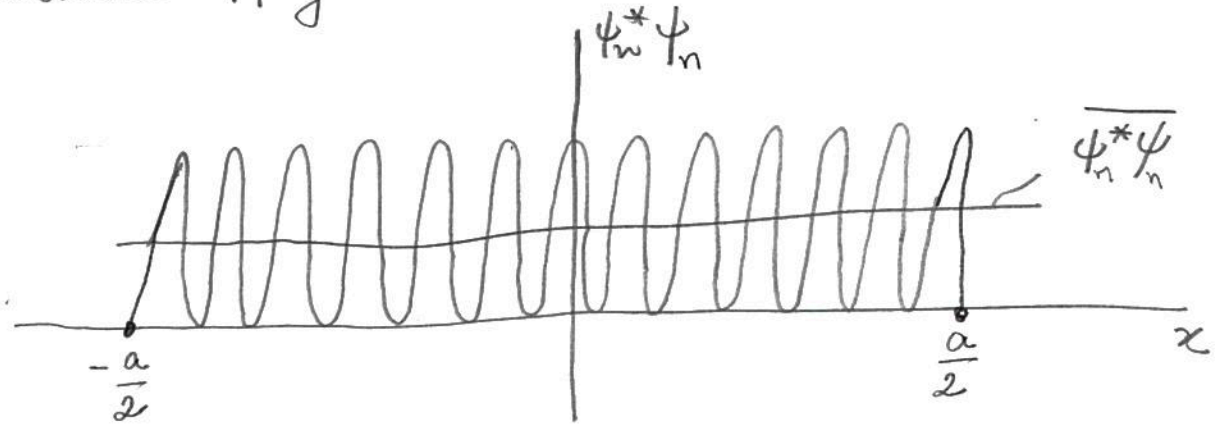
$\psi_1 = B_1 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ $\psi_2 = A_2 \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ $\psi_3 = B_3 \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$

* Densidades de probabilidade



O número quântico n é igual ao número de picos da densidade de probabilidade.

* Limite n grande



se n for muito grande, os picos ficam tão próximos que não é possível distinguí-los. Pode-se ver apenas um comportamento médio de $P(x)$.

* Simetria.

Quando $V(x)$ possui alguma simetria, qualquer grandeza fisicamente mensurável deve expressar essa simetria. Para o poço de potencial desta seção,

$$V(-x) = V(x).$$

Dessa forma, a densidade de probabilidade $P(x)$ deve ter a mesma simetria:

$$P(-x) = P(x)$$

Portanto, as autofunções devem ter simetria par ou ímpar:

$\psi(-x) = \psi(x)$ função par

$\psi(-x) = -\psi(x)$ função ímpar

As soluções obtidas pertencem a uma dessas simetrias.

$\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ função par

$\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ função ímpar

Uma combinação do tipo

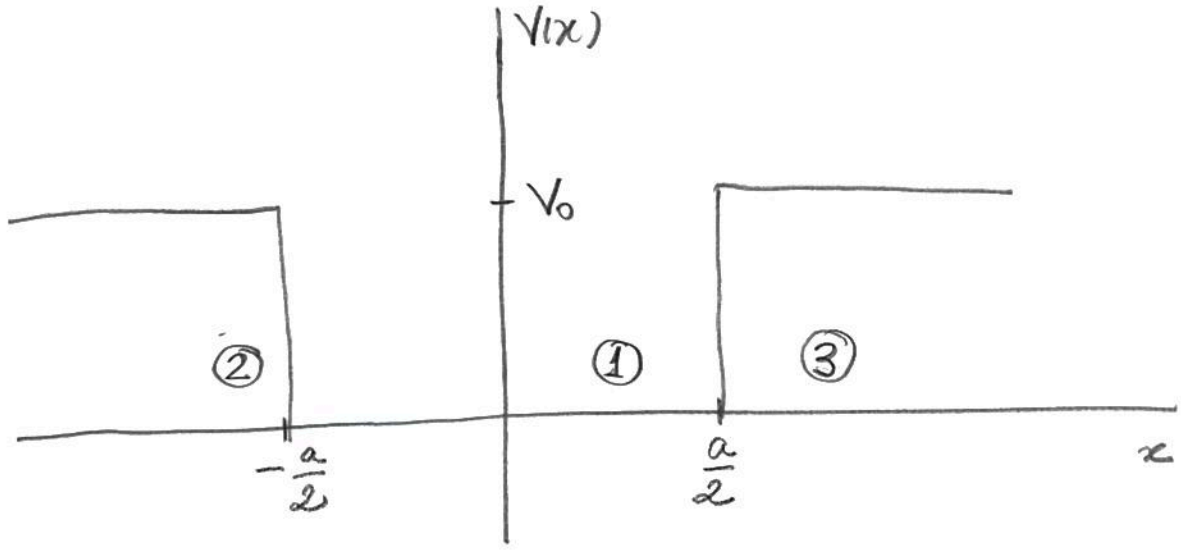
$A \cos kx + B \operatorname{sen} kx$

não é par nem ímpar, e não é...

uma solução aceitável. Poderíamos ter usado esse argumento para considerar as soluções $\operatorname{sen} kx$ e $\cos kx$ separadamente desde o início. Teremos oportunidade de fazer isso na próxima seção.

6.7 POÇO DE POTENCIAL QUADRADO FINITO ($E < V_0$)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } x < -\frac{a}{2} \text{ ou } x > \frac{a}{2} \\ 0 & \text{se } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \end{cases}$$



* Na região 1, temos

$$\psi_1(x) = A \operatorname{sen} k_1 x + B \cos k_1 x \qquad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$$

onde $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

* Na região 2, temos

$$\psi_2(x) = C e^{k_2 x} \qquad x < -\frac{a}{2}$$

onde $k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ → Vamos supor que $V_0 > E$.

Note que $e^{-k_2 x} \to \infty$ quando $x \to -\infty$, e portanto, não é uma "boa solução" na região 2 ($x < -\frac{a}{2}$).

* Na região 3, temos

$$\psi_3(x) = G e^{-k_2 x} \qquad x > \frac{a}{2}$$

Note que $e^{k_2 x} \to \infty$ quando $x \to \infty$, e portanto, não é uma solução aceitável na região 3 ($x > \frac{a}{2}$).

* O problema de se encontrar as constantes A, B, C e G e os possíveis valores da energia pode ser simplificado enormemente se notarmos que $V(x) = V(-x)$, de forma que as autofunções têm que ter simetria par ou ímpar. Assim, temos dois tipos de solução que podem ser tratadas separadamente.

* AUTOFUNÇÕES PARES.

$A = 0 \quad e \quad G = C$

$\psi_1(x) = B \cos k_1 x \qquad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$

$\psi_2(x) = C e^{k_2 x} \qquad x < -\frac{a}{2}$

$\psi_3(x) = C e^{-k_2 x} \qquad x > \frac{a}{2}$

* $\psi_1(x = -\frac{a}{2}) = \psi_2(x = -\frac{a}{2})$

$$B \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = C e^{-k_2 a/2} \qquad (17)$$

* $\psi_1(x = \frac{a}{2}) = \psi_3(x = \frac{a}{2})$

$B \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = C e^{-k_2 a/2}$ → é a mesma eq anterior.

Veja que a imposição que $\psi(-x) = \psi(x)$ implica que a condição de continuidade em $x = -a/2$ leva à mesma equação que a condição de continuidade em $x = a/2$.

Derivadas:

$$\frac{d\psi_1}{dx} = -k_1 B \operatorname{sen}(k_1 x)$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = k_2 C e^{k_2 x}, \qquad \frac{d\psi_3}{dx} = -k_2 C e^{-k_2 x}$$

* $\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=-a/2} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=-a/2}$

$$k_1 B \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = k_2 C e^{-k_2 a/2} \qquad (18)$$

* $\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=a/2} = \left(\frac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a/2}$

leva de novo à Eq (18).

Pode parecer que, a partir das Eqs (17) e (18), podemos calcular as constantes B e C, de forma que não temos uma constante de normalização. Mas não é assim. Essas Eqs só podem ser satisfeitas simultaneamente para certos valores de energia (levando à quantização). Nesse caso, só podemos expressar uma cte em termos da outra.

* Dividindo (18) por (17), obtemos

$$k_1 \operatorname{tg}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = k_2 \qquad (19)$$

Multiplicando por $a/2$, temos uma eq. adimensional

$$\frac{k_1 a}{2} \operatorname{tg}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = \frac{k_2 a}{2}$$

Substituindo k_1 e k_2 (pg 38 e 39), temos

$$\sqrt{mEa^2/2\hbar^2}\ \operatorname{tg}\sqrt{mEa^2/2\hbar^2} = \sqrt{m(V_0-E)a^2/2\hbar^2}$$

Definindo

$$\varepsilon = \sqrt{mEa^2/2\hbar^2}$$

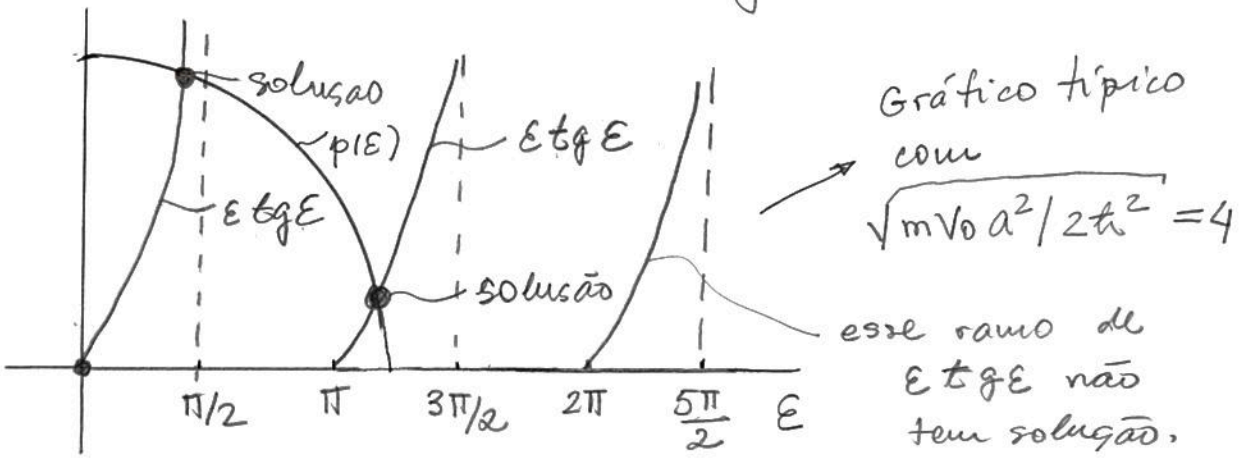
$$p(\varepsilon) = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \varepsilon^2}$$

temos

$$\varepsilon \operatorname{tg}\varepsilon = p(\varepsilon) \qquad (20)$$

Note que $p(\varepsilon)$ é uma função quarto de círculo de raio $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$. Tanto ε quanto $p(\varepsilon)$ são positivos

* Podemos obter as soluções da Eq (20) graficamente. Desenhamos em um mesmo gráfico as funções $\varepsilon\operatorname{tg}\varepsilon$ e $p(\varepsilon)$ e identificamos as sols na figura.



* O número de soluções depende do valor de $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$. No gráfico acima, o valor é 4 e temos 2 soluções pares: $\varepsilon_1 < \frac{\pi}{2}$ e $\pi < \varepsilon_2 < \frac{3\pi}{2}$.

Veja que quanto maior for V_0 (mais fundo for o poço), mais soluções são possíveis.

Cada valor de ε que é uma solução possível, corresponde a uma energia possível (quantização da energia).

* Expressando C em termos de B, da Eq. (17), podemos escrever a autofunção em termos de uma única constante (a ctte de normalização).

$$\psi_1(x) = B \cos k_1 x \qquad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$$

$$\psi_2(x) = B e^{k_2 a/2} \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{k_2 x} \qquad x < -\frac{a}{2}$$

$$\psi_3(x) = B e^{k_2 a/2} \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) e^{-k_2 x} \qquad x > \frac{a}{2}$$

* A mesma relação entre C e B poderia ser obtida da Eq (18) com o auxílio da Eq (19).

* AUTOFUNÇÕES ÍMPARES

$B = 0 \quad e \quad G = -C$

$$\psi_1(x) = A \operatorname{sen} k_1 x \qquad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$$

$$\psi_2(x) = C e^{k_2 x} \qquad x < -\frac{a}{2}$$

$$\psi_3(x) = -C e^{-k_2 x} \qquad x > \frac{a}{2}$$

* $\psi_1(x = -\frac{a}{2}) = \psi_2(x = -\frac{a}{2})$

$$-A \operatorname{sen}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = C e^{-k_2 a/2} \qquad (21)$$

Derivadas

$$\frac{d\psi_1}{dx} = k_1 A \cos k_1 x$$

$$\frac{d\psi_2}{dx} = k_2 C e^{k_2 x}$$

* $\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=-a/2} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=-a/2}$

$$k_1 A \cos\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = k_2 C e^{-k_2 a/2} \qquad (22)$$

* As Eqs obtidas da continuidade de ψ e sua derivada em $x = a/2$ são repetições das Eqs (21) e (22).

$$(22) \div (21) \Rightarrow k_1 \operatorname{cotg}\left(\frac{k_1 a}{2}\right) = -k_2 \qquad (23)$$

Seguindo o caminho do início da pg 42, obtemos

$$-\varepsilon \cot g \varepsilon = p(\varepsilon)$$

O gráfico indicando as soluções é mostrado abaixo

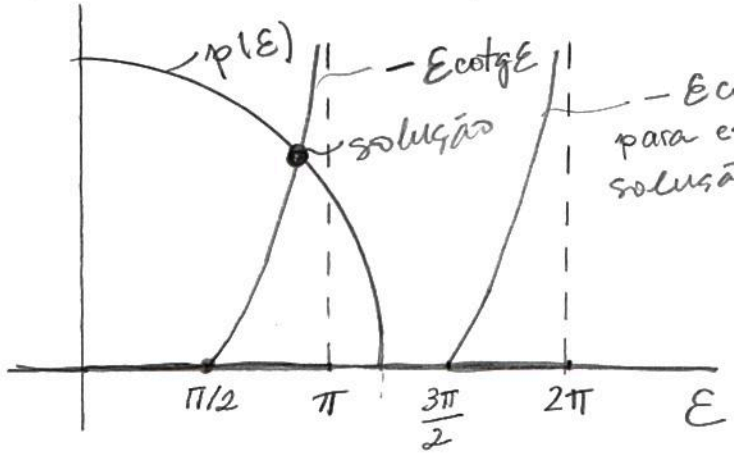


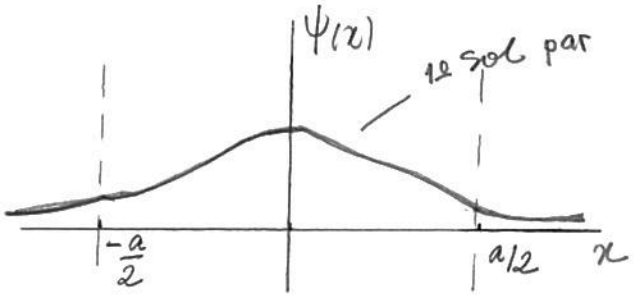
Gráfico típico com

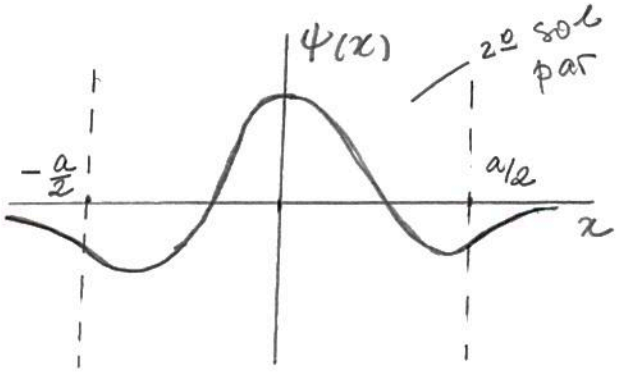
$\sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2} = 4$

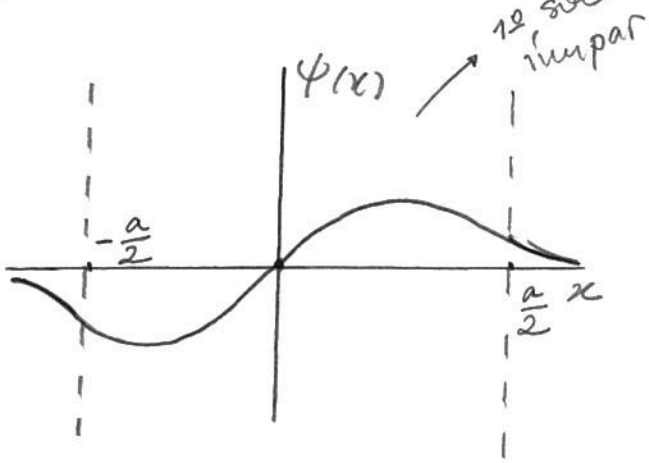
Para $\sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2} = 4$ só temos 1 solução ímpar. Ao todo temos 3 soluções:

Duas pares: $\varepsilon < \frac{\pi}{2}$ e $\pi < \varepsilon < \frac{3\pi}{2}$

Uma ímpar: $\frac{\pi}{2} < \varepsilon < \pi$.







Quanto maior ε (solução), mais nós na função de onda e maior a energia.

6.9 OSCILADOR HARMÔNICO SIMPLES

$$V(x) = \frac{1}{2} C x^2$$

A EQSCH ind tempo é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} C x^2 \psi = E\psi$$

É conveniente expressar a cte C em termos da freqüência de vibração do Osc Har clássico:

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{C}{m}} \quad \Rightarrow \quad C = (2\pi\nu)^2 m$$

Assim a EQSCH torna-se

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left\{ \frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{2\pi\nu m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right\} \psi = 0$$

Definindo

$$\alpha = \frac{2\pi\nu m}{\hbar} \qquad \beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

temos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0$$

Também é conveniente expressar x em termos da variável adimensional

$$u = \sqrt{\alpha}\, x$$

de forma que

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{du}\frac{du}{dx} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d\psi}{du}$$

Analogamente

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d}{dx}\frac{d\psi}{du} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d}{du}\frac{d\psi}{du}\frac{du}{dx} = \alpha\,\frac{d^2\psi}{du^2}$$

Com essa mudança, a EQSCH torna-se

$$\alpha\,\frac{d^2\psi}{du^2} + (\beta - \alpha u^2)\,\psi = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{du^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2\right)\psi = 0$$

Por último, vamos definir a cte

$$\gamma = \frac{\beta}{\alpha} = \frac{2mE}{\hbar^2} \times \frac{\hbar}{2\pi m\nu} = \frac{2E}{h\nu}$$

lembre-se que $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

de forma que a Eq a ser resolvida é

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{du^2} + (\gamma - u^2)\,\psi = 0} \qquad (24)$$

* Solução assintótica. Inicialmente, vamos obter uma solução que seja válida no limite $u \to \pm\infty$. Nesse limite, a EQSCH torna-se

$$\frac{d^2\psi_\infty}{du^2} = u^2\psi \qquad u^2 \gg \gamma$$

As soluções linearmente independentes são

$$\psi_\infty = e^{u^2/2} \quad \text{e} \quad \psi_\infty = e^{-u^2/2}$$

Verificação:

$$\frac{d\psi_\infty}{dx} = \pm u\, e^{\pm u^2/2}$$

$$\frac{d^2\psi_\infty}{dx^2} = (u^2 \pm 1)\, e^{\pm u^2/2} \simeq u^2 \psi_\infty \quad (u^2 \gg 1)$$

* A solução $e^{u^2/2} \to \infty$ quando $u \to \pm\infty$ $(x \to \pm\infty)$ de forma que não é aceitável. Assim

$$\psi_\infty = A\, e^{-u^2/2}$$

* solução geral (para todos os valores de u). Guiados pela sol assintótica, vamos escrever a sol geral na forma

$$\psi(u) = A\, e^{-u^2/2} H(u)$$

onde $H(u)$ é alguma função de u (indiretamente de x).

$$\frac{d\psi}{du} = \left(-uH + \frac{dH}{du}\right) A\, e^{-u^2/2}$$

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = \left(-H + u^2 H - 2u\frac{dH}{du} + \frac{d^2H}{du^2}\right) A\, e^{-u^2/2}$$

Substituindo na Eq (24) e simplificando

a exponencial, obtemos

$$\frac{d^2H}{du^2} - 2u\frac{dH}{du} + (\alpha - 1)H = 0$$

Esta é a Equação de Hermite, que vamos resolver a seguir.

* Vamos supor que H pode ser escrita como uma série de potências:

$$H = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell u^\ell$$

As derivadas são:

$$\frac{dH}{du} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell\, a_\ell u^{\ell-1}$$

$$\frac{d^2H}{du^2} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell(\ell-1)\, a_\ell u^{\ell-2}$$

Como os dois primeiros termos no somatório da última Eq são nulos, podemos reescrê-la como

$$\frac{d^2H}{du^2} = \sum_{\ell=2}^{\infty} \ell(\ell-1)\, a_\ell u^{\ell-2}$$

A Eq Hermite torna-se

$$\sum_{\ell=2}^{\infty} \ell(\ell-1)\, a_\ell u^{\ell-2} - 2\sum_{\ell=0}^{\infty} \ell\, a_\ell u^\ell + (\alpha-1)\sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell u^\ell = 0$$

Trocando ℓ por $\ell+2$ no primeiro somatório, podemos reunir as três somas:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1)(\ell+2)\, a_{\ell+2} + (\nu - 1 - 2\ell)\, a_\ell \right\} u^\ell = 0$$

Para que esta Eq seja válida para qqer valor de u, todos os coeficientes de u^ℓ devem ser nulos. Assim

$$\boxed{a_{\ell+2} = -\frac{\nu - 2\ell - 1}{(\ell+1)(\ell+2)}\, a_\ell} \longrightarrow \text{relação de recorrência}$$

A função $H(u)$ pode ser reescrita como

$$H(u) = a_0 \left\{ 1 + \frac{a_2}{a_0} u^2 + \frac{a_4}{a_2}\frac{a_2}{a_0} u^4 + \cdots \right\}$$

$$+ a_1 \left\{ u + \frac{a_3}{a_1} u^3 + \frac{a_5}{a_3}\frac{a_3}{a_1} u^5 + \cdots \right\}$$

Como as razões dentro das $\{\ \}$ podem ser calculadas da relação de recorrência, $H(u)$ fica definido, a menos das ctes a_0 e a_1.

* Uma questão importante é se a função $H(u)$, dada pela série de potências, não cresce muito rápido com u crescendo a ponto da função de onda

$$\psi(u) = H(u)\, e^{-u^2/2}$$

tender a infinito quando $u \to \pm\infty$.

Para responder a esta questão vamos analisar o comportamento das funções $H(u)$ e e^{u^2} quando $u \to \pm\infty$.

(1) $H(u)$

$$\lim_{\ell\to\infty} \frac{a_{\ell+2}}{a_\ell} \simeq \frac{2\ell}{\ell^2} \sim \frac{2}{\ell}$$

(2) $e^{u^2} = 1 + u^2 + \frac{u^4}{2!} + \cdots + \frac{u^\ell}{(\ell/2)!} + \cdots$ (ℓ par)

O coeficiente de ordem ℓ é

$$a_\ell = \frac{1}{(\ell/2)!}$$

A razão entre dois coeficientes consecutivos é

$$\frac{a_{\ell+2}}{a_\ell} = \frac{(\frac{\ell}{2})!}{[(\frac{\ell+2}{2})!]} = \frac{(\frac{\ell}{2})!}{[(\frac{\ell}{2}+1)(\frac{\ell}{2})!]} = \frac{1}{\frac{\ell}{2}+1}$$

$$\Rightarrow \lim_{\ell\to\infty} \frac{a_{\ell+2}}{a_\ell} = \frac{2}{\ell}$$

A razão entre coeficientes consecutivos

(para ℓ grande) é a mesma. Isso quer dizer que $H(u)$ cresce tão rápido quanto e^{u^2} para $u \to \pm\infty$. Assim

$$\lim_{u\to\pm\infty} H(u)e^{-u^2/2} \sim \lim_{u\to\pm\infty} e^{u^2}e^{-u^2/2} \sim \infty$$

Então

$$\psi(u) = H(u)\,e^{-u^2/2}$$

não é uma solução aceitável, a menos que a série de potências sofra um corte, tornando-se um polinômio de grau finito.

* Uma forma de interromper a série é fazer

$$\nu = 2n+1 \qquad\qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Assim, a rel de recorrência torna-se

$$a_{\ell+2} = -\frac{(2n+1) - 2\ell - 1}{(\ell+1)(\ell+2)}\, a_\ell$$

Obviamente, $a_{n+2} = 0$. Consequentemente $a_{n+4} = a_{n+6} = \cdots = 0$. A série de potências fica interrompida após o termo a_n (temos um polinômio de grau n).

Como não é possível cortar as partes par e ímpar da série ao mesmo tempo, sobram duas possibilidades:

(1) $a_1 = 0$ e n par.

$H_n(u)$ é um polinômio de grau n par.

(2) $a_0 = 0$ e n ímpar.

$H_n(u)$ é um polinômio de grau n ímpar.

Em ambos os casos

$$\alpha = \frac{2E}{h\nu} = 2n+1$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n = (n+\tfrac{1}{2})h\nu} \qquad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

* A energia do Osc Harm só pode assumir certos valores discretos. A energia é quantizada. A energia de ponto zero é $\frac{1}{2}h\nu$.

Note que foi a exigência que $\psi(u) \to 0$ nos limites $u \to \pm\infty$ que levou à quantização da energia.

* Autofunções. As autofunções do Osc Harm quântico são do tipo

$$\psi_n(u) = A_n H_n(u) e^{-u^2/2}$$

A_n ↳ cte de normalização

$n \to$ nº quântico.

* Se n for par, $H_n(u)$ é um polinômio de ordem par e $\psi_n(u)$ é uma função par.

se n for ímpar, ... $\psi_n(u)$ é uma função ímpar

* O fato das autofunções serem pares ou ímpares está de acordo com o fato que o potencial $V(x)$ é uma função par:

$$V(-x)=V(x) \Rightarrow \begin{cases} \psi(-x) = \psi(x) \\ \text{ou} \\ \psi(-x) = -\psi(x) \end{cases}$$

* Alguns polinômios de Hermite e Autofunções.

Para um polinômio de grau n:

$$\frac{a_{\ell+2}}{a_\ell} = -\frac{(2n+1)-(2\ell+1)}{(\ell+1)(\ell+2)} = -\frac{2(n-\ell)}{(\ell+1)(\ell+2)}$$

para $\ell \leq n-2$.

$n=0 \Rightarrow H_0(u) = a_0$

É comum escolher a cte como sendo o menor número inteiro tal que todos os coeficientes do polinômio sejam inteiros. Assim

$$\boxed{H_0(u)=1}$$

$$\psi_0(u) = A_0\, e^{-u^2/2}$$

$n=1 \Rightarrow H_1(u) = u$

$$\psi_1 = A_1\, u\, e^{-u^2/2}$$

$n=2 \Rightarrow H_2(u) = a_0\left(1 + \frac{a_2}{a_0}u^2\right) = a_0\left(1-2u^2\right)$

$a_0 = 1 \Rightarrow H_2(u) = 1-2u^2$

$$\psi_2 = A_2(1-2u^2)\, e^{-u^2/2}$$

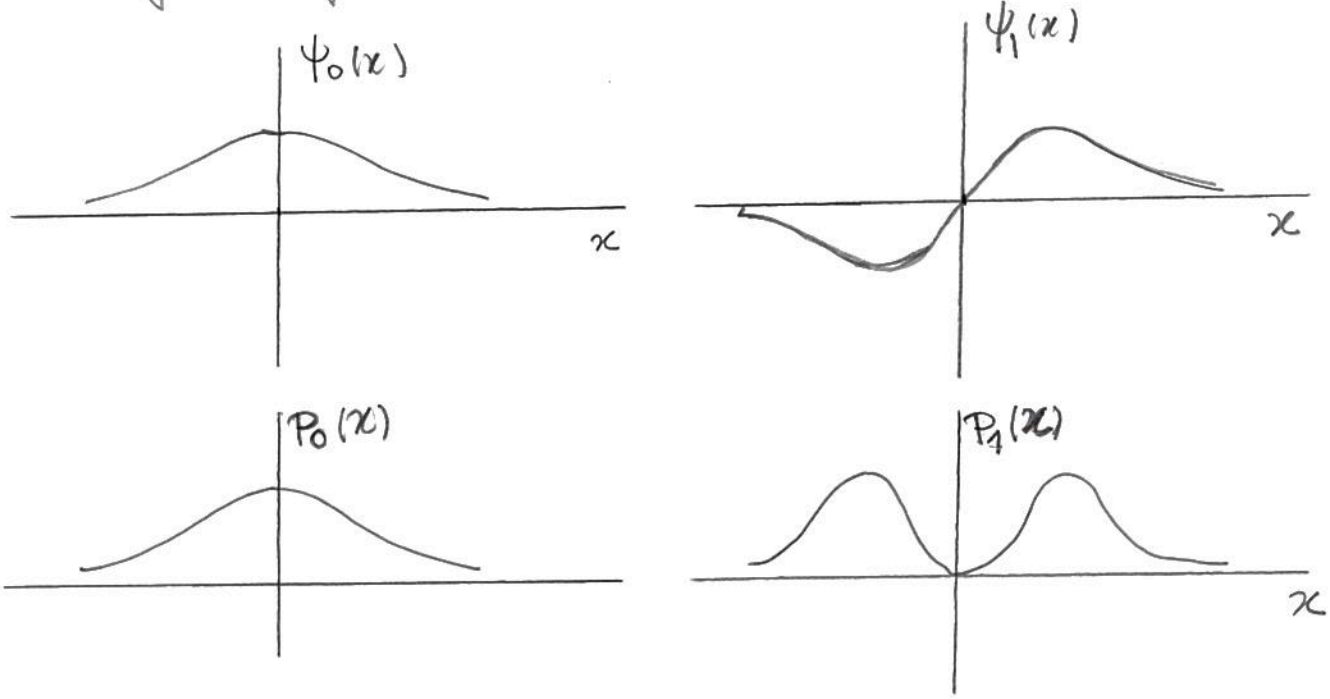
$n=3 \Rightarrow H_3(u) = a_1\left(u + \frac{a_3}{a_1}u^3\right) = a_1\left(u - \frac{2}{3}u^3\right)$

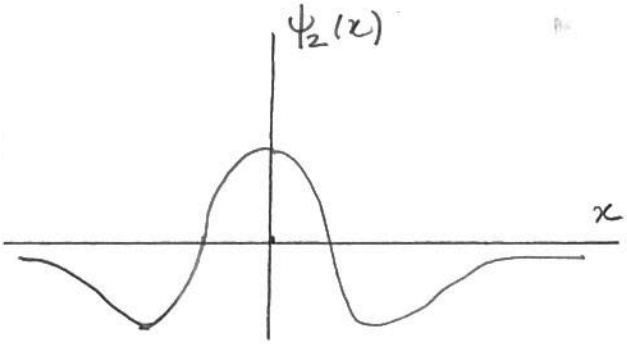
$a_1 = 3 \Rightarrow H_3(u) = (3u - 2u^3)$

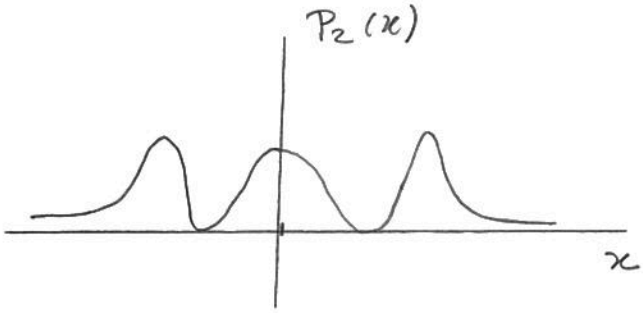
$$\psi_3 = A_3(3u-2u^3)\, e^{-u^2/2}$$

No livro tem mais!

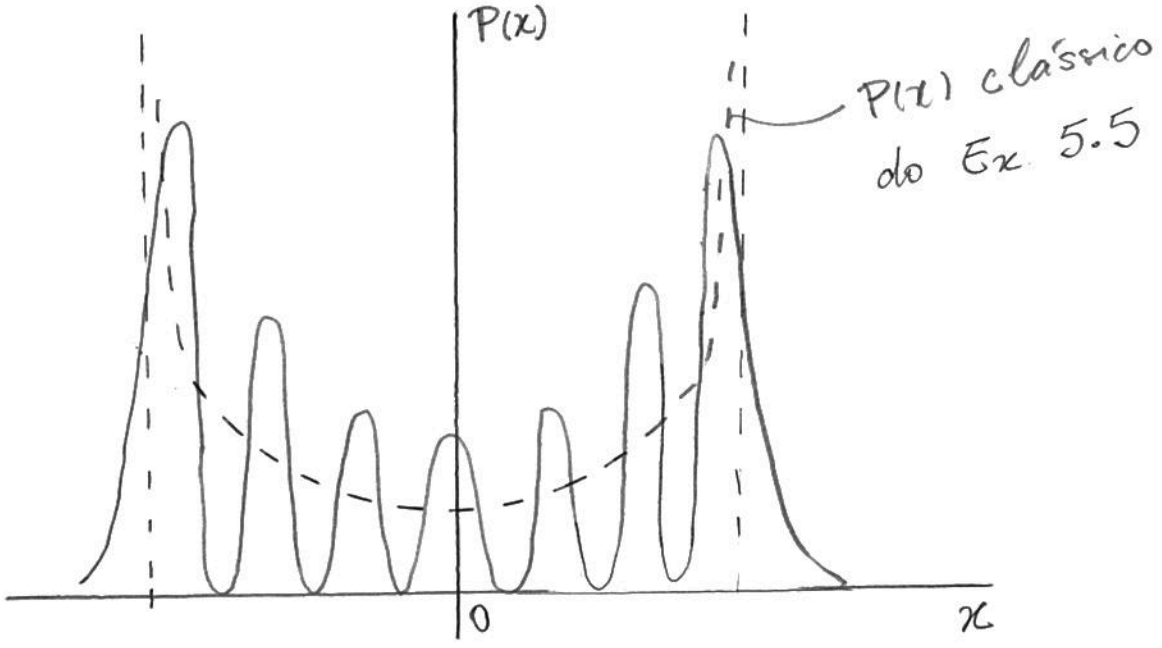
* Alguns gráficos







* Quando n é grande, $P(x)$ tem a forma da fig abaixo



Lista de Problemas: 22, 23, 24, 25, 26, 27, 29, 30, 31