

Capítulo 6

A Equação de Schrödinger

6.1 Funções de Onda

Na mecânica quântica, a natureza ondulatória dos fenômenos faz que tenhamos que descrevê-los por meio de uma função de onda $\Psi(x, t)$. Mas o que é exatamente a função de onda?

A interpretação correta da função de onda foi dada por Max Born em 1926, de que ela é uma amplitude de densidade de probabilidade, ou seja:

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) \quad (6.1)$$

é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula na posição x no tempo t . Max Born ganhou o prêmio Nobel de 1954 por esta interpretação. Mas como podemos encontrar a função de onda de um sistema? Ela é descrita pela Eq. de Schrödinger, que veremos a seguir.

6.2 Operadores Posição, Momento e Energia

Na mecânica quântica, a posição x e momento p são promovidos a *operadores* $\hat{X}$, $\hat{P}$. O operador $\hat{X}$ atua trivialmente multiplicando uma função de onda por x . Podemos obter o operador momento $\hat{P}$, considerando uma função de onda para uma onda plana

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (6.2)$$

Essa função de onda descreve uma partícula de posição x , momento $p = \hbar k$ e energia $E = \hbar \omega = \hbar \omega$. O operador momento pode ser obtido, considerando a derivada espacial dessa função de onda:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik\Psi = \frac{ip}{\hbar}\Psi \quad \rightarrow \quad p\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (6.3)$$

Similarmente, considerando a derivada temporal:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi = \frac{-iE}{\hbar}\Psi \quad \rightarrow \quad E\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (6.4)$$

Desta forma, podemos definir os operadores posição $\hat{X}$, momento linear $\hat{P}$ e energia $\hat{H}$:

$$\hat{X} = x \quad (6.5)$$

$$\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (6.6)$$

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (6.7)$$

que atuam em uma função de onda $\Psi(x, t)$ produzindo

$$\hat{X}\Psi = x\Psi \quad (6.8)$$

$$\hat{P}\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (6.9)$$

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (6.10)$$

No caso comum em que a energia é dada pela energia cinética mais uma energia potencial, o operador $\hat{H}$ também pode ser dado pela mesma função clássica, mas promovendo x e p a operadores, como indicado acima:

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{X}, \hat{P}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(\hat{X}) \quad (6.11)$$

ou seja:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + U(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \end{aligned} \quad (6.12)$$

Se a função de onda Ψ é um auto-estado (auto-vetor) do operador $\hat{H}$, com auto-valor E , temos

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (6.13)$$

6.2.1 Valores Médios

Com a interpretação de que $P(x, t) = |\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$, podemos calcular valores médios de grandezas (posição, momento, etc) no estado descrito por ψ . Por exemplo, os valores médios de x e x^2 são dados por

$$\langle x \rangle = \int x P(x, t) dx = \int x \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \quad (6.14)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 P(x, t) dx = \int x^2 \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \quad (6.15)$$

6.3 Equação de Schrödinger

Em 1926, Schrödinger propôs uma equação que descreve a evolução temporal da função de onda de um sistema com operador energia $\hat{H}$ definido. Por esse feito, Schrödinger ganharia o prêmio Nobel em 1933. A equação de Schrödinger é dada por

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x, t)} \quad (\text{Eq. Schrödinger}) \quad (6.16)$$

Essa equação é a lei fundamental da mecânica quântica. Ela é equivalente à 2ª Lei de Newton $F = ma$ que descreve a evolução temporal da posição de um sistema. Aqui a descrição é feita para a função de onda, que dá a amplitude de probabilidade do sistema. Vamos assumir casos estacionários, em que $\hat{H}$ não depende do tempo. Podemos assumir que a função de onda se separa:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\psi_t(t) \quad (6.17)$$

a equação acima fica

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(x)\psi_t(t)] &= \hat{H}[\psi(x)\psi_t(t)] \\ \rightarrow i\hbar \psi(x) \frac{d\psi_t(t)}{dt} &= \psi_t(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) \right] \end{aligned} \quad (6.18)$$

Dividindo esta equação por $\psi(x)\psi_t(t)$, obtemos:

$$i\hbar \frac{1}{\psi_t(t)} \frac{d\psi_t(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) \right] \quad (6.19)$$

Como o lado esquerdo depende apenas do tempo t , enquanto o lado direito depende apenas da posição x , a única maneira de serem iguais é que sejam ambos iguais a uma constante, que identificamos com a energia E , já que $\hat{H}\Psi = E\Psi$. As equações ficam

$$i\hbar \frac{d\psi_t(t)}{dt} = E\psi_t(t) \quad (\text{Eq. Schrödinger dependente do tempo}) \quad (6.20)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{Eq. Schrödinger independente do tempo}) \quad (6.21)$$

A solução da primeira equação é dada trivialmente por

$$\boxed{\psi_t(t) = e^{-iEt/\hbar}} \quad (6.22)$$

Para encontrar $\psi(x)$, bem como os níveis de energia E , precisamos resolver a equação $\hat{H}\Psi = E\Psi$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + [U(x) - E]\psi = 0 \quad (6.23)$$

que pode ser escrita como

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi = 0} \quad (6.24)$$

Portanto só precisamos especificar a energia potencial $U(x)$ do sistema para encontrar seus estados possíveis resolvendo a equação acima.

As soluções são portanto da forma

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (6.25)$$

$$\rightarrow \Psi^*(x, t) = \psi(x)^*e^{iEt/\hbar} \quad (6.26)$$

e tem densidade de probabilidade

$$P(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = \psi(x)^*\psi(x) = |\psi(x)|^2 \quad (6.27)$$

ou seja, independente do tempo. Portanto, no caso em que a energia $\hat{H}$ e a probabilidade P não dependem do tempo, as soluções são chamadas de *estados estacionários*.

6.3.1 Condições de Contorno

Sendo ψ relacionada com a probabilidade em certo ponto do espaço, ela deve obviamente ser uma função contínua e definida em todos os pontos do espaço. Pela Eq. de Schrödinger, podemos concluir o comportamento das derivadas de ψ . Temos então que:

- 1) ψ deve ser sempre contínua e finita em todos os pontos.
- 2) Se $U(x)$ é finita no ponto x , então $d^2\psi/dx^2$ deve ser finita, o que implica que $d\psi/dx$ deve ser contínua em x .
- 3) Se $U(x)$ é infinita no ponto x , então $d^2\psi/dx^2$ também será infinita neste ponto, e $d\psi/dx$ poderá ser descontínua em x .

Para o que nos interessa nos problemas a seguir, temos então que ψ e $d\psi/dx$ são sempre contínuas, exceto quando $U(x)$ for infinita, e neste caso $d\psi/dx$ poderá ser descontínua.

6.4 Partícula Livre

O caso mais simples é o de uma partícula livre, i.e. com energia potencial nula, $U(x) = 0$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (6.28)$$

cuja solução fica

$$\psi(x) = \phi_+ e^{ikx} + \phi_- e^{-ikx}, \quad \text{onde } k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6.29)$$

e ϕ_+ e ϕ_- são constantes, que dão *pesos* às soluções com momento p e $-p$, respectivamente, para uma dada energia E . Juntamente com a parte temporal, a solução completa fica

$$\Psi(x, t) = \phi_+ e^{i(kx - \omega t)} + \phi_- e^{-i(kx + \omega t)} \quad (6.30)$$

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ e } \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (6.31)$$

que é uma onda plana. Note que $k = p/\hbar \rightarrow \lambda = h/p$, exatamente como sugerido por de Broglie. Além disso, $E = \hbar\omega = h\nu$, similar à hipótese de Planck/Einstein. Outra forma de expressar a solução em ondas planas seria em termos de senos e cossenos, i.e.:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (6.32)$$

6.4.1 Pacote de Ondas

Combinações lineares destas soluções também são soluções e podem ser usadas para obter pacotes de ondas com localização no espaço ou no momento linear. De fato, senos, cossenos ou e^{ikx} formam uma base completa que pode ser usada para expressar qualquer solução, e.g. séries e transformadas de Fourier.

Por exemplo, podemos obter uma função de onda periódica em $x = L$ como

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_+(k_n) e^{ik_n x} + \sum_{n=0}^{\infty} \phi_-(k_n) e^{-ik_n x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) e^{ik_n x} \quad (6.33)$$

onde $\phi(k_n) = \phi_+$ para $n > 0$ e ϕ_- para $n < 0$, é o coeficiente de Fourier de ψ . A periodicidade implica $\psi(0) = \psi(L)$, ou seja $e^{ik_n L} = 1$ e $k_n = n2\pi/L$. Portanto:

$$e^{-ik_m x} \psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) e^{i(k_n - k_m)x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) e^{i2\pi(n-m)x/L} \quad (6.34)$$

$$\int_0^L dx e^{-ik_m x} \psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) \int_0^L dx e^{i2\pi(n-m)x/L} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) (L\delta_{nm}) \quad (6.35)$$

Ou seja,

$$\phi(k_m) = \frac{1}{L} \int_0^L dx e^{-ik_m x} \psi(x) \quad (6.36)$$

Para uma função não periódica, basta tomar o limite $L \rightarrow \infty$. Como n é inteiro, $\Delta n = 1$, e o espaçamento $\Delta k_n = \Delta n 2\pi/L = 2\pi/L \rightarrow 0$, e $k_n = k$ fica contínua:

$$\psi(x) = \lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ \Delta k_n \rightarrow 0}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta n \phi(k_n) e^{ik_n x} = \lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ \Delta k_n \rightarrow 0}} \frac{L}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta k_n \phi(k_n) e^{ik_n x} \quad (6.37)$$

$$= \frac{L}{2\pi} \int dk \phi(k) e^{ikx} \quad (6.38)$$

Redefinindo $\phi(k) \rightarrow \sqrt{2\pi} \phi(k)/L$ (o que poderíamos ter feito desde a Eq. 6.29), ficamos com

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \phi(k) e^{ikx} \quad (6.39)$$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \psi(x) e^{-ikx} \quad (6.40)$$

ou em termos de $p = \hbar k$, e $\phi(p) = \phi(k)/\sqrt{\hbar}$ temos

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{ipx/\hbar} \quad (6.41)$$

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \quad (6.42)$$

6.5 Partícula na Caixa

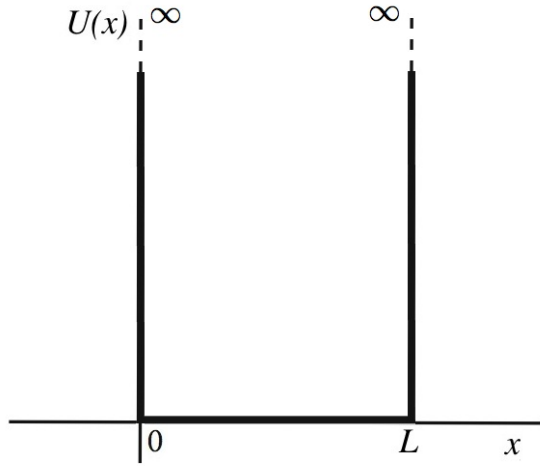


Figura 6.1: Partícula em uma caixa.

Considere agora uma partícula em uma caixa, que consiste em uma partícula sujeita à seguinte energia potencial

$$U(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 & \text{(Região I)} \\ 0 & 0 < x < L & \text{(Região II)} \\ \infty & x > L & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.43)$$

ou seja, a partícula está livre ($U = 0$) na região II, que corresponde à região *dentro* da caixa, enquanto nas regiões I e III, i.e. *fora* da caixa a energia potencial é infinita, de tal forma que, qualquer que seja a energia E da partícula, é impossível ela estar nessas regiões.

A solução para $\psi(x)$ neste caso será parecida com a da partícula livre, mas, como veremos, as condições de fronteira do problema determinarão a quantização da energia do sistema.

Nas regiões I e III, temos que

$$\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0 \quad (6.44)$$

Já na região II, a partícula satisfaz a Eq. de Schrödinger para uma partícula livre:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{II} = 0 \quad (6.45)$$

Com solução dada em termos de $e^{\pm ik}$ ou similarmente, senos e cossenos:

$$\psi_{II}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (6.46)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ ou } E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad (6.47)$$

Agora usamos as condições de contorno que ψ deve satisfazer. Neste caso, as condições são apenas em ψ , que deve ser contínua nos pontos $x = 0, L$. Como $U(x = 0, L) = \infty$, $d\psi/dx$ não é necessariamente contínua nesses pontos.

Pela continuidade de $\psi(x)$ em $x = 0$, temos:

$$0 = \psi_I(0) = \psi_{II}(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = B \quad (6.48)$$

$$\rightarrow B = 0 \quad (6.49)$$

Portanto, temos que

$$\psi_{II}(x) = A \sin(kx) \quad (6.50)$$

A continuidade de $\psi(x)$ em $x = L$ implica

$$\psi_{II}(L) = A \sin(kL) = \psi_{III}(L) = 0 \quad (6.51)$$

$$\rightarrow kL = n\pi \text{ com } n \text{ inteiro.} \quad (6.52)$$

ou seja, são apenas possíveis valores de k tais que $k = n\pi/L$. Pela Eq. 6.47, isso implica que as energia possíveis são dadas por:

$$E_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} \quad (6.53)$$

$$\rightarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (6.54)$$

Já as funções de onda possíveis em II ficam (omitindo o índice II):

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (6.55)$$

Neste exemplo, vemos algo que acontece com frequência na mecânica quântica: as condições de contorno na função de onda gera a quantização dos níveis de energia. Apenas funções de ondas que se "encaixem" nessas condições são possíveis, e somente as energia associadas são permitidas, sendo todas as outras proibidas. Já tínhamos visto este efeito quando falamos da radiação térmica de corpo negro dentro de uma caixa e contamos os estados possíveis da radiação nesta caixa. A situação aqui é similar, mas ao invés de termos a onda eletromagnética, temos a função de onda quântica do sistema, que também tem natureza ondulatória. Esquematicamente, temos então:

Natureza ondulatória + condições de contorno confinantes $\rightarrow$ quantização dos níveis de energia

Por fim, precisamos normalizar a função de onda. Como $P(x) = |\psi(x)|^2$, e a integral desta densidade de probabilidade em todo espaço deve ser 1, temos:

$$\int_0^\infty P(x)dx = \int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (6.56)$$

o que implica

$$\begin{aligned} 1 &= A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)}{2} dx \\ &= A^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right]_0^L \\ &= A^2 \frac{L}{2} \end{aligned} \quad (6.57)$$

e portanto

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (6.58)$$

Assim,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (6.59)$$

Temos $\Delta x \approx L/2$ e $\Delta p = p_2 - p_1 = \hbar(k_2 - k_1) = \hbar\pi/L$. Portanto

$$\Delta x \Delta p \approx \frac{\hbar\pi}{2} > \frac{\hbar}{2} \quad (6.60)$$

e verificamos que o princípio de incerteza é satisfeito neste caso.

6.6 Poço de Potencial

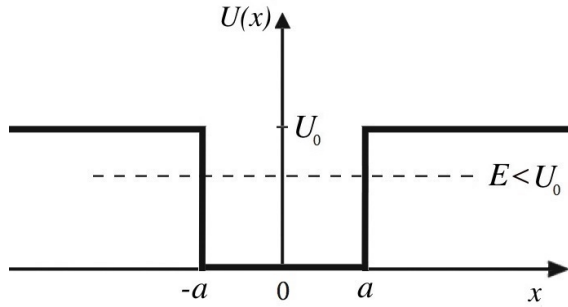


Figura 6.2: Poço de potencial.

Considere agora uma partícula em um poço de potencial. Neste caso:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & x < -a & \text{(Região I)} \\ 0 & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ U_0 & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.61)$$

Vamos considerar apenas o caso em que $E < U_0$, i.e. a energia total da partícula é menor do que a energia potencial do poço. Para uma partícula dentro do poço ($-a < x < a$), classicamente seria impossível ela transitar para as regiões I e III, já que para isso deveria ter energia cinética negativa !

Entretanto, como veremos, na mecânica quântica, existe uma probabilidade não nula de a partícula penetrar essas regiões proibidas, mas que será exponencialmente suprimida.

A Eq. de Schrödinger é dada por

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0 \quad (6.62)$$

e aqui vamos impor a continuidade tanto de ψ quanto de $d\psi/dx$ em $x = \pm a$.

Para as regiões I e III, temos um potencial constante. Como $(U_0 - E) > 0$, temos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (k_0)^2 \psi \rightarrow \text{Soluções : } e^{k_0 x}, e^{-k_0 x}, \text{ com } k_0^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \quad (\text{Regiões I e III}) \quad (6.63)$$

E para a região II, a partícula é livre e temos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 \psi \rightarrow \text{Soluções : } e^{ikx}, e^{-ikx}, \text{ com } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{Região II}) \quad (6.64)$$

Note que $k^2 + k_0^2 = 2mU_0/\hbar^2$. A solução completa fica:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{k_0 x} + Be^{-k_0 x} & x < -a & \text{(Região I)} \\ C \cos(kx) + D \sin(kx) & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ Ee^{k_0 x} + Fe^{-k_0 x} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.65)$$

A função de onda ψ deve permanecer finita em todo o intervalo, pois a integral do seu quadrado em todo o eixo x deve ser 1. Desta forma $B = E = 0$ e temos

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{k_0x} & x < -a & \text{(Região I)} \\ C \cos(kx) + D \sin(kx) & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ Fe^{-k_0x} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.66)$$

Como o potencial é uma função par, as soluções da função de onda acabam sendo ou pares ou ímpares (para detalhes, veja Eisberg Apêndice H). Podemos então considerar essas soluções separadamente. Vamos considerar primeiro as soluções pares (even), com $A = F$:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} Fe^{k_0x} & x < -a & \text{(Região I)} \\ C \cos(kx) & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ Fe^{-k_0x} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.67)$$

cuja derivada é

$$\frac{d\psi_E(x)}{dx} = \begin{cases} k_0Fe^{k_0x} & x < -a & \text{(Região I)} \\ -kC \sin(kx) & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ -k_0Fe^{-k_0x} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.68)$$

Condições de contorno em $x = a$ são dadas por

$$\psi_{E,II}(a) = \psi_{E,III}(a) \quad (6.69)$$

$$\frac{d\psi_{E,II}(a)}{dx} = \frac{d\psi_{E,III}(a)}{dx} \quad (6.70)$$

e nos dão:

$$C \cos(ka) = Fe^{-k_0a} \quad (6.71)$$

$$-kC \sin(ka) = -k_0Fe^{-k_0a} \quad (6.72)$$

Devido à paridade, as condições em $x = -a$ dariam as mesmas equações. Dividindo uma equação pela outra, temos

$$k \tan(ka) = k_0 \quad (6.73)$$

multiplicando essa por a , temos

$$(ka) \tan(ka) = (k_0a) \quad (6.74)$$

Lembrando que $k^2 + k_0^2 = 2mU_0/\hbar^2$, temos

$$(ka)^2 + (k_0a)^2 = 2mU_0a^2/\hbar^2 \quad (6.75)$$

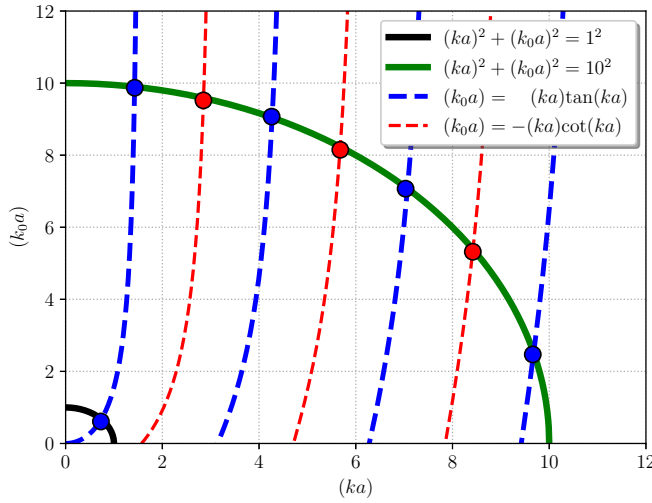


Figura 6.3: Soluções de energia para o poço de potencial.

Portanto podemos determinar graficamente as soluções para (ka) que satisfaçam as duas equações acima, plotando $k_0 a$ em função de ka . Apenas alguns valores finitos para ka satisfazem as equações acima e eles geram os valores de energia correspondentes:

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad (6.76)$$

Note que quando $U_0 \rightarrow \infty$, o raio do círculo vai a infinito. Desta forma, o círculo vai interceptar a função $(ka)\tan(ka)$ apenas nas assíntotas, ou seja, quando $\cos(ka) = 0$, o que implica os seguintes valores para k :

$$ka = n\pi/2 \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (6.77)$$

Similarmente, para as soluções ímpares (odd), com $A = -F$:

$$\psi_O(x) = \begin{cases} -Fe^{k_0 x} & x < -a & \text{(Região I)} \\ D \sin(kx) & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ Fe^{-k_0 x} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.78)$$

cuja derivada é

$$\frac{d\psi_O(x)}{dx} = \begin{cases} -k_0 Fe^{k_0 x} & x < -a & \text{(Região I)} \\ kD \cos(kx) & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ -k_0 Fe^{-k_0 x} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.79)$$

Condições de contorno em $x = a$ são dadas por

$$\psi_{O,II}(a) = \psi_{O,III}(a) \quad (6.80)$$

$$\frac{d\psi_{O,II}(a)}{dx} = \frac{d\psi_{O,III}(a)}{dx} \quad (6.81)$$

e nos dão:

$$B \sin(ka) = Fe^{-k_0 a} \quad (6.82)$$

$$kD \cos(ka) = -k_0 Fe^{-k_0 a} \quad (6.83)$$

Dividindo uma equação pela outra, temos

$$k \cot(ka) = -k_0 \quad (6.84)$$

multiplicando por a , temos

$$-(ka) \cot(ka) = (k_0 a) \quad (6.85)$$

Novamente, quando $U_0 \rightarrow \infty$, o círculo vai interceptar a função $-(ka) \cot(ka)$ apenas nas assíntotas quando $\sin(ka) = 0$, ou seja

$$ka = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.86)$$

ou

$$ka = n\pi/2, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (6.87)$$

Desta forma, juntando as soluções pares e ímpares, reobtemos a condição de quantização da partícula na caixa (poço infinito):

$$ka = n\pi/2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.88)$$

ou para $L = 2a$

$$kL = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.89)$$

Finalmente, voltando ao caso das soluções pares, note que

$$\frac{F}{C} = e^{k_0 a} \cos(ka) \quad (6.90)$$

Portanto a função de onda $\psi_E(x)$ fica definida em todo o espaço a menos de uma constante de normalização C

$$\psi_E(x) = \begin{cases} C \cos(ka) e^{k_0(x+a)} & x < -a & \text{(Região I)} \\ C \cos(kx) & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ C \cos(ka) e^{-k_0(x-a)} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.91)$$

Finalmente C pode ser determinada impondo

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_E(x)|^2 dx = 1 \quad (6.92)$$

ou

$$C^2 \left(e^{2k_0 a} \cos^2(ka) \int_{-\infty}^{-a} e^{2k_0 x} dx + \int_{-a}^a \cos^2(kx) dx + e^{2k_0 a} \cos^2(ka) \int_a^{\infty} e^{-2k_0 x} dx \right) = 1 \quad (6.93)$$

ou

$$\begin{aligned} C^2 \left(\int_{-a}^a \cos^2(kx) dx + 2e^{2k_0 a} \cos^2(ka) \int_a^{\infty} e^{-2k_0 x} dx \right) &= 1 \\ C^2 \left(\frac{x}{2} + \frac{\sin(2kx)}{4k} \Big|_{-a}^a + 2e^{2k_0 a} \cos^2(ka) \frac{e^{-2k_0 x}}{-2k_0} \Big|_a^{\infty} \right) &= 1 \\ C^2 \left(a + \frac{\sin(2ka)}{2k} + \frac{\cos^2(ka)}{k_0} \right) &= 1 \end{aligned} \quad (6.94)$$

6.7 Barreira de Potencial e Tunelamento

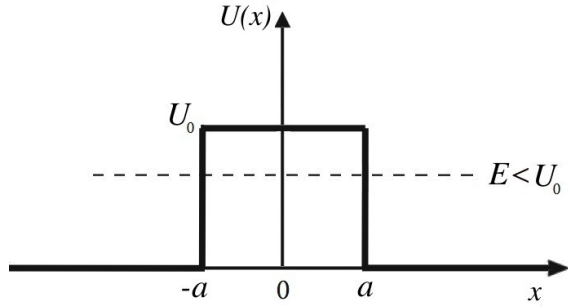


Figura 6.4: Barreira de potencial.

Considere agora uma partícula em uma barreira de potencial. Neste caso:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < -a & \text{(Região I)} \\ U_0 & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ 0 & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.95)$$

Vamos considerar apenas o caso em que $E < U_0$, i.e. a energia total da partícula é menor do que a energia potencial da barreira. Portanto, se ela começa do lado esquerdo ($x < -a$), classicamente seria impossível ela entrar na região II, já que para isso deveria ter energia cinética negativa !

Entretanto, como veremos, na mecânica quântica, existe uma probabilidade não nula de a partícula, não apenas passar para a região II, mas até mesmo chegar a região III. Quando isso ocorre, dizemos que a partícula sofreu *tunelamento*. A idéia é que ela fez um "tunel secreto" e passou para uma região classicamente proibida. Jogando um número grande de partículas, eventualmente uma delas vai tunelar, pela lei da probabilidade.

A Eq. de Schrödinger é dada por

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0 \quad (6.96)$$

e aqui vamos impor a continuidade tanto de ψ quanto de $d\psi/dx$ em $x = \pm a$.

Para as regiões I e III, a partícula é livre temos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \rightarrow \text{Soluções : } e^{ikx}, e^{-ikx}, \text{ com } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{(Regiões I e III)} \quad (6.97)$$

E para a região II, temos um potencial constante. Como $(U_0 - E) > 0$, temos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (k_0)^2\psi \rightarrow \text{Soluções : } e^{k_0x}, e^{-k_0x}, \text{ com } k_0^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \quad \text{(Região II)} \quad (6.98)$$

Note que $k^2 + k_0^2 = 2mU_0/\hbar^2$. A solução completa fica:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < -a & \text{(Região I)} \\ Ce^{-k_0x} + De^{k_0x} & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.99)$$

e sua derivada é

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \begin{cases} ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx} & x < -a & \text{(Região I)} \\ -k_0Ce^{-k_0x} + k_0De^{k_0x} & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ ikEe^{ikx} - ikFe^{-ikx} & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.100)$$

Condições de contorno em $\underline{x = -a}$:

$$\begin{aligned}\psi_I(-a) &= \psi_{II}(-a) \\ Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Ce^{k_0a} + De^{-k_0a} \quad \times (ik) \\ ik(Ae^{-ika} + Be^{ika}) &= ik(Ce^{k_0a} + De^{-k_0a})\end{aligned}\tag{6.101}$$

e

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_I}{dx}(-a) &= \frac{d\psi_{II}}{dx}(-a) \\ ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) &= -k_0(Ce^{k_0a} - De^{-k_0a})\end{aligned}\tag{6.102}$$

Somando a Eq. 6.101 com a Eq. 6.102, temos

$$\begin{aligned}2ikAe^{-ika} &= (ik - k_0)Ce^{k_0a} + (ik + k_0)De^{-k_0a} \\ \rightarrow A &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_0}{ik}\right) e^{k_0a+ika} C + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_0}{ik}\right) e^{-k_0a+ika} D\end{aligned}\tag{6.103}$$

Da Eq. 6.101, temos

$$\begin{aligned}Be^{ika} &= Ce^{k_0a} + De^{-k_0a} - Ae^{-ika} \\ &= Ce^{k_0a} + De^{-k_0a} - \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_0}{ik}\right) e^{k_0a+ika} C + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_0}{ik}\right) e^{-k_0a+ika} D \right] \\ \rightarrow B &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_0}{ik}\right) e^{k_0a-ika} C + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_0}{ik}\right) e^{-k_0a-ika} D\end{aligned}\tag{6.104}$$

Em forma matricial, temos

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) e^{k_0a+ika} & \left(1 - \frac{ik_0}{k}\right) e^{-k_0a+ika} \\ \left(1 - \frac{ik_0}{k}\right) e^{k_0a-ika} & \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) e^{-k_0a-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}\tag{6.105}$$

Similarmente, as condições de contorno em $\underline{x = a}$ dão

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) e^{k_0a+ika} & \left(1 + \frac{ik}{k_0}\right) e^{k_0a-ika} \\ \left(1 + \frac{ik}{k_0}\right) e^{-k_0a+ika} & \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) e^{-k_0a-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}\tag{6.106}$$

Portanto, combinando os resultados, temos

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M_1 M_2 \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}\tag{6.107}$$

onde

$$M_1 M_2 = \begin{pmatrix} [\cosh(2k_0 a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0 a)] e^{i2ka} & \frac{i\eta}{2} \sinh(2k_0 a) \\ -\frac{i\eta}{2} \sinh(2k_0 a) & [\cosh(2k_0 a) - \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0 a)] e^{-i2ka} \end{pmatrix} \quad (6.108)$$

e definimos

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \\ \eta &= \frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0} \end{aligned} \quad (6.109)$$

Note que

$$\eta^2 - \epsilon^2 = 4 \quad (6.110)$$

Vamos assumir que a partícula incide na região I da esquerda para a direita, podendo ser refletida na barreira ou transmitida à região II e III, onde se move apenas para a direita. Neste caso $F = 0$ e portanto

$$A = \left[\cosh(2k_0 a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0 a) \right] e^{i2ka} E \quad (6.111)$$

Assim, temos

$$\frac{E}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2k_0 a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0 a)} \quad (6.112)$$

Podemos calcular então o coeficiente de transmissão $T = |E/A|^2$:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{\cosh^2(2k_0 a) + \frac{\epsilon^2}{4} \sinh^2(2k_0 a)} \\ &= \left[(1 + \sinh^2(2k_0 a)) + \frac{\epsilon^2}{4} \sinh^2(2k_0 a) \right]^{-1} \\ &= \left[1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4} \right) \sinh^2(2k_0 a) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (6.113)$$

Mas

$$\frac{4 + \epsilon^2}{4} = \frac{\eta^2}{4} = \frac{1}{4} \left(\frac{k_0^2 + k^2}{kk_0} \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{2mU_0/\hbar^2}{\sqrt{2mE/\hbar^2} \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}} \right)^2 = \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \quad (6.114)$$

Portanto

$$T = \left(1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sinh^2(2k_0 a) \right)^{-1} = \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2(2k_0 a)} \quad (6.115)$$

De forma similar, podemos calcular E/B e combinando com o resultado para E/A , obtemos B/A . Assim o coeficiente de reflexão $R = |B/A|^2$ fica:

$$R = \frac{U_0^2 \sinh^2(2k_0 a)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2(2k_0 a)} \quad (6.116)$$

Note que $R + T = 1$, como esperado. Para uma barreira muito alta $U_0 \gg E$, temos $(k_0 a)^2 = 2m(U_0 - E)a^2/\hbar^2 \gg 1$, e assim

$$\sinh(2k_0 a) \approx \frac{e^{2k_0 a}}{2} \gg k_0 a \gg 1 \quad (6.117)$$

Portanto $R \approx 1$ e

$$T \approx \left(\frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \frac{e^{4k_0 a}}{4} \right)^{-1}$$

$$\boxed{\rightarrow T \approx \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} e^{-4k_0 a}} \quad (6.118)$$

o que indica que quando a barreira é muito alta, a transmissão é exponencialmente suprimida, mas ela ainda acontece. Com um número grande de partículas, eventualmente uma chegará da região I à III, o que classicamente seria sempre impossível. O tunelamento quântico é a base para o funcionamento do microscópio de varredura por tunelamento (STM).

6.8 Oscilador Harmônico Simples

No caso do Oscilador Harmônico Simples (OHS) unidimensional, a energia potencial é

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (6.119)$$

e a Eq. de Schrödinger fica:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0 \quad (6.120)$$

ou

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi = 0 \quad (6.121)$$

Para simplificar a equação, vamos propor uma mudança de variável $x = by$, com b sem unidades. Como $d/dx = (1/b)d/dy$ e $d^2/dx^2 = (1/b^2)d^2/dy^2$, a equação fica

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \left(\frac{2mEb^2}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2 b^4}{\hbar^2} y^2 \right) \psi = 0 \quad (6.122)$$

Portanto escolhemos

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad (6.123)$$

$$\epsilon = \frac{mEb^2}{\hbar^2} = \frac{E}{\hbar\omega} \quad (6.124)$$

e temos

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (2\epsilon - y^2) \psi = 0 \quad (6.125)$$

Examinamos agora a equação e sua solução em casos limite. No limite $y \rightarrow \infty$, temos

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y^2\psi = 0 \quad (6.126)$$

cujas soluções neste limite $y \rightarrow \infty$ é:

$$\psi = Ay^m e^{\pm y^2/2}, \quad (6.127)$$

como podemos checar:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dy} &= Amy^{m-1}e^{\pm y^2/2} \pm Ay^{m+1}e^{\pm y^2/2} \\ \frac{d^2\psi}{dy^2} &= Am(m-1)y^{m-2}e^{\pm y^2/2} \pm Amy^m e^{\pm y^2/2} \pm A(m+1)y^m e^{\pm y^2/2} + Ay^{m+2}e^{\pm y^2/2} \\ &= Am(m-1)y^{m-2}e^{\pm y^2/2} \pm A(2m+1)my^m e^{\pm y^2/2} + Ay^{m+2}e^{\pm y^2/2} \\ &= Ay^{m+2}e^{\pm y^2/2} \left[1 \pm \frac{2m+1}{y^2} + \frac{m(m-1)}{y^4} \right] \quad y \rightarrow \infty \\ &\longrightarrow Ay^{m+2}e^{\pm y^2/2} = y^2\psi \end{aligned} \quad (6.129)$$

Obviamente, devemos descartar a exponencial positiva, já que ela não permite que a integral de $|\psi|^2$ seja finita. Portanto

$$\psi(x) = Ay^m e^{-y^2/2} \quad y \rightarrow \infty \quad (6.130)$$

No limite $y \rightarrow 0$, temos

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + 2\epsilon\psi = 0 \quad (6.131)$$

cujas soluções é

$$\psi = A \cos(\sqrt{2\epsilon}y) + B \sin(\sqrt{2\epsilon}y) \quad (6.132)$$

que, consistentemente, no limite $y \rightarrow 0$ fica

$$\psi = A + cy + O(y^2) \quad (6.133)$$

Portanto, podemos propor uma solução geral da forma

$$\psi = u(y)e^{-y^2/2} \quad (6.134)$$

onde

$$u(y) = \begin{cases} y^m & y \rightarrow \infty \\ A + cy & y \rightarrow 0 \end{cases} \quad (6.135)$$

Note que a proposta $\psi = u(y)e^{-y^2/2}$ permite que, em princípio, tenhamos $u(y) = y^m e^{y^2}$ para $y \rightarrow \infty$, pois isso leva a $\psi = y^m e^{y^2/2}$, que também é solução formal da equação. Mas sabemos que essa solução não é fisicamente aceitável, e estamos descartando essa possibilidade.

Incluindo esse anatz, obtemos uma equação para $u(y)$:

$$\frac{d^2u}{dy^2} - 2y\frac{du}{dy} + (2\epsilon - 1)u = 0. \quad (6.136)$$

Assumindo para $u(y)$ uma solução em série de potências, temos:

$$u(y) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n \quad (6.137)$$

$$\rightarrow \frac{du}{dy} = \sum_{n=1}^{\infty} n C_n y^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} n C_n y^{n-1} \quad (\text{termo com } n=0 \text{ não adiciona nada}) \quad (6.138)$$

$$\rightarrow \frac{d^2u}{dy^2} = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) C_n y^{n-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) C_{k+2} y^k \quad (k = n-2) \quad (6.139)$$

e substituindo essa expansão na equação, obtemos

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1)y^n - \sum_{n=0}^{\infty} C_n 2n y^n + \sum_{n=0}^{\infty} C_n (2\epsilon - 1)y^n = 0 \quad (6.140)$$

$$\rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} [C_{n+2}(n+2)(n+1) - C_n(2n - 2\epsilon + 1)] y^n = 0 \quad (6.141)$$

A igualdade implica que o termo entre colchetes deve ser identicamente nulo para qualquer n , o que dá uma relação de recorrência para os coeficientes C_n :

$$C_{n+2} = \frac{2n - 2\epsilon + 1}{(n+2)(n+1)} C_n \quad (6.142)$$

Como a equação é de segunda ordem, temos duas constantes arbitrárias, C_0 e C_1 . Uma vez especificadas essas constantes, todas as outras são determinadas pela relação de recorrência Eq. 6.142. Portanto

$$\begin{aligned} u(y) &= C_0 + C_1 y + C_2 y^2 + C_3 y^3 + C_4 y^4 + C_5 y^5 + \dots \\ &= [C_0 + C_2 y^2 + C_4 y^4 \dots] + [C_1 y + C_3 y^3 + C_5 y^5 \dots] \\ &= C_0 \left[1 + \frac{C_2}{C_0} y^2 + \frac{C_4}{C_2} \frac{C_2}{C_0} y^4 \dots \right] + C_1 \left[y + \frac{C_3}{C_1} y^3 + \frac{C_5}{C_3} \frac{C_3}{C_1} y^5 \dots \right] \end{aligned} \quad (6.143)$$

Quando $n \rightarrow \infty$, temos

$$C_{n+2} \rightarrow \frac{2}{n} C_n \quad n \rightarrow \infty \quad (6.144)$$

Mas a série de $y^m e^{y^2}$ dá

$$y^m e^{y^2} = y^m \sum_k \frac{y^{2k}}{k!} = \sum_k \frac{1}{k!} y^{2k+m} = \sum_n \frac{1}{[(n-m)/2]!} y^n \quad (6.145)$$

onde mudamos $n = 2k + m$. Portanto

$$C_n = \frac{1}{[(n-m)/2]!} \quad (6.146)$$

e temos

$$\begin{aligned} \frac{C_{n+2}}{C_n} &= \frac{[(n-m)/2]!}{[(n+2-m)/2]!} = \frac{[(n-m)/2]!}{[(n+2-m)/2][(n+2-m)/2-1]!} \\ &= \frac{[(n-m)/2]!}{[(n+2-m)/2][(n-m)/2]!} = \frac{1}{(n-m+2)/2} \rightarrow \frac{2}{n} \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (6.147)$$

Portanto, a série de $u(y)$ cresce da mesma forma que $y^m e^{y^2}$, o que implica $\psi = u(y)e^{-y^2/2} \sim y^m e^{y^2/2}$, que é exatamente a solução que havíamos descartado anteriormente, por $|\psi|^2$ não integrar a valor finito! Mais uma vez precisamos descartar esta solução de alguma forma.

A única alternativa para que o comportamento no infinito não seja a de $u \sim y^m e^{y^2}$, mas sim de $u \sim y^m$ é que a série acima seja *truncada* em algum valor de $n = m$, i.e. $C_n = 0$ para algum $n = m$. Se isso ocorrer, pela Eq. 6.142 $C_{n+2} = 0$ e todos os coeficientes se anulam para $n > m$, ou seja, a série passa a ser um polinômio de ordem m e não uma exponencial.

Isso ocorre se

$$2n - 2\epsilon + 1 = 0 \quad \rightarrow \quad \epsilon = \frac{1}{2} + n \quad (6.148)$$

ou seja, como $\epsilon = E/\hbar\omega$, temos que a energia é *quantizada*:

$$\boxed{E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar\omega} \quad (6.149)$$

Já para as funções de onda temos que $u(y)$ será um polinômio de ordem n . Podemos dividir as soluções em:

1. $C_0 = 0 \quad \rightarrow \quad u(y) = C_1 y + C_3 y^3 + \dots + C_n y^n$, n ímpar
e $u(y=0) = 0$, i.e. $\psi(x=0) = 0$
2. $C_1 = 0 \quad \rightarrow \quad u(y) = C_0 + C_2 y^2 + \dots + C_n y^n$, n par
e $du/dy(y=0) = 0$, i.e. $d\psi/dx(x=0) = 0$

Para n par tomamos $C_1 = 0$, e para n ímpar $C_0 = 0$. Usando a relação,

$$C_{j+2} = \frac{2j+1-2\epsilon}{(j+2)(j+1)} C_j = \frac{2j+1-(2n+1)}{(j+2)(j+1)} C_j = \frac{2(j-n)}{(j+2)(j+1)} C_j \quad (6.150)$$

obtemos os seguintes polinômios:

- $n = 0 \rightarrow u(y) = C_0$
- $n = 1 \rightarrow u(y) = C_1 y$
- $n = 2 \rightarrow u(y) = C_0 + C_2 y^2 = C_0 - 2C_0 = C_0(1 - 2y^2)$
- $n = 3 \rightarrow u(y) = C_1 y + C_3 y^3 = C_1 y - \frac{2}{3} C_1 y^3 = C_1(y - \frac{2}{3} y^3)$

Essas soluções são proporcionais aos chamados *polinômios de Hermite* $H_n(y)$:

$$H_0(y) = 1 \quad (6.151)$$

$$H_1(y) = 2y \quad (6.152)$$

$$H_2(y) = -2(1 - 2y^2) \quad (6.153)$$

$$H_3(y) = -12\left(y - \frac{2}{3}y^3\right) \quad (6.154)$$

$$H_4(y) = 12\left(1 - 4y^2 + \frac{4}{3}y^4\right) \quad (6.155)$$

cujas propriedades matemáticas são bem conhecidas. Por exemplo, eles satisfazem a relação de recorrência

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n - 2nH_{n-1} \quad (6.156)$$

Portanto, as soluções ficam

$$\psi_n(y) = A_n H_n(y) e^{-y^2/2}, \quad y = \frac{x}{b} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$$

A constante A_n é tal que $\int |\psi_n(x)|^2 dx = 1$, de forma que a solução final fica

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4} H_n\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\right] \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (6.157)$$

As auto-funções do oscilador harmônico são mostradas para $n = 0, 1, 2, 3$ na Fig. 6.5.

6.8.1 Estado Fundamental

O caso $n = 0$ é possível e corresponde ao *estado fundamental* de mais baixa energia no oscilador

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (6.158)$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (6.159)$$

Ou seja, a energia mínima não é nula, diferentemente do caso clássico. Além disso, a função de onda é um pacote gaussiano com $\Delta x = \sqrt{\hbar/2m\omega}$.

6.8.2 Função de onda dos momentos

A função de onda dos momentos $\phi(p)$ pode ser obtida pelas $\psi(x)$ via transformada de Fourier, como mostrado anteriormente. Mas no caso do oscilador, existe uma maneira mais simples de obter o resultado. A energia do oscilador é

$$E = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 X^2}{2} \quad (6.160)$$

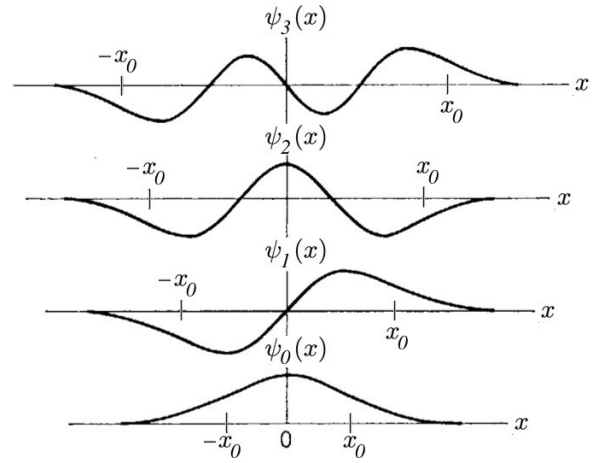


Figura 6.5: Auto-funções $\psi_n(x)$ do oscilador harmônico *quântico* para $n = 0, 1, 2, 3$. Os pontos $\pm x_0$ indicam o deslocamento máximo do oscilador *clássico*. Quanticamente, o caso $x > x_0$ é permitido, embora seja exponencialmente suprimido. (Eisberg)

Mas se mudarmos $X \rightarrow P'/m\omega$ e equivalentemente $P \rightarrow m\omega X'$, temos

$$\frac{P^2}{2m} = \frac{(m\omega X')^2}{2m} = \frac{m\omega^2 (X')^2}{2} \quad (6.161)$$

$$\frac{m\omega^2 X^2}{2} = \frac{(m\omega^2 (P'/m\omega))^2}{2} = \frac{(P')^2}{2m} \quad (6.162)$$

$$(6.163)$$

ou seja, o problema é totalmente equivalente ao original nessas novas variáveis. Assim, podemos obter a função de onda simplesmente mudando $x \rightarrow p/m\omega$ e normalizando apropriadamente. Por exemplo, para o estado fundamental, temos

$$\phi_0(p) = \left(\frac{1}{\pi \hbar m \omega} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{p^2}{2 \hbar m \omega} \right) \quad (6.164)$$

ou seja, $\Delta p = \sqrt{\hbar m \omega / 2}$. Portanto,

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} = \frac{\hbar}{2} \quad (6.165)$$

como esperado para o pacote gaussiano.

6.8.3 Relação com o caso clássico

No caso do oscilador clássico, o ponto x_0 de máxima deflexão do oscilador (onde a velocidade é nula), é dado por

$$E = \frac{mv^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \quad (6.166)$$

Desta relação, temos que a velocidade é dada por

$$v = \omega(x_0^2 - x^2)^{1/2} \quad (6.167)$$

E como $E = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega$, e $x^2 = b^2 y^2 = \hbar y^2 / m\omega$, temos

$$m\omega^2 x_0^2 = 2E = (2n+1)\hbar\omega \rightarrow x_0^2 = (2n+1) \frac{\hbar}{m\omega} \quad (6.168)$$

$$\rightarrow x_0 = \pm(2n+1)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \quad \text{ou} \quad y_0 = \pm(2n+1)^{1/2} \quad (6.169)$$

Na física clássica, a partícula *nunca* tem $x > x_0$, já que isso violaria a conservação de energia, mas na física quântica, pode ocorrer $x > x_0$. No estado fundamental, $x_0^2 = \hbar/m\omega$ e a densidade de probabilidade de encontrar a partícula com posição x é

$$\begin{aligned} P_0(x) &= |\psi_0(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar} \right) \\ &= \left(\frac{1}{\pi x_0^2} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{x^2}{x_0^2} \right) \end{aligned} \quad (6.170)$$

ou seja, a probabilidade de ter $x > x_0$ decai exponencialmente, como no tunelamento de uma barreira, mas não é nula.

Classicamente, a probabilidade $P_{\text{clas}}(x)$ de encontrar uma partícula em certa posição x é proporcional ao tempo que ela passa em x , i.e. é inversamente proporcional à velocidade da partícula naquele ponto:

$$P_{\text{clas}}(x) \propto \frac{1}{v(x)} = \frac{1}{\omega(x_0^2 - x^2)^{1/2}} \quad (6.171)$$

Note que, quanticamente, o estado fundamental tem comportamento exatamente oposto, i.e. maior probabilidade em $x = 0$ e não em $x = x_0$. Para $n \rightarrow \infty$, temos $x_0^2 = 2n\hbar/m\omega$ e

$$\begin{aligned} P_n(x) &\propto H_n^2 \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x \right] \exp \left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar} \right) \\ &\propto H_n^2 \left[\frac{\sqrt{2n} x}{x_0} \right] \exp \left(-\frac{2n x^2}{x_0^2} \right) \end{aligned} \quad (6.172)$$

e para $n \rightarrow \infty$, vemos que os polinômios de Hermite oscilam muito, e a probabilidade de que $x > x_0$ fica muito pequena devido ao termo $2n$ na supressão exponencial. Além disso o valor médio de $P_n(x)$, que é o que pode ser medido na prática, converge para o valor clássico da Eq. 6.171, como indicado na Fig. 6.6 para $n = 100$.

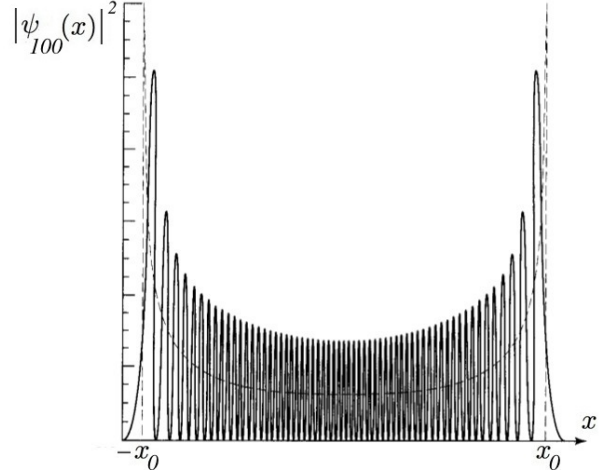


Figura 6.6: Probabilidade $P_{100} = |\psi_{100}|^2$ do oscilador para $n = 100$. A linha pontilhada indica o limite clássico da Eq. 6.171, para o qual o valor médio de $|\psi_n(x)|^2$ converge quando $n \rightarrow \infty$. (Griffiths)

É por isso que, em situações cotidianas, em que n de fato é muito grande, osciladores como pêndulos parecem ter as propriedades clássicas usuais, sem efeitos quânticos. Mas para osciladores atômicos, as propriedades quânticas são importantes e, por vezes, dominantes.

