

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, 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 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 promovidas a *operadores* X , P

$$X = x \quad (6.2)$$

$$P = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (6.3)$$

que atuam em uma função de onda

$$X\Psi = x\Psi \quad (6.4)$$

$$P\Psi = -i\hbar \frac{d\Psi}{dx} \quad (6.5)$$

A energia E também é promovida a um operador H . No caso comum em que a energia é dada pela energia cinética mais uma energia potencial, o operador H é dado pela mesma função clássica, mas promovendo x e p a operadores como acima:

$$H = H(X, P) = \frac{P^2}{2m} + U(X) \quad (6.6)$$

ou seja:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 + U(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \end{aligned} \quad (6.7)$$

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

$$H\Psi = E\Psi \quad (6.8)$$

6.2.1 Valores Médios

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

$$\langle x \rangle = \int x P(x) dx = \int x \psi^*(x) \psi(x) dx \quad (6.9)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 P(x) dx = \int x^2 \psi^*(x) \psi(x) dx \quad (6.10)$$

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 H definido. Por esse feito, Schrödinger ganharia o prêmio Nobel em 1933. A equação de Schrödinger é dada por

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = H\Psi(x, t)} \quad (\text{Eq. Schrödinger}) \quad (6.11)$$

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 H não depende do tempo. Podemos assumir que a função de onda se separa:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\psi_t(t) \quad (6.12)$$

a equação acima fica

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\psi(x)\psi_t(t)] &= H[\psi(x)\psi_t(t)] \\ \rightarrow i\hbar \psi(x) \frac{d\psi_t(t)}{dt} &= \psi_t(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) \right] \end{aligned} \quad (6.13)$$

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

$$i\hbar \frac{1}{\psi_t(t)} \frac{d\psi_t(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) \right] \quad (6.14)$$

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 . As equações ficam

$$i\hbar \frac{d\psi_t(t)}{dt} = E\psi_t(t) \quad (\text{Eq. Schrödinger dependente do tempo}) \quad (6.15)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{Eq. Schrödinger independente do tempo}) \quad (6.16)$$

A solução da primeira equação é dada trivialmente por

$$\boxed{\psi_t(t) = e^{-iEt/\hbar}} \quad (6.17)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + [U(x) - E]\psi = 0 \quad (6.18)$$

que pode ser escrita como

$$\boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi = 0} \quad (6.19)$$

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

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iE/\hbar} \quad (6.20)$$

$$\rightarrow \Psi^*(x, t) = \psi(x)^*e^{iE/\hbar} \quad (6.21)$$

e tem probabilidade

$$P(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = \psi(x)^*\psi(x) = |\psi(x)|^2 \quad (6.22)$$

ou seja, independente do tempo. Portanto, no caso em que a energia 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 ϕ e $d\phi/dx$ são sempre contínuas, exceto quando $U(x)$ for infinita, e neste caso $d\phi/dx$ poderá ser descontínua.

6.4 Partícula Livre

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

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (6.23)$$

cuja solução fica

$$\psi(x) = \phi_+ e^{ikx} + \phi_- e^{-ikx}, \quad \text{onde } k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6.24)$$

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

$$\Psi(x, t) = \phi_+ e^{i(kx - \omega t)} + \phi_- e^{-i(kx + \omega t)} \quad (6.25)$$

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ e } \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (6.26)$$

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.:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (6.27)$$

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

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_+(k_n) e^{ik_n x} + \sum_{n=0}^{\infty} \phi_-(k_n) e^{-ik_n x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) e^{ik_n x} \quad (6.28)$$

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

$$e^{ik_m x} \psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) e^{i(k_n - k_m)x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) e^{i2\pi(n-m)x/L} \quad (6.29)$$

$$\int_0^L dx e^{ik_m x} \psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) \int_0^L dx e^{i2\pi(n-m)x/L} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k_n) (L\delta_{nm}) \quad (6.30)$$

Ou seja,

$$\phi(k_m) = \frac{1}{L} \int_0^L dx e^{ik_m x} \psi(x) \quad (6.31)$$

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:

$$\psi(x) = \lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ \Delta k_n \rightarrow 0}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta n \phi(k_n) e^{ik_n x} = \lim_{\substack{L \rightarrow \infty \\ \Delta k_n \rightarrow 0}} \frac{L}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta k_n \phi(k_n) e^{ik_n x} \quad (6.32)$$

$$= \frac{L}{2\pi} \int dk \phi(k) e^{ikx} \quad (6.33)$$

Redefinindo $\phi(k) \rightarrow \sqrt{2\pi} \phi(k)/L$ (o que podíamos ter feito desde a Eq. 6.24), ficamos com

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \phi(k) e^{ikx} \quad (6.34)$$

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \phi(x) e^{-ikx} \quad (6.35)$$

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

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \phi(p) e^{ip/\hbar x} \quad (6.36)$$

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \phi(x) e^{-ip/\hbar x} \quad (6.37)$$

6.5 Partícula na Caixa

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

$$U(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 & \text{(Região I)} \\ 0 & 0 < x < L & \text{(Região II)} \\ \infty & x > L & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.38)$$

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 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

$$\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0 \quad (6.39)$$

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

$$\frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{II} = 0 \quad (6.40)$$

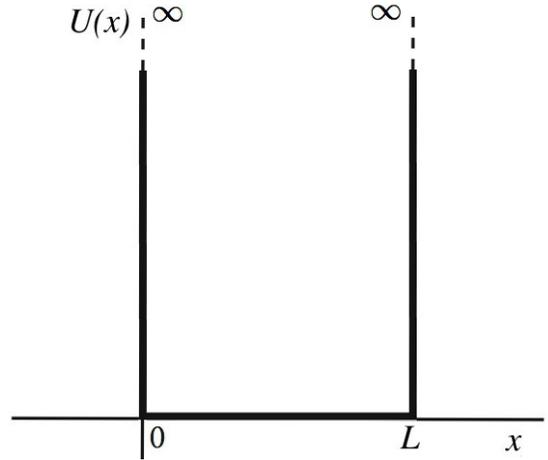


Figura 6.1: Partícula em uma caixa.

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

$$\psi_{II}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (6.41)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ ou } E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \quad (6.42)$$

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:

$$0 = \psi_I(0) = \psi_{II}(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = B \quad (6.43)$$

$$\rightarrow B = 0 \quad (6.44)$$

Portanto, temos que

$$\psi_{II}(x) = A \sin(kx) \quad (6.45)$$

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

$$\psi_{II}(L) = A \sin(kL) = \psi_{III}(L) = 0 \quad (6.46)$$

$$\rightarrow kL = n\pi \text{ com } n \text{ inteiro.} \quad (6.47)$$

ou seja, são apenas possíveis valores de k tais que $k = n\pi/L$. Pela Eq. 7.36, isso implica que as energia possíveis são dadas por:

$$E_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} \quad (6.48)$$

$$\rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (6.49)$$

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

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (6.50)$$

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. Esquemáticamente, 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 probabilidade em todo espaço deve ser 1, temos:

$$\int_0^\infty P(x)dx = \int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (6.51)$$

o que implica

$$\begin{aligned} 1 &= A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)}{2} dx \\ &= A^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right]_0^L \\ &= A^2 \frac{L}{2} \end{aligned} \quad (6.52)$$

e portanto

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (6.53)$$

Assim,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (6.54)$$

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

$$\Delta x \Delta p \approx \frac{\hbar\pi}{2} > \frac{\hbar}{2} \quad (6.55)$$

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

6.6 Barreira de Potencial e Tunelamento

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

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < -a & \text{(Região I)} \\ U_0 & -a < x < a & \text{(Região II)} \\ 0 & x > a & \text{(Região III)} \end{cases} \quad (6.56)$$

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 !

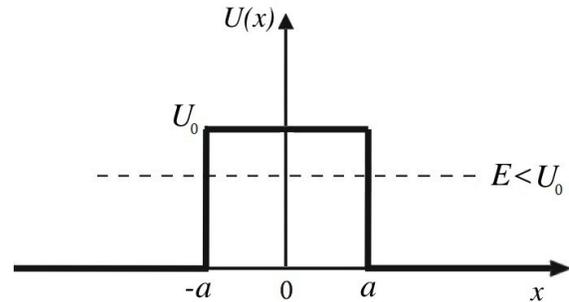


Figura 6.2: Barreira de potencial.

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 Schrodinger é dada por

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0 \quad (6.57)$$

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

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \rightarrow \text{Soluções : } e^{ikx}, e^{-ikx}, \text{ com } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{Regiões I e III}) \quad (6.58)$$

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

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = (k_0)^2\psi \rightarrow \text{Soluções : } e^{k_0x}, e^{-k_0x}, \text{ com } k_0^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \quad (\text{Região II}) \quad (6.59)$$

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

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < -a & (\text{Região I}) \\ Ce^{-k_0x} + De^{k_0x} & -a < x < a & (\text{Região II}) \\ Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} & x > a & (\text{Região III}) \end{cases} \quad (6.60)$$

e sua derivada é

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \begin{cases} ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx} & x < -a & (\text{Região I}) \\ -k_0Ce^{-k_0x} + k_0De^{k_0x} & -a < x < a & (\text{Região II}) \\ ikEe^{ikx} - ikFe^{-ikx} & x > a & (\text{Região III}) \end{cases} \quad (6.61)$$

Condições de contorno em $x = -a$:

$$\begin{aligned} \psi_I(-a) &= \psi_{II}(-a) \\ Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Ce^{k_0a} + De^{-k_0a} \quad \times (ik) \\ ik(Ae^{-ika} + Be^{ika}) &= ik(Ce^{k_0a} + De^{-k_0a}) \end{aligned} \quad (6.62)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_I}{dx}(-a) &= \frac{d\psi_{II}}{dx}(-a) \\ ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) &= -k_0(Ce^{k_0a} - De^{-k_0a}) \end{aligned} \quad (6.63)$$

Somando a Eq. 6.62 com a Eq. 6.63, temos

$$\begin{aligned} 2ikAe^{-ika} &= (ik - k_0)Ce^{k_0a} + (ik + k_0)Ee^{-k_0a} \\ \rightarrow A &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_0}{ik}\right) e^{k_0a+ika} C + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_0}{ik}\right) e^{-k_0a+ika} D \end{aligned} \quad (6.64)$$

Da Eq. 6.62, temos

$$\begin{aligned} Be^{ika} &= Ce^{k_0a} + De^{-k_0a} - Ae^{-ika} \\ &= Ce^{k_0a} + De^{-k_0a} - \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_0}{ik}\right) e^{k_0a} C + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_0}{ik}\right) e^{-k_0a} D \right] \\ \rightarrow B &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_0}{ik}\right) e^{k_0a-ika} C + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_0}{ik}\right) e^{-k_0a-ika} D \end{aligned} \quad (6.65)$$

Em forma matricial, temos

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) e^{k_0a+ika} & \left(1 - \frac{ik_0}{k}\right) e^{-k_0a+ika} \\ \left(1 - \frac{ik_0}{k}\right) e^{k_0a-ika} & \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) e^{-k_0a-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (6.66)$$

Similarmente, as condições de contorno em $x = a$ dão

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) e^{k_0a+ika} & \left(1 + \frac{ik}{k_0}\right) e^{k_0a-ika} \\ \left(1 + \frac{ik}{k_0}\right) e^{-k_0a+ika} & \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) e^{-k_0a-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (6.67)$$

Portanto, combinando os resultados, temos

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M_1 M_2 \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \quad (6.68)$$

onde

$$M_1 M_2 = \begin{pmatrix} [\cosh(2k_0a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0a)] e^{i2ka} & \frac{i\eta}{2} \sinh(2k_0a) \\ -\frac{i\eta}{2} \sinh(2k_0a) & [\cosh(2k_0a) - \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0a)] e^{-i2ka} \end{pmatrix} \quad (6.69)$$

onde

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \\ \eta &= \frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0} \end{aligned} \quad (6.70)$$

Note que

$$\eta^2 - \epsilon^2 = 4 \quad (6.71)$$

Vamos assumir que $G = 0$, caso que representa uma onda incidente da esquerda para a direita e transmitida à região II e III, onde se move apenas para a direita. Neste caso

$$A = \left[\cosh(2k_0a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0a) \right] e^{i2ka} F \quad (6.72)$$

e temos

$$\frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2k_0a) + \frac{i\epsilon}{2} \sinh(2k_0a)} \quad (6.73)$$

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

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{\cosh^2(2k_0a) + \frac{\epsilon^2}{4} \sinh^2(2k_0a)} \\ &= \left[(1 + \sinh^2(2k_0a)) + \frac{\epsilon^2}{4} \sinh^2(2k_0a) \right]^{-1} \\ &= \left[1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4} \right) \sinh^2(2k_0a) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (6.74)$$

Mas

$$\frac{4 + \epsilon^2}{4} = \frac{\eta^2}{4} = \frac{1}{4} \left(\frac{k_0^2 + k^2}{kk_0} \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{2mU_0/\hbar^2}{\sqrt{2mE/\hbar^2} \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}} \right)^2 = \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \quad (6.75)$$

Portanto

$$T = \left(1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sinh^2(2k_0a) \right)^{-1} \quad (6.76)$$

Para uma barreira muito alta $U_0 \gg E$, temos $(k_0a)^2 = 2m(U_0 - E)a^2/\hbar^2 \gg 1$, e temos

$$\sinh(2k_0a) \approx \frac{e^{2k_0a}}{2} \gg 1 \quad (6.77)$$

Portanto

$$\begin{aligned} T &\approx \left(\frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} e^{4k_0a} \right)^{-1} \\ &\rightarrow T \approx \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} e^{-4k_0a} \end{aligned} \quad (6.78)$$

o que indica que quando a barreira é muito alta, a transmissão é exponencialmente suprimida. Mas ela ainda acontece, e com um número grande de partículas, eventualmente uma chegará da região I à III, o que classicamente seria sempre impossível.

6.7 Oscilador Harmônico Simples

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

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (6.79)$$

e a Eq. de Schrödinger fica:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0 \quad (6.80)$$

ou

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi = 0 \quad (6.81)$$

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

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \left(\frac{2mEb^2}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2 b^4}{\hbar^2} y^2 \right) \psi = 0 \quad (6.82)$$

Portanto escolhamos

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad (6.83)$$

$$\epsilon = \frac{mEb^2}{\hbar^2} = \frac{E}{\hbar\omega} \quad (6.84)$$

e temos

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (2\epsilon - y^2) \psi = 0 \quad (6.85)$$

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

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} - y^2\psi = 0 \quad (6.86)$$

cuja solução neste limite $y \rightarrow \infty$ é:

$$\psi = Ay^m e^{\pm y^2/2}, \quad (6.87)$$

como podemos checar:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dy} &= Amy^{m-1} e^{\pm y^2/2} \pm Ay^{m+1} e^{\pm y^2/2} \quad (6.88) \\ \frac{d^2\psi}{dy^2} &= Am(m-1)y^{m-2} e^{\pm y^2/2} \pm Amy^m e^{\pm y^2/2} \pm A(m+1)y^m e^{\pm y^2/2} + Ay^{m+2} e^{\pm y^2/2} \\ &= Am(m-1)y^{m-2} e^{\pm y^2/2} \pm A(2m+1)my^m e^{\pm y^2/2} + Ay^{m+2} e^{\pm y^2/2} \\ &= Ay^{m+2} e^{\pm y^2/2} \left[1 \pm \frac{2m+1}{y^2} + \frac{m(m-1)}{y^4} \right] \quad y \rightarrow \infty \\ \longrightarrow Ay^{m+2} e^{\pm y^2/2} &= y^2\psi \quad (6.89) \end{aligned}$$

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

$$\psi(x) = Ay^m e^{-y^2/2} \quad y \rightarrow \infty \quad (6.90)$$

No limite $y \rightarrow 0$, temos

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + 2\epsilon\psi = 0 \quad (6.91)$$

cuja solução é

$$\psi = A \cos(\sqrt{2\epsilon}y) + B \sin(\sqrt{2\epsilon}y) \quad (6.92)$$

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

$$\psi = A + cy + O(y^2) \quad (6.93)$$

Portanto, podemos propôr uma solução geral da forma

$$\psi = u(y)e^{-y^2/2} \quad (6.94)$$

onde

$$u(y) = \begin{cases} y^m & y \rightarrow \infty \\ A + cy & y \rightarrow 0 \end{cases} \quad (6.95)$$

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 *ansatz*, obtemos uma equação para $u(y)$:

$$\frac{d^2u}{dy^2} - 2y\frac{du}{dy} + (2\epsilon - 1)u = 0. \quad (6.96)$$

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

$$u(y) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n y^n \quad (6.97)$$

$$\rightarrow \frac{du}{dy} = \sum_{n=1}^{\infty} n C_n y^{n-1} \quad (6.98)$$

$$\rightarrow \frac{d^2u}{dy^2} = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) C_n y^{n-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) C_{k+2} y^k \quad (k = n-2) \quad (6.99)$$

e substituindo essa expansão na equação, obtemos

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_{n+2}(n+2)(n+1)y^n - \sum_{n=0}^{\infty} C_n 2ny^n + \sum_{n=0}^{\infty} C_n(2\epsilon - 1)y^n = 0 \quad (6.100)$$

$$\rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} [C_{n+2}(n+2)(n+1) - C_n(2n - 2\epsilon + 1)] y^n = 0 \quad (6.101)$$

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 :

$$C_{n+2} = \frac{2n - 2\epsilon + 1}{(n+2)(n+1)} C_n \quad (6.102)$$

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. 6.102. Portanto

$$\begin{aligned} u(y) &= C_0 + C_1 y + C_2 y^2 + C_3 y^3 + C_4 y^4 + C_5 y^5 + \dots \\ &= [C_0 + C_2 y^2 + C_4 y^4 \dots] + [C_1 y + C_3 y^3 + C_5 y^5 \dots] \\ &= C_0 \left[1 + \frac{C_2}{C_0} y^2 + \frac{C_4}{C_2} \frac{C_2}{C_0} y^4 \dots \right] + C_1 \left[y + \frac{C_3}{C_1} y^3 + \frac{C_5}{C_3} \frac{C_3}{C_1} y^5 \dots \right] \end{aligned} \quad (6.103)$$

Quando $n \rightarrow \infty$, temos

$$C_{n+2} \rightarrow \frac{2}{n} C_n \quad n \rightarrow \infty \quad (6.104)$$

Mas a série de $y^m e^{y^2}$ dá

$$y^m e^{y^2} = y^m \sum_k \frac{y^{2k}}{k!} = \sum_k \frac{1}{k!} y^{2k+m} = \sum_n \frac{1}{[(n-m)/2]!} y^n \quad (6.105)$$

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

$$C_n = \frac{1}{[(n-m)/2]!} \quad (6.106)$$

e temos

$$\begin{aligned} \frac{C_{n+2}}{C_n} &= \frac{[(n-m)/2]!}{[(n+2-m)/2]!} = \frac{[(n-m)/2]!}{[(n+2-m)/2][(n+2-m)/2-1]!} \\ &= \frac{[(n-m)/2]!}{[(n+2-m)/2][(n-m)/2]!} = \frac{1}{(n-m+2)/2} \rightarrow \frac{2}{n} \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad (6.107)$$

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. 6.102 $C_{n+2} = 0$ 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

$$2n - 2\epsilon + 1 = 0 \quad \rightarrow \quad \epsilon = \frac{1}{2} + n \quad (6.108)$$

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

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n \right) h\omega \quad (6.109)$$

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

$$1. C_0 = 0 \quad \longrightarrow \quad u(y) = C_1y + C_3y^3 + \dots + C_ny^n, \quad n \text{ ímpar}$$

e $u(y=0) = 0$, i.e. $\psi(x=0) = 0$

$$2. C_1 = 0 \quad \longrightarrow \quad u(y) = C_0 + C_2y^2 + \dots + C_ny^n, \quad n \text{ par}$$

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,

$$C_{j+2} = \frac{2j+1-2\epsilon}{(j+2)(j+1)}C_j = \frac{2j+1-(2n+1)}{(j+2)(j+1)}C_j = \frac{2(j-n)}{(j+2)(j+1)}C_j \quad (6.110)$$

obtemos os seguintes polinômios:

- $n = 0 \rightarrow u(y) = C_0$
- $n = 1 \rightarrow u(y) = C_1y$
- $n = 2 \rightarrow u(y) = C_0 + C_2y^2 = C_0 - 2C_0 = C_0(1 - 2y^2)$
- $n = 3 \rightarrow u(y) = C_1y + C_3y^3 = C_1y - \frac{2}{3}C_1y^3 = C_1(y - \frac{2}{3}y^3)$

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

$$H_0(y) = 1 \quad (6.111)$$

$$H_1(y) = 2y \quad (6.112)$$

$$H_2(y) = -2(1 - 2y^2) \quad (6.113)$$

$$H_3(y) = -12(y - \frac{2}{3}y^3) \quad (6.114)$$

$$H_4(y) = 12(1 - 4y^2 + \frac{4}{3}y^4) \quad (6.115)$$

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

$$H_{n+1}(y) = 2yH_n - 2nH_{n-1} \quad (6.116)$$

Portanto, as soluções ficam

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

Figura 6.3: 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)

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

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar 2^{2n}(n!)^2}\right)^{1/4} H_n \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x \right] \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (6.117)$$

As auto-funções do oscilador harmônico são mostradas para $n = 0, 1, 2, 3$ na Fig. 6.3.

6.7.1 Estado Fundamental

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

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (6.118)$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \quad (6.119)$$

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

6.7.2 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

$$E = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 X^2}{2} \quad (6.120)$$

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

$$\frac{P^2}{2m} = \frac{(m\omega X')^2}{2m} = \frac{m\omega^2 (X')^2}{2} \quad (6.121)$$

$$\frac{m\omega^2 X^2}{2} = \frac{(m\omega^2 (P'/m\omega))^2}{2} = \frac{(P')^2}{2m} \quad (6.122)$$

$$(6.123)$$

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

$$\phi_0(p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar m\omega}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}\right) \quad (6.124)$$

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

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\hbar m\omega} = \frac{\hbar}{2} \quad (6.125)$$

como esperado para o pacote gaussiano.

6.7.3 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

$$E = \frac{mv^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \quad (6.126)$$

Desta relação, temos que a velocidade é dada por

$$v = \omega(x_0^2 - x^2)^{1/2} \quad (6.127)$$

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

$$m\omega^2 x_0^2 = 2E = (2n + 1)\hbar\omega \rightarrow x_0^2 = (2n + 1)\frac{\hbar}{m\omega} \quad (6.128)$$

$$\rightarrow x_0 = \pm(2n + 1)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \quad \text{ou} \quad y_0 = \pm(2n + 1)^{1/2} \quad (6.129)$$

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, $x_0 = \hbar/m\omega$ e a probabilidade de encontrar a partícula com posição x é

$$\begin{aligned} P_0(x) &= |\psi_0(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\pi x_0^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) \end{aligned} \quad (6.130)$$

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:

$$P_{\text{clas}}(x) \propto \frac{1}{v(x)} = \frac{1}{\omega(x_0 - x)^2} \quad (6.131)$$

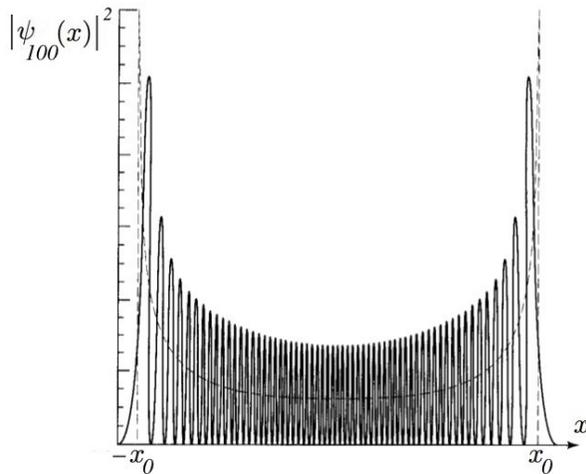


Figura 6.4: Probabilidade $P_{100} = |\psi_{100}|^2$ do oscilador para $n = 100$. A linha pontilhada indica o limite clássico da Eq. 6.131, para o qual o valor médio de $|\psi_n(x)|^2$ converge quando $n \rightarrow \infty$. (Griffiths)

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

$$\begin{aligned} P_n(x) &\propto H_n^2 \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x \right] \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right) \\ &\propto H_n^2 \left[\frac{\sqrt{2n} x}{x_0} \right] \exp\left(-\frac{2n x^2}{x_0^2}\right) \end{aligned} \quad (6.132)$$

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. 6.131, como indicado na Fig. 6.4 para $n = 100$.

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.