A Evolução Temporal do Pacote de Onda

- Na aula passada escrevemos que um pacote de ondas unidimensional (uma única dimensão não é uma restrição relevante e facilita) é dado por:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(k.x-\omega t)} dk$$

Uma dada onda plana do pacote se propaga com velocidade v_ϕ, conhecida por *velocidade de fase*, e obtida pela condição:

$$kx - \omega(k)t = \text{cte} \Rightarrow x = \frac{\text{cte}}{k} + \frac{\omega(k)}{k} t$$

$v_\phi \equiv$ velocidade de fase

Lembrando que: $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{\hbar 2m} = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow v_\phi = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} \rightarrow \frac{1}{2} v_{\text{clássica}}$

- Note que o pacote dispersa, pois ondas com diferentes valores de k tem diferentes velocidades $v_\phi(k)$.
- No caso de ondas eletromagnéticas no vácuo, v_ϕ independe de k e todos os $v'_\phi s$ são iguais à c, ou seja, todas as ondas que fazem parte do pacote se movem com mesma velocidade (e o pacote não muda de forma). Em um meio dispersivo, isto não seria verdade, pois $v_\phi(k) = \frac{c}{n(k)}$, onde n é o índice de refração.

Cada k tem uma velocidade ➔ pacote dispersa

Como medir a velocidade do pacote?

- Voltemos ao exemplo onde somamos apenas três ondas. Como $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$, é possível supor que $k_0 + \dfrac{\Delta k}{2} \rightarrow \omega_0 + \dfrac{\Delta \omega}{2}$, e escrever o pacote na forma:

$$\Psi(x,t) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\{e^{i(k_0x-\omega_0 t)} + \frac{1}{2}e^{i((k_0+\frac{\Delta k}{2})x-(\omega_0+\frac{\Delta\omega}{2})t)} + \frac{1}{2}e^{i((k_0-\frac{\Delta k}{2})x-(\omega_0-\frac{\Delta\omega}{2})t)}\}$$

$$= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}e^{i(k_0x-\omega_0 t)}\{1 + \frac{1}{2}e^{i(+\frac{\Delta k}{2}x-\frac{\Delta\omega}{2}t)} + \frac{1}{2}e^{i(-\frac{\Delta k}{2}x+\frac{\Delta\omega}{2}t)}\}$$

$$= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}e^{i(k_0x-\omega_0 t)}\{1 + \cos(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t)\}$$

tome variações infinitesimais

- Note que o máximo desta função (em x_m) ocorre quanto o argumento do cosseno é nulo. O que permite concluir $(\frac{\Delta k}{2}x_m - \frac{\Delta\omega}{2}t) = 0 \rightarrow x_m = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}t \Rightarrow \boxed{v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{p}{m}}.$
- Note que não se trata da média (ponderada) das velocidades, que seria dada por: $\bar{v}_\phi = \left(\frac{\omega_0}{k_0} + \frac{1}{4}(\frac{\omega_0+\Delta\omega/2}{k_0+\Delta k/2}) + \frac{1}{4}(\frac{\omega_0-\Delta\omega/2}{k_0-\Delta k/2})\right)/\left(\sqrt{1+1/4+1/4}\right)^2 =$

$$= \frac{\hbar}{2m}\left(k_0 + \frac{1}{4}(k_0+\Delta k/2) + \frac{1}{4}(k_0-\Delta k/2)\right)/\left(\sqrt{1+1/4+1/4}\right)^2 =$$

$$= \frac{\hbar}{2m}k_0 = \frac{\omega_0}{k_0} = \frac{p}{2m} = \frac{v_g}{2}$$

v_g coincide com a velocidade clássica

$v_g \neq \bar{v}_\phi$. A quantidade v_g é a chamada velocidade de grupo do pacote.

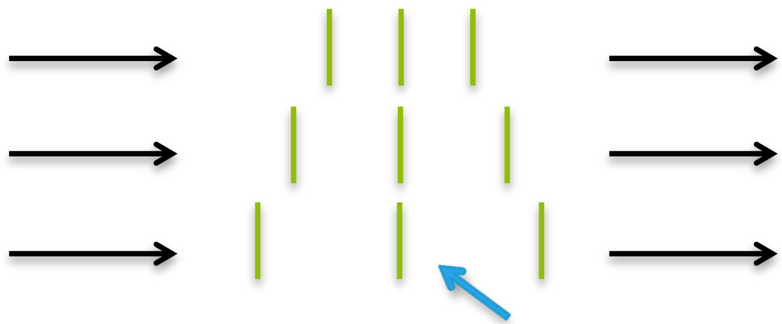
Ainda sobre a velocidade do pacote com 3 ondas

- Origem física da diferença entre velocidade de fase e velocidade de grupo.

$$k_0 + \frac{\Delta k}{2} \rightarrow (\lambda < \lambda_0) \qquad\qquad v_\phi > v_\phi^{(0)}$$

$$k_0 \rightarrow (\lambda = \lambda_0) \qquad\qquad v_\phi = v_\phi^{(0)}$$

$$k_0 - \frac{\Delta k}{2} \rightarrow (\lambda > \lambda_0) \qquad\qquad v_\phi < v_\phi^{(0)}$$



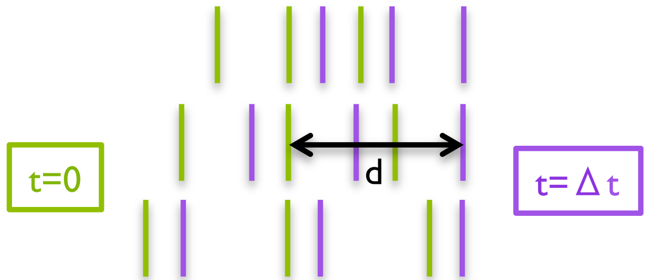
- Note que em $t = 0,$ os 3 máximos coincidem em $x = x_m = 0$. As ondas têm diferentes velocidades. Quando vai haver a próxima coincidência?
- Uma vez que v_ϕ aumenta com k (pois, $v_\phi = \dfrac{\hbar k}{2m}$), o máximo à direita da onda $k_0 + \dfrac{\Delta k}{2}$ alcançará o máximo da onda k_0 que por sua vez, alcançará o máximo da onda $k_0 - \dfrac{\Delta k}{2}$. A coincidência será tripla novamente, pois as velocidades relativas ($v_{\text{rel}} = \dfrac{\hbar \Delta k}{4m} = \dfrac{\omega_0 + \Delta\omega/2}{k_0 + \Delta k/2} - \dfrac{\omega_0}{k_0}$) são iguais.
- Considere $\Delta t \equiv$ o tempo necessário para a nova coincidência. Ele pode ser calculado pela distância entre as frentes à direita da primeira coincidência, dividido pela velocidade relativa, $\Delta t = \left(\dfrac{2\pi}{k_0} - \dfrac{2\pi}{k_0 + \frac{\Delta k}{2}}\right) \div v_{\text{rel}}$

Ainda sobre a velocidade do pacote com 3 ondas

- A distância entre dois máximos pode ser escrita por

$$d=\begin{cases}\frac{2\pi}{k_0}+\frac{\omega}{k_0}\Delta t\\[2ex] \frac{2\pi}{k_0+\Delta k/2}+\left(\frac{\omega+\Delta\omega/2}{k_0+\Delta k/2}\right)\Delta t\\[2ex] \frac{2\pi}{k_0-\Delta k/2}+\left(\frac{\omega-\Delta\omega/2}{k_0-\Delta k/2}\right)\Delta t\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\text{use qualquer uma}\\ \text{das definições de } d\\ \text{para obter}\end{cases}\Rightarrow v_g=\frac{d}{\Delta t}$$

- Escolhendo a primeira expressão para d, podemos escrever a velocidade de grupo por $v_g=\dfrac{\frac{2\pi}{k_0}+\frac{\omega}{k_0}\Delta t}{\Delta t}=\dfrac{2\pi/k_0}{\Delta t}+\dfrac{\omega_0}{k_0}$.



- Das definições de Δt e $v_{\rm rel}$ do slide anterior, escrevemos

$$\Delta t=2\pi\frac{\Delta k/2}{k_0(k_0+\Delta k/2)}\div\frac{k_0(\omega_0+\Delta\omega/2)-\omega_0(k_0+\Delta k/2)}{k_0(k_0+\Delta k/2)}=2\pi\frac{\Delta k/2}{k_0\Delta\omega/2-\omega_0\Delta k/2},$$

podemos escrever $v_g=\dfrac{k_0\Delta\omega/2-\omega_0\Delta k/2}{k_0\Delta k/2}+\dfrac{\omega_0}{k_0}=\dfrac{\Delta\omega}{\Delta k}$, conforme slide 2.

- No limite infinitesimal, isso corresponde à $v_g=\dfrac{d\omega}{dk}=\dfrac{d}{dk}\dfrac{\hbar k^2}{2m}=\dfrac{\hbar k}{m}$.

A velocidade do centro do pacote é igual à velocidade da partícula clássica!

Instituto de Física Gleb Wataghin

A velocidade de grupo segundo a condição estacionária

- Para aplicar a condição estacionária no pacote, tome

$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(kx-\omega t)} dk$ e escreva $g(k)$ na forma

$g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)} \Rightarrow$ isso vale para $\forall$ número complexo.

Isso permite re-escrever o pacote na forma:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int |g(k)| e^{i(\alpha(k)+kx-\omega t)} dk$$

- A condição estacionária é obtida fazendo a primeira derivada da fase (argumento complexo da exponencial) com respeito à k igual à zero em k_0, centro de $|g(k)|$. Conforme já argumentamos, isso equivale a pedir que a primeira contribuição diferente de zero seja quadrática em $k - k_0$, o que faz ela contribuir com o mesmo sinal antes e depois de k_0.

- Assim, a condição estacionária é $\frac{d}{dk}(\alpha(k) + kx - \omega t)|_{k=k_0} = 0$ e isso implica em: $\frac{d}{dk}\alpha(k)|_{k=k_0} + x_m - \left(\frac{d}{dk}\omega(k)|_{k=k_0}\right)t = 0 \Rightarrow$ solução clássica de um ponto x_m que realiza movimento uniforme na direção x, com $\begin{cases} x_m(0) = -\frac{d\alpha}{dk}|_{k=k_0} \\ v_g = \frac{d\omega}{dk}|_{k=k_0}. \end{cases}$

$\boxed{x_m(t) \text{ é o centro do pacote que viaja com velocidade de grupo } v_g}$

Partícula em um potencial escalar independente do tempo

- Isto é, a partícula está em um ambiente onde $V(\vec{r},t) = V(\vec{r})$.
- Sabemos que ondas associadas à partícula respeitam as relações de de Broglie:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{p/\hbar} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}$$

- O texto diz: *Se λ for muito menor que os comprimentos típicos do movimento da partícula, o movimento é clássico.* Vamos explorar esse tema.
  - Efeitos quânticos aparecem quando potencial $V(\vec{r},t)$ varia apreciavelmente em um comprimento de onda. Isso é o mesmo que pedir que diferentes pedaços de um pacote de onda possam sentir diferentes trechos do potencial e a interferência em possíveis encontros dessas partes da onda pode gerar efeitos quânticos mensuráveis.
  - Com isso em mente, estudar potenciais tipo caixa é importante, pois são descontínuos (variam com certeza dentro de um comprimento de onda) e sempre produzem efeitos quânticos.
  - Uma questão importante: como decidir se um sistema é quântico? Quando usar a equação de Schrödinger em detrimento da de Newton? Afinal de contas sabemos que a equação de Newton funciona muito bem para sistemas macroscópicos e de baixas velocidade ($v << c$).

Início de uma discussão que estará presente em várias aulas!

Partícula em um potencial escalar independente do tempo

- *Separação de variáveis da equação de Schrödinger e estados estacionários.*

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\,\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)$$

O que são estados estacionários?

- Para obtê-los, suponha que seja possível escrever: $\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\chi(t)$.
- Hipótese razoável, considerando que os operadores $\dfrac{\partial}{\partial t}$, $\triangle$, e $V(\vec{r})$ dependem apenas de uma das variáveis $\vec{r}$ ou t, indicando um desacoplamento entre elas.
- Insira essa forma na equação acima, para obter

$$i\hbar\varphi(\vec{r})\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi(t)\triangle\,\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r})\chi(t)$$

e divida essa expressão por $\varphi(\vec{r})\chi(t)$

$$\underbrace{i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{\partial}{\partial t}\chi(t)}_{\substack{\text{dependência}\\ \text{só em } t}} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(\vec{r})}\triangle\,\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})}_{\substack{\text{dependência}\\ \text{só em } \vec{r}}}$$

- Como $\vec{r}$ e t são variáveis independentes, essa equação só será satisfeita se os dois lados forem iguais à uma constante, escolhida $\hbar\omega$.

Partícula em um potencial escalar independente do tempo

- *Continuação: Separação de variáveis ... e estados estacionários.*
  - Do lado esquerdo, obtemos:

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)}\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = \hbar\omega \;\Rightarrow\; \frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = -i\omega\chi(t) \;\therefore\; \chi(t) = Ae^{-i\omega t}$$

Note que podemos ignorar A e deixar a normalização para $\varphi(\vec{r})$.

  - Do lado direito, obtemos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(\vec{r})} \triangle\, \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = \hbar\omega \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle\, \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = \hbar\omega\varphi(\vec{r})$$

  - Desta forma, a solução estacionária da Equação de Schrödinger fica dada por $\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})e^{-i\omega t}$.
  - Note que em uma função estacionária, só aparece uma frequência angular e, portanto, uma energia $E = \hbar\omega$ bem definida.
  - Note que $|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2 \Rightarrow \begin{cases}\text{probabilidade independente do tempo,}\\ \text{o que justifica o termo “estado estacionário”}\end{cases}$
  - A equação de autovalor de Schrödinger: $H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$

com $\begin{cases} H = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\vec{r}) \Rightarrow \text{operador linear } H(\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2) = \lambda_1 H\varphi_1 + \lambda_2 H\varphi_2; \\ \varphi \equiv \text{ auto-função;} \\ E \equiv \text{auto-valor} \Rightarrow \text{quantiza se } \varphi \rightarrow \text{quadraticamente integrável.} \end{cases}$

Superposição de Ondas Estacionárias

- Suponha que as soluções de $H\varphi_n(\vec{r}) = E_n\varphi_n(\vec{r})$ sejam conhecidas.

Vimos que
$$\begin{cases} (1)\ \Psi_n(\vec{r},t) = \varphi_n(\vec{r})e^{-iE_nt/\hbar} \text{ é solução da Eq. de Schrödinger dependente do tempo.} \\ (2)\ \Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n\Psi_n(\vec{r},t) = \sum_n c_n\varphi_n(\vec{r})e^{-iE_nt/\hbar} \text{ também é solução, pois a equação é linear.} \end{cases}$$

∘ Note que c_n são constantes arbitrárias e podem ser complexas.

∘ Note que $\Psi(\vec{r},0) = \sum_n c_n\varphi_n(\vec{r}),$ e que a condição inicial (supostamente conhecida) de $\Psi(\vec{r},t)$ no instante $t=0$ determina $\{c_n\}$.

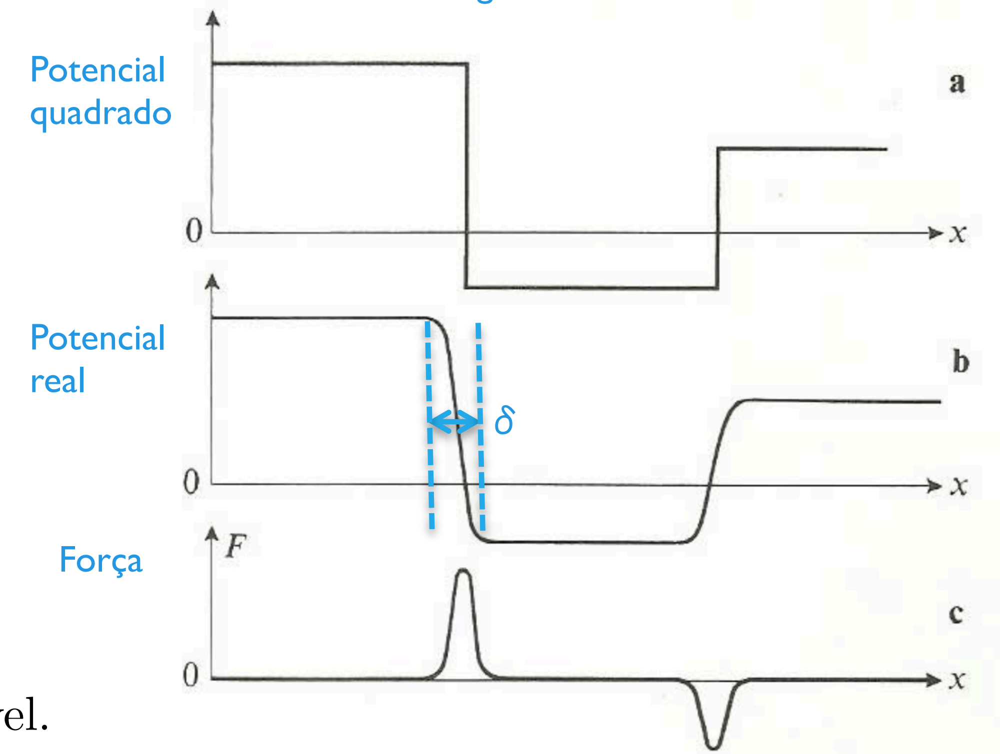
∘ Note que $\Phi(\vec{r}) = \sum_m c_m\varphi_m(\vec{r})$ não é solução de $H\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r})$ se para diferentes valores de $m, E_m \neq E$. De fato, basta que os E_m sejam distintos para m distintos para que $\Phi(\vec{r})$ não seja solução da equação de Schrödinger independente do tempo. *Verifique isso, substituindo $\Phi(\vec{r})$ na equação.*

- Um pacote construído com soluções estacionárias é solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. O pacote estudado de ondas planas é só um caso particular!

Potencial *quadrado* unidimensional. Um estudo qualitativo.

- Suponha $\lambda = \frac{h}{p}$, o comprimento de onda de de Broglie.
- A troca da Fig. b pela Fig. a é razoável, se $\delta << \lambda$.
- Se aumentar a energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, com $k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \lambda$ diminui e a troca deixa de ser razoável.
- No potencial da Fig. a, onde $\delta = 0$, o potencial vai variar, dentro de um comprimento de onda, para qualquer que seja a energia. *Efeitos quânticos estarão sempre presentes.* Para o potencial da Fig. b, isso pode não ocorrer para altas energias. Exploraremos esse assunto com mais cuidado nas próximas aulas.

Figure 7 do livro texto



Potencial quadrado da Fig. a que representa o potencial real da Fig. b, o qual produz uma força dada pela Fig. c.

Potencial *quadrado* unidimensional. Um estudo qualitativo.

- Comportamento de $\varphi(x)$ na região de descontinuidade do potencial (ver figura do slide anterior).

  Em geral, para o potencial quadrado, $\varphi(x)$ e $\frac{d\varphi}{dx}(x)$ são contínuos e somente a segunda derivada é descontínua em x_1 (posição da descontinuidade do potencial). Isso porque a equação de Schrödinger precisa ser satisfeita em todos os pontos e a descontinuidade do potencial deve ser compensada pela descontinuidade da derivada segunda de $\varphi(x)$. Isto é:

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x)}+\underbrace{V(x)\varphi(x)}=\underbrace{E\varphi(x)}$$

descontínuas em x_1 contínua em x_1

  Para que $\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x)$ seja descontínua em x_1, é preciso que $\frac{d\varphi}{dx}(x)$ seja contínua, embora "bicuda" (derivada descontínua). Note que esse argumento não vale para $V(x) \propto \delta(x-x_1)$. Neste caso, $\frac{d\varphi}{dx}(x)$ precisa ser descontínua para se obter um infinito na derivada segunda e compensar o infinito do potencial em x_1.

- Analise se $\frac{d\varphi}{dx}(x_1+\eta)-\frac{d\varphi}{dx}(x_1-\eta)=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_1-\eta}^{x_1+\eta}[V(x)-E]\varphi(x)dx=0.$

Analogia com a ótica

- Considere os estados estacionários em um potencial quadrado unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

ou ainda

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

- A idéia é comparar esta equação com a equação de onda (obtida das equações de Maxwell na ausência de cargas e correntes):

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{n^2\Omega^2}{c^2}\right]E(x) = 0 \text{ com } \begin{cases} \vec{E}(\vec{r},t) = \vec{e}E(x)e^{-i\Omega t} \rightarrow \begin{cases}\text{embora na direção } \vec{e} \\ \text{propaga na direção } \hat{x}\end{cases} \\ \vec{e}.\hat{x} = 0 \rightarrow \text{são ortogonais} \\ \\ n(\vec{r},t) = n = \text{cte} \rightarrow \text{ meio transparente} \end{cases}$$

- Nossa analogia leva à $\dfrac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) = \dfrac{n^2\Omega^2}{c^2}$ onde as funções $\varphi(x)$ e $E(x)$ precisam satisfazer as mesmas condições de continuidade nas descontinuidades do potencial.

$$n(\Omega) = \frac{1}{\hbar\Omega}\sqrt{2mc^2(E - V)}\begin{cases}\text{relação entre os parâmetros} \\ \text{óticos e mecânicos.}\end{cases}$$

Analogia ótica: barreiras e poços de potencial

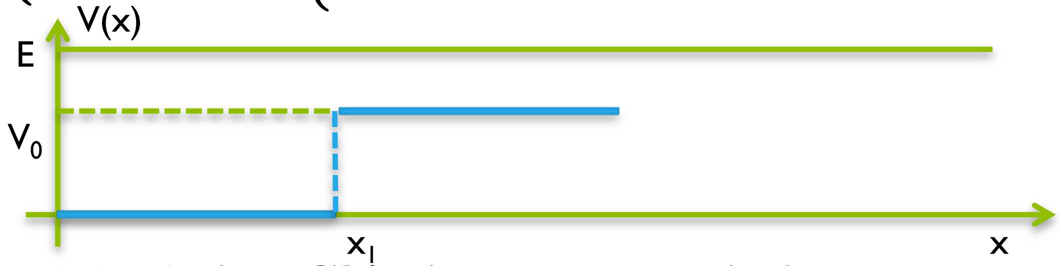
- Soluções de

$$[\frac{d^2}{dx^2}+\frac{n^2\Omega^2}{c^2}]E(x)=0 \text{ com } n(\Omega)=\frac{1}{\hbar\Omega}\sqrt{2mc^2(E-V)}$$

- Observe que

$$\begin{cases} \text{para } E>V \begin{cases} \text{meio transparente, pois } n(\Omega) \text{ é real} \\ n^2>0 \Rightarrow \text{ soluções do tipo } e^{\pm ikx}. \end{cases} \\ \\ \text{para } E<V \begin{cases} \text{meio opaco, pois } n(\Omega) \text{ é imaginário puro} \\ n^2<0 \Rightarrow \text{ soluções do tipo } e^{\pm \rho x}. \end{cases} \end{cases}$$

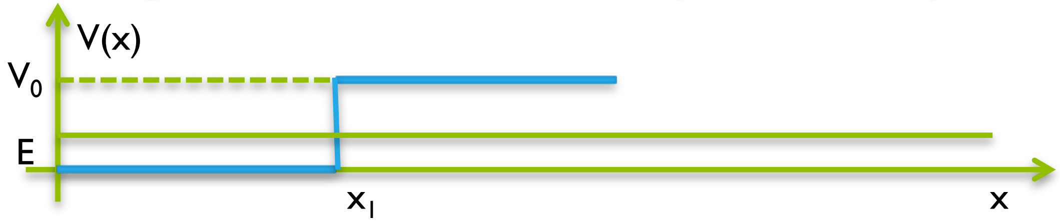
- Exemplo 1:



Se $E > V_0$

1) Na **Mecânica Clássica**: uma partícula encontra esse potencial e continua com menor velocidade.
2) Na **Ótica**: a onda se propaga em um meio cujo índice de refração é $n_1=\frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2mE}$, encontra em x_1 uma descontinuidade, com $n_2=\frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2m(E-V)}$ e se divide em duas ondas: uma transmitida e outra refletida.
3) Na **Mecânica Quântica**: probabilidade P de ser refletida e de $1-P$ de passar.

Analogia ótica: barreiras e poços de potencial

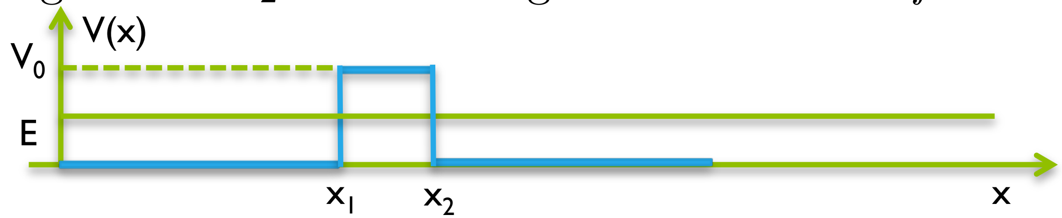


Se $E < V_0$

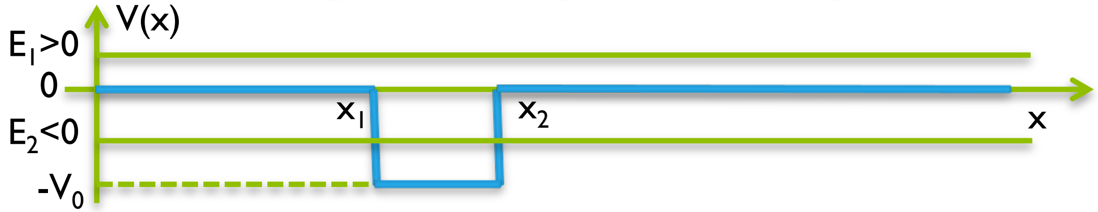
1) Na **Mecânica Clássica**: uma partícula encontra esse potencial e bate e volta com a mesma velocidade.
2) Na **Ótica**: a onda se propaga em um meio cujo índice de refração é $n_1 = \frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2mE}$, encontra em x_1 uma descontinuidade, com $n_2 = \frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2m(E-V)}$, um número imaginário puro, e se divide em duas ondas: uma desaparece exponencialmente e outra é refletida.
3) Na **Mecânica Quântica**: a partícula também volta, no entanto admite-se uma probabilidade diferente de zero de encontrar a partícula em $x > x_1$.

- Esse último aspecto se torna mais interessante no caso da figura abaixo.

Para $x > x_1$, temos $e^{-\rho x}$. Se $|x_2 - x_1|$ não for $>> \dfrac{1}{\rho} \Rightarrow$ parte da onda passa para a região $x > x_2$. Isso dá origem ao chamado *efeito túnel.*



Analogia ótica: potencial quadrado



$-V_0 < E_2 < 0$:

1) Na **Mecânica Clássica**: uma partícula oscila entre x_1 e x_2 com energia cinética $E_k = E_2 + V_0$

2) Na **Ótica** : $\begin{cases} x < x_1 \Rightarrow n_1 = \text{imaginário puro} \\ x < x_2 \Rightarrow n_3 = \text{imaginário puro} \\ x_1 < x < x_2 \Rightarrow n_2 = \text{real} \end{cases}$

onda oscila nesta última região (com certos modos vibracionais - modos normais). De outra forma as ondas incidentes e refletidas interferem destrutivamente e desaparecem.

3) Na **Mecânica Quântica**: só algumas energias são permitidas. Origem do termo *quantização da energia.*

$$E_1 > 0 \Rightarrow n_1, n_2 \text{ e } n_3 \text{ são reais} \begin{cases} n_1 = n_3 = \frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2mE_1} \\ n_2 = \frac{c}{\hbar\Omega}\sqrt{2m(E_1+V_0)} \end{cases}$$

Para se obter as ondas refletidas $x < x_1$ ou transmitidas $x > x_2$, é necessário sobrepor infinitas ondas que surgem de reflexões entre x_1 e x_2.

Existem ressonâncias onde $T = 1$ e $R = 0$.