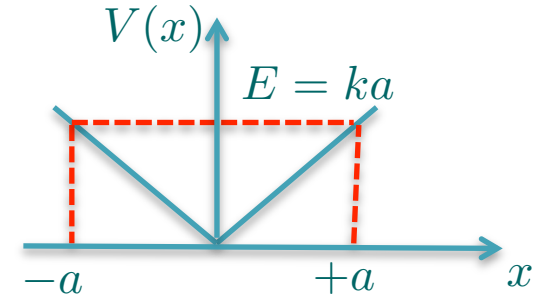


○ Potencial linear

Neste caso $V(\mathbf{x}) = k|x|$, com k constante e positivo. Para $E = ka$, note pontos de retorno clássico em $x = \pm a$. A equação de Schrödinger independente do

tempo, fica
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_E(\mathbf{x}) + k|x|u_E(\mathbf{x}) = E u_E(\mathbf{x})$$



É possível transformar este problema em um outro, onde só lidamos com valores de x positivos. Para isso é preciso observar que a Hamiltoniana (escrita aqui na representação das coordenadas) tem paridade par, isto é $H(-x) = H(x)$. Como consequência disso, **as autofunções terão paridade bem definida**, ou seja, ou são funções pares ou são funções ímpares. Funções ímpares tem propriedade $f(0) = 0$ e funções pares tem a propriedade $f'(0) = 0$ (pois $f(x)$ tem um máximo ou mínimo em $x = 0$). Assim o problema, só para $x > 0$, pode ser dividido em dois, se adotarmos as seguintes condições de contorno para $u_E(x)$:

- [1] Para funções pares, $u_E(-x) = u_E(x) \rightarrow \frac{du_E}{dx}(0) = 0$ e $\lim_{x \rightarrow \infty} u_E(x) = 0$
- [2] Para funções ímpares, $u_E(-x) = -u_E(x) \rightarrow u_E(0) = 0$ e $\lim_{x \rightarrow \infty} u_E(x) = 0$

○ Potencial linear

Agora, vamos transformar a equação, $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_E(x) + kx u_E(x) = E u_E(x)$

de forma que fique sem unidades. Para isso, considere $y = \frac{x}{x_0}$ e $\varepsilon = \frac{E}{E_0}$.

Esta escolha nos leva à $-\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \frac{d^2}{dy^2} u_E(y) + kx_0 y u_E(y) = \varepsilon E_0 u_E(y)$ ou

$$\frac{d^2}{dy^2} u_E(y) - \underbrace{\frac{2mkx_0^3}{\hbar^2}}_{=2 \text{ para achar } x_0} y u_E(y) = - \underbrace{\frac{2m\varepsilon x_0^2 E_0}{\hbar^2}}_{=2\varepsilon \text{ para achar } E_0} u_E(y) \rightarrow \begin{cases} x_0^3 = \frac{\hbar^2}{mk} \rightarrow x_0 = \left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/3} \\ E_0 = \frac{\hbar^2}{mx_0^2} \rightarrow E_0 = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m}\right)^{1/3} \end{cases}$$

Note $x_0/E_0 = 1/k$

$$\frac{d^2}{dy^2} u_E(y) - 2(y - \varepsilon) u_E(y) = 0 \text{ use } z = 2^{1/3}(y - \varepsilon) \rightarrow \underbrace{\frac{d^2}{dz^2} u_E(z) - z u_E(z)} = 0$$

Equação de Airy

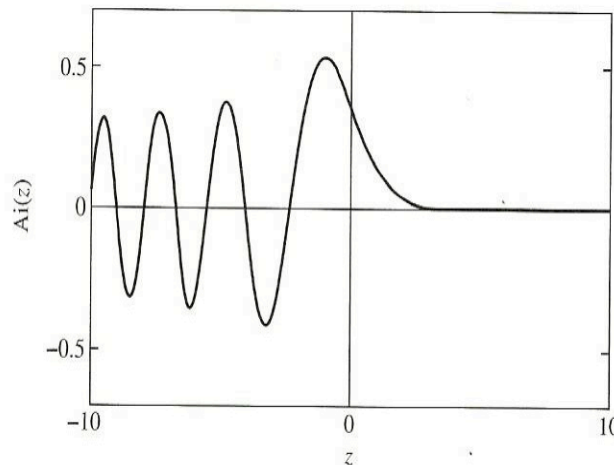


FIGURE 2.3 The Airy function.

$z = 0 \rightarrow y = \varepsilon \rightarrow \frac{x}{x_0} = \frac{E}{E_0} \therefore x = x_0 \frac{E}{E_0}$
para $E = ka$ e $\frac{x_0}{E_0} = \frac{1}{k}$, temos $x = a$.
Assim, identificamos:

- $z = 0$ ($x = a$) ponto de retorno clássico
- $z < 0$ ($x < a$) região clássica permitida
- $z > 0$ ($x > a$) região clássica proibida

○ Potencial linear

Chamando de $Ai(z) = u_E(z)$, a condição de contorno na origem pode ser vista da seguinte maneira:

$$\text{se } x = 0 \Rightarrow z = 2^{1/3}(y - \epsilon) = 2^{1/3}\left(\frac{x}{x_0} - \epsilon\right) = -2^{1/3}\epsilon$$

$$u_E(x) \begin{cases} 1) \text{ Par} \rightarrow \frac{du_E}{dx}(0) = 0 \rightarrow \frac{d}{dz} Ai(z = -2^{1/3}\epsilon) = 0 \text{ zeros da derivada} \\ 2) \text{ Ímpar} \rightarrow u_E(0) = 0 \rightarrow Ai(z = -2^{1/3}\epsilon) = 0 \text{ zeros da função de Airy} \end{cases}$$

os zeros da função de Airy (ou de sua derivada) definem as energias (ϵ) que fornecem as condições de contorno corretas na origem. Note que, novamente, a condição de contorno é que quantiza as energias do sistema.

$$Ai'(z) = 0 \text{ para } z = -1,019; z = -3,249; z = -4,820; \dots$$

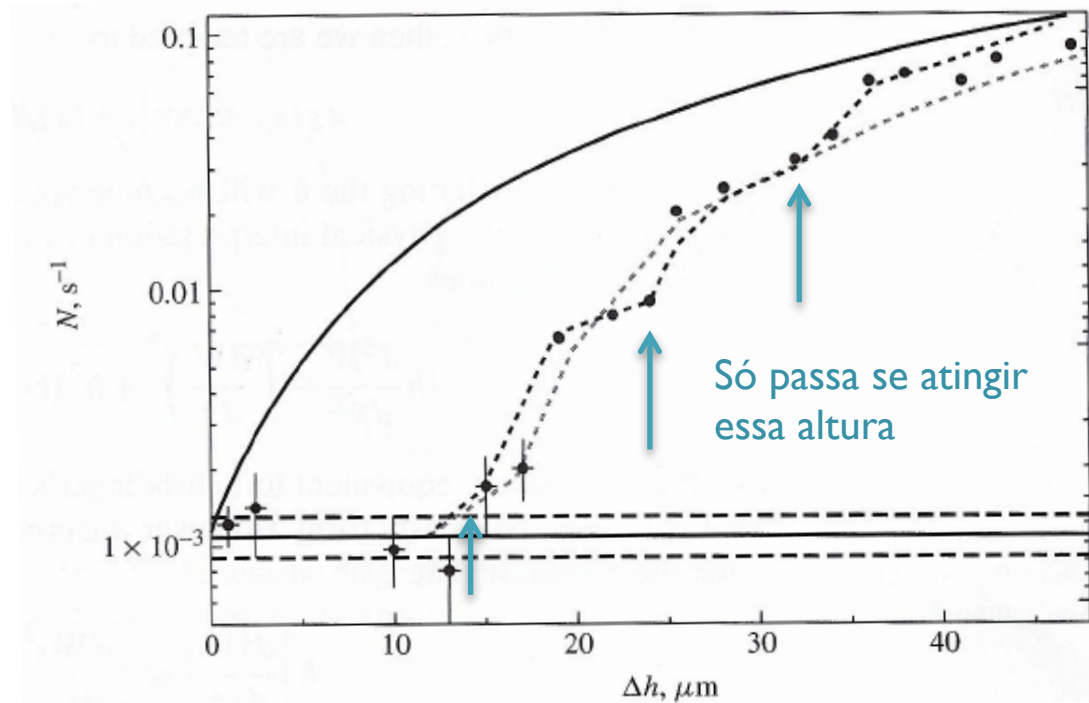
$$Ai(z) = 0 \text{ para } z = -2,338; z = -4,088; z = -5,521; \dots$$

$$\text{O estado fundamental é: } \epsilon = 1,019 \times 2^{-1/3} = \frac{E}{E_0} \rightarrow E = \frac{1,019}{2^{1/3}} E_0$$

ponto de retorno clássico \rightarrow

$$\text{com uma distância característica de } x = a = \frac{E}{k} = E \frac{x_0}{E_0} = \frac{1,019}{2^{1/3}} x_0$$

Neutron como bolinha quântica pulante



Para o neutron quântico saltitante, pegamos só as soluções ímpares (zeros de A_i)
Estes zeros, achados com $A_i(z) = 0$, aparecem em $z_1 = -2,338$; $z_2 = -4,088$;
 $z_3 = -5,521$;...

Os dados do experimento fornecem $x_0 = \left(\frac{\hbar^2}{m^2 g}\right)^{1/3} = 7,40 \mu m$.

Assim temos:

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = \frac{2,338}{2^{1/3}} \text{ com } x_1 = \frac{E}{E_0} x_0 = \frac{2,338}{2^{1/3}} x_0 = 14 \mu m \\ \varepsilon_2 = \frac{4,088}{2^{1/3}} \text{ com } x_2 = \frac{E}{E_0} x_0 = \frac{4,088}{2^{1/3}} x_0 = 24 \mu m \\ \varepsilon_3 = \frac{5,521}{2^{1/3}} \text{ com } x_3 = \frac{E}{E_0} x_0 = \frac{5,521}{2^{1/3}} x_0 = 32 \mu m \end{cases}$$

Aproximação semi-clássica WKB

WKB (Wentzel, Kramers, e Brillouin), é uma aproximação semi-clássica que explora limites onde \hbar pode ser considerado pequeno. Em suma, a idéia é escrever a função de onda como

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right)$$

lousa

e explorar a validade das aproximações para S . Para facilitar, consideremos o caso unidimensional. Lembre que para o caso estacionário, temos

$$S(x, t) = W(x) - Et \quad \text{e que} \quad \frac{dW}{dt} = \frac{\partial W}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial S}{\partial x} \frac{dx}{dt} = p \frac{dx}{dt}$$

$$\therefore W = \int p \frac{dx}{dt} dt = \int^x p dx = \pm \int^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' \quad \text{pois,}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x') = E. \quad \text{Assim, temos: } S(x, t) = \pm \int^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - Et$$

Para o caso estacionário, temos $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$. Assim, a equação da continuidade fica

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \rightarrow j = \text{constante (uma dimensão). Vimos } \mathbf{j} = \frac{\rho \nabla S}{m} = \frac{\rho}{m} \frac{d}{dx} S(x, t)$$

$$\rightarrow \rho \frac{d}{dx} W(x, t) = \text{cte} \therefore \pm \rho \sqrt{2m(E - V(x))} = \text{cte} \quad \text{e} \quad \therefore \sqrt{\rho} = \frac{\text{cte}}{(2m(E - V(x)))^{1/4}}$$

Aproximação semi-clássica WKB

Note que $\sqrt{\rho} = \frac{\text{cte}}{(2m(E - V(x)))^{1/4}} \propto \frac{1}{\sqrt{v_{\text{clássica}}}} \rightarrow$ quanto maior a velocidade, menor a chance de encontrar a partícula no ponto.

Assim, inserindo $\sqrt{\rho}$ e S na expressão de ψ , temos a aproximação WKB:

$$\psi(x, t) = \frac{\text{cte}}{(2m(E - V(x)))^{1/4}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - \frac{iEt}{\hbar} \right)$$

Antes de explorar melhor esta solução aproximada, vejamos o que significa \hbar pequeno. Entre outras, consideramos (slide 8 da aula 10)

$$\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2 \rightarrow \hbar \left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right| \ll \left| \frac{dW}{dx} \right|^2 \quad (S = W - Et, \text{ e unidimensional})$$

$$p = \hbar k = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} \therefore \frac{\lambda}{2\pi} = \bar{\lambda} = \frac{\hbar}{p} \rightarrow \bar{\lambda} = \frac{\hbar}{\left| \frac{dW}{dx} \right|} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}}$$

$$\left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right| = \left| \pm \frac{d}{dx} \sqrt{2m(E - V(x))} \right| = \left| - \frac{m \frac{dV}{dx}}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \right| = \frac{m \left| \frac{dV}{dx} \right|}{\sqrt{2m(E - V(x))}}$$

Aproximação semi-clássica WKB

Assim, a condição $\hbar \left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right| \ll \left| \frac{dW}{dx} \right|^2$ pode ser reescrita por

$$\frac{1}{\hbar \left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right|} \gg \frac{1}{\left| \frac{dW}{dx} \right|^2} \rightarrow \frac{\left| \frac{dW}{dx} \right|}{\left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right|} \gg \frac{\hbar}{\left| \frac{dW}{dx} \right|} \rightarrow \frac{\left| \frac{dW}{dx} \right|}{\left| \frac{d^2 W}{dx^2} \right|} \gg \bar{\lambda} \rightarrow \bar{\lambda} \ll \frac{2m(E - V(x))}{\left| \frac{dV}{dx} \right|}$$

que é satisfeita quando $\left| \frac{dV}{dx} \right| \approx 0$ e não é satisfeita quando $V(x) = E$. Uma

forma de olhar isso é através da expressão: $\underbrace{\frac{dx}{\bar{\lambda}}}_{\text{Número de comprimentos de onda dentro do intervalo } dx \text{ que o potencial varia } dV} \gg \underbrace{\frac{|dV|}{2m(E - V(x))}}_{\text{A variação relativa do potencial precisa ser pequena em muitos comprimentos de onda.}}$

Número de comprimentos de onda dentro do intervalo dx que o potencial varia dV .

A variação relativa do potencial precisa ser pequena em muitos comprimentos de onda.

Pense neste outro argumento: para construir um pacote de ondas com momento relativamente bem definido é preciso combinar ondas com momento $p \approx p_0$. O tamanho do pacote é da ordem de um comprimento de onda (λ). Se o potencial varia dentro do tamanho do pacote, efeitos quânticos ocorrerão e a aproximação falha.

Aproximação semi-clássica WKB

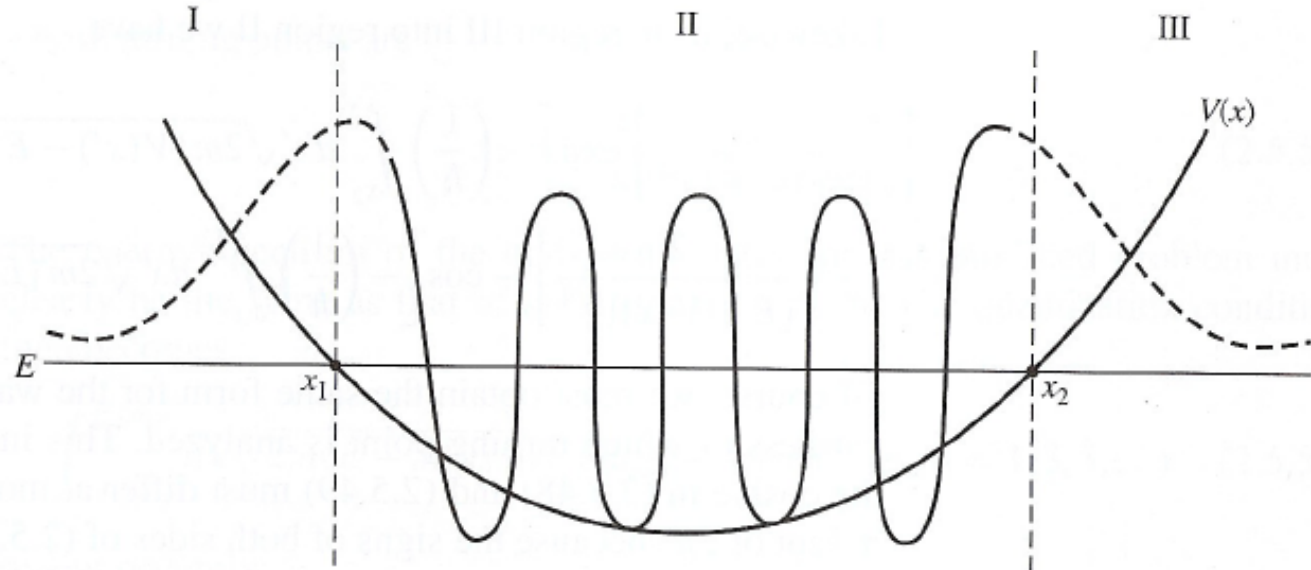
A solução para $\psi(x, t)$ foi deduzida para a região classicamente permitida, onde $E - V(x)$ é positivo. Consideraremos, agora, a região onde $E - V(x)$ é negativo (classicamente não tem sentido). Faremos isso substituindo diretamente $\sqrt{E - V(x)} = i\sqrt{V(x) - E}$ na expressão de $\psi(x, t)$, ou seja,

$$\psi(x, t) = \frac{\text{cte}}{(2m(E - V(x)))^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int^x \sqrt{2m(V(x') - E)} dx' - \frac{iEt}{\hbar}\right)$$

Temos uma solução para $E > V(x)$ e outra para $E < V(x)$. O problema é que nenhuma das duas vale para $E = V(x)$ (viola a condição $\bar{\lambda} \ll \frac{2m|E - V(x)|}{|\frac{dV}{dx}|}$)

Solução: $\left\{ \begin{array}{l} 1) \text{ Expanda } V(x) \text{ ao redor de } x_0 \text{ (situação, onde } V(x_0) = E) \\ \quad V(x) = V(x_0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x_0} (x - x_0) \\ 2) \text{ Use esta expansão e } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_E(x) + V(x)u_E(x) = Eu_E(x) \\ \quad \frac{d^2}{dx^2} u_E(x) - \frac{2m}{\hbar^2} \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x_0} (x - x_0)u_E(x) = 0 \text{ (equação de Airy)} \\ 3) \text{ As soluções são funções de Bessel de ordem } \pm \frac{1}{3}. \text{ Empate} \\ \quad \text{está solução com as outras duas (à esquerda e à direita de } x_0). \end{array} \right.$

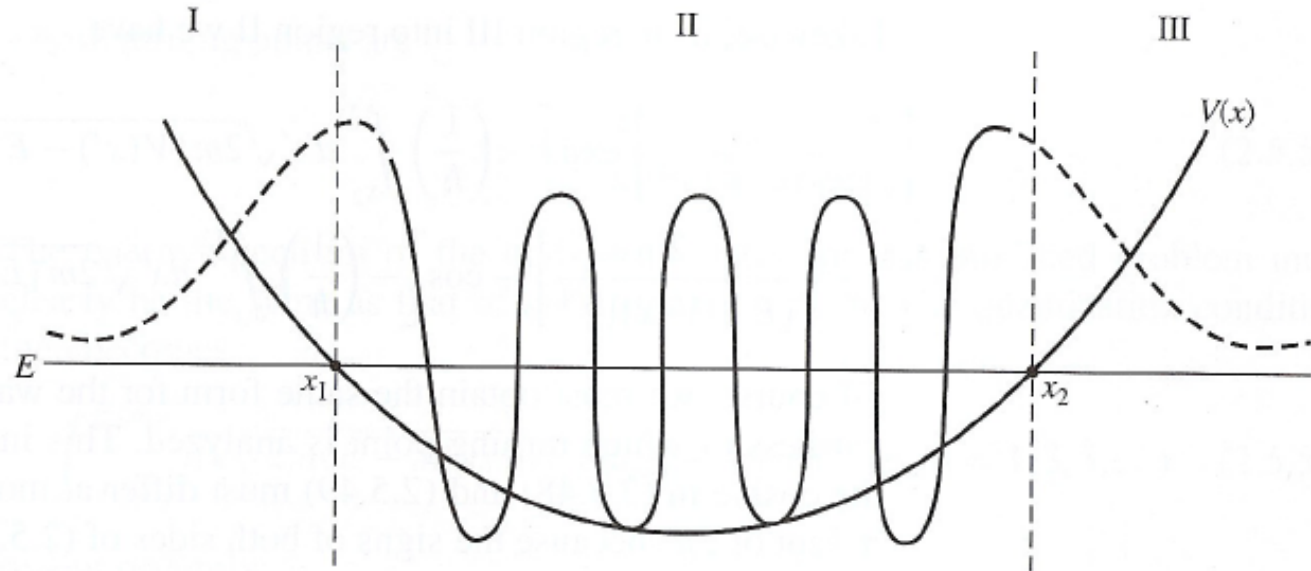
Aproximação semi-clássica WKB: poço de potencial



Soluções WKB longe dos pontos de retorno clássico:

$$\psi(x) \begin{cases} \psi_I(x) = \frac{1}{(V(x)-E)^{1/4}} \exp \left(- \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} \sqrt{2m(V(x') - E)} dx' \right) \\ \psi_{II}(x) = \frac{1}{(E-V(x))^{1/4}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' \right) \\ \psi_{III}(x) = \frac{1}{(V(x)-E)^{1/4}} \exp \left(- \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x \sqrt{2m(V(x') - E)} dx' \right) \end{cases}$$

Aproximação semi-clássica WKB: poço de potencial



Conectando as regiões com as funções de Airy, obriga a regra:

$$\text{região I} \rightarrow \text{II} \begin{cases} \psi_I(x) = \frac{1}{(V(x)-E)^{1/4}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} \sqrt{2m(V(x')-E)} dx' \right) \\ \psi_{II}(x) = \frac{2}{(E-V(x))^{1/4}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E-V(x'))} dx' - \frac{\pi}{4} \right] \end{cases}$$

$$\text{região III} \rightarrow \text{II} \begin{cases} \psi_{III}(x) = \frac{1}{(V(x)-E)^{1/4}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} \sqrt{2m(V(x')-E)} dx' \right) \\ \psi_{II}(x) = \frac{2}{(E-V(x))^{1/4}} \cos \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} \sqrt{2m(E-V(x'))} dx' + \frac{\pi}{4} \right] \end{cases}$$

Aproximação semi-clássica WKB: poço de potencial

lousa

As soluções na região II deveriam ser iguais, a menos de um sinal. Assim:

$$\begin{aligned}\psi_{II}^E(x) &= \frac{2}{(E - V(x))^{1/4}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - \frac{\pi}{4} \right] = \\ &= \pm \psi_{II}^D(x) = \pm \frac{2}{(E - V(x))^{1/4}} \cos \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' + \frac{\pi}{4} \right]\end{aligned}$$

para isso, exigimos que os argumentos dos cos difiram em $n\pi$. Ou seja,

$$\left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' - \frac{\pi}{4} \right] - \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' + \frac{\pi}{4} \right] = n\pi$$

Ou melhor, $\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - V(x'))} dx' = (n + \frac{1}{2})\pi\hbar \rightarrow \underbrace{\oint pdq}_{\text{blue arrow}} = nh$

Isso lembra a regra de quantização da velha mecânica quântica de Sommerfeld e Wilson.

Aproximação semi-clássica WKB: uma aplicação

Suponha bola pulando em uma superfície dura e sob ação de um campo gravitacional. O potencial deste problema é definido por:

$$V = \begin{cases} mgx, & \text{para } x > 0 \\ \infty & \text{para } x < 0 \end{cases}$$

com pontos de retorno clássico definidos por $x_1 = 0$ e $x_2 = \frac{E}{mg}$.

Não é possível usarmos diretamente a solução WKB desenvolvida, pois tínhamos a hipótese de que a onda viajava para $x < x_1$ e aqui a função é nula nesta região. É possível, entretanto, usarmos a solução WKB desenvolvida, se considerarmos um novo potencial, $V = mg|x|$, que é igual ao do problema em questão para $x > 0$, mas difere na região de $x < 0$. Lembrando que este potencial gera autofunções de H com paridade bem definida, podemos considerar as funções ímpares do novo problema como solução do problema original, pois, as funções ímpares se anulam na origem, conforme exigência da condição de contorno do problema.

Aproximação semi-clássica WKB: uma aplicação

O novo problema tem potencial: $V = mg|x|$, com pontos de retorno clássico

iguais a:
$$\begin{cases} x_1 = -\frac{E}{mg} \\ x_2 = +\frac{E}{mg} \end{cases}$$

Para obter o espectro, basta resolver a integral:

$$\int_{-\frac{E}{mg}}^{+\frac{E}{mg}} \sqrt{2m(E - mg|x|)} dx = (n_{\text{ímpar}} + \frac{1}{2})\pi\hbar$$

Como o integrando é par, podemos escrever:

$$2 \int_0^{+\frac{E}{mg}} \sqrt{2m(E - mgx)} dx = (n_{\text{ímpar}} + \frac{1}{2})\pi\hbar \rightarrow$$

$$\int_0^{+\frac{E}{mg}} \sqrt{2m(E - mgx)} dx = \frac{1}{2}(n_{\text{ímpar}} + \frac{1}{2})\pi\hbar = \frac{1}{2}(2n - 1 + \frac{1}{2})\pi\hbar = (n - \frac{1}{4})\pi\hbar$$

$$E_n = \left\{ \frac{[3(n - \frac{1}{4})\pi]^2}{2} \right\}^{2/3} (mg^2\hbar^2)^{1/3} \text{ com } n = 1, 2, 3...$$

n	WKB	Exato
1	2,320	2,338
2	4,082	4,088
3	5,517	5,521

Aproximação semi-clássica WKB: exercícios extras

- 1) Use a aproximação WKB para calcular os níveis de energia de uma partícula sem spin de massa m movendo em uma caixa com paredes rígidas em $x = 0$ e $x = L$. *Dica: usamos as funções de Airy para acertar a aproximação nos pontos de retorno clássico. Faça algo semelhante, lembrando que a expressão correta da função de onda na parede rígida é $\psi(0) = \psi(L) = 0$.*
- 2) Use a aproximação WKB para calcular os níveis de energia dos estados s de um elétron preso a um núcleo de carga $Z|e|$. *Dica: trate o elétron como preso entre duas paredes rígidas em $r = 0$ e $r = a$ (com $E = V(a) \rightarrow a = -Ze^2/E$).*
- 3) Use a aproximação WKB para estimar os níveis de energia de um oscilador harmônico unidimensional.
- 4) Use a aproximação WKB para resolver o problema da partícula saltitante no campo gravitacional (slide 12). Não use o truque de simetrizar o potencial. Use o raciocínio do problema 1 (acima).

$H(-x) = H(x) \Rightarrow$ se H respeita essa simetria, quais propriedades poderíamos prever sobre as auto-funções de H ? Comece definindo um operador π , tal que $\pi\psi(x) = \psi(-x)$. Aplique π sobre essa equação $\pi\pi\psi(x) = \pi\psi(-x) = \psi(x)$ e conclua que $\pi^2 = 1$.

- O que você consegue dizer sobre $[\pi, H]$? Aplique πH em uma função qualquer $\pi H(x)\phi(x) = H(-x)\phi(-x) = H(x)\phi(-x) = H(x)\pi\phi(x) \therefore \forall\phi(x), [\pi, H] = 0$
- Isso significa que as auto-funções de π também são auto-funções de H .
- Suponha que você sabe a solução de $\pi u_E(x) = \lambda u_E(x)$. Coloquei o índice E para lembrar que são também auto-funções de H , isto é $Hu_E(x) = Eu_E(x)$.
- Aplique π na sua equação de auto-valor e obtenha
$$\pi\pi u_E(x) = \lambda\pi u_E(x) = \lambda^2 u_E(x) = u_E(x) \therefore \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1, \text{ ou seja}$$
$$\pi u_E(x) = u_E(-x) = \pm u_E(x) \therefore \text{paridade bem definida.}$$
- Estudaremos melhor como explorar simetrias no final desta disciplina.

Aula 10, slides 8 e 9: O limite clássico

Comece substituindo a expressão $\psi(\mathbf{x}', t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right)$ na equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t)$$

e obtenha a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right] &= \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^2 \sqrt{\rho} + \left(\frac{2i}{\hbar} \right) (\nabla \sqrt{\rho}) \cdot (\nabla S) - \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 + \left(\frac{i}{\hbar} \right) \sqrt{\rho} \nabla^2 S \right] + \sqrt{\rho} V \end{aligned}$$

No limite clássico, \hbar é considerado muito pequeno. Observe que temos termos em \hbar^0 , \hbar^1 , e \hbar^2 . O limite clássico é obtido mantendo os termos em \hbar^0 e desprezando todos os termos que dependem de \hbar e \hbar^2 . Isso dá

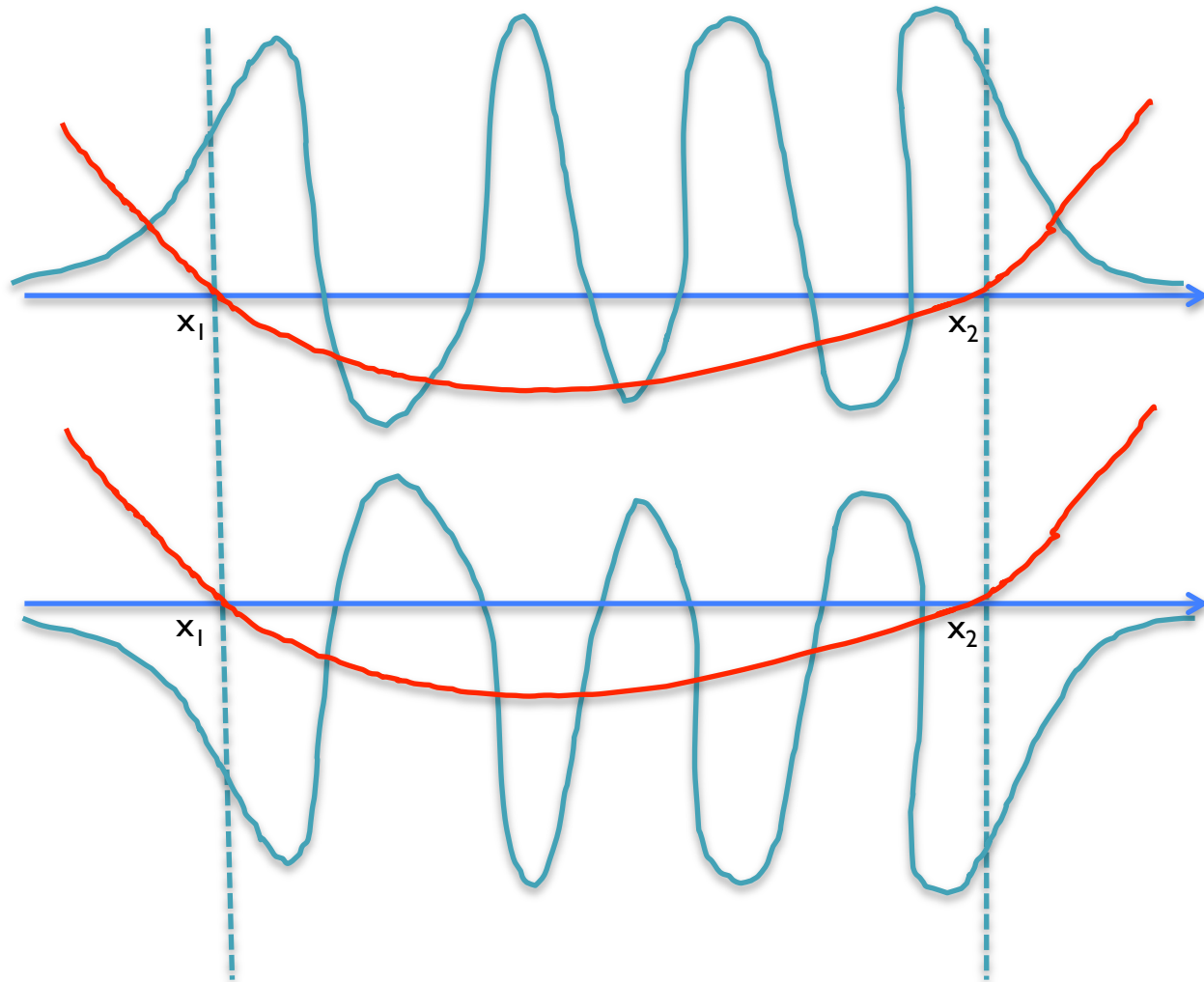
$$\frac{1}{2m} |\nabla S(\mathbf{x}', t)|^2 + V(\mathbf{x}') + \frac{\partial S(\mathbf{x}', t)}{\partial t} = 0$$

No caso de um estado estacionário, H não depende do tempo e classicamente a função principal de Hamilton é separável e pode ser escrita por:

$S(\mathbf{x}', t) = W(\mathbf{x}') - Et$, onde $W(\mathbf{x}')$ é a função característica de Hamilton.

O momento na teoria de Hamilton-Jacobi é dado por: $\mathbf{P}_{\text{clássico}} = \nabla S = \nabla W$.

Funções que diferem por um sinal, tem a mesma física.



$$\cos a = \pm \cos b = \cos(b + n\pi) = \cos b \cos n\pi - \sin b \sin n\pi \Rightarrow$$

$$a = b + n\pi \quad \therefore \quad a - b = n\pi$$