PELO PRINCÍPIO DE SUPERPOSIÇÃO, PODEMOS TOMAR COMBINAÇÕES LINEARES DESSE ESTADOS ESTACIONÁRIOS E OBTER SOLUÇÕES POSSÍVEIS DA EQ. DE SCH.
ASSIM, PODEMOS OBTER A SOLUÇÃO GERAL:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r})\, e^{-iE_n t/\hbar}$$

SE O ESPECTRO DE ENERGIAS FOR DISCRETO, OU:

$$\psi(\vec{r},t) = \int c(E)\, \phi_E(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar}\, dE$$

PARA UM ESPECTRO CONTÍNUO.
VEREMOS MAIS ADIANTE QUANDO OCORREM ENERGIAS DISCRETAS E QUANDO ELAS SÃO CONTÍNUAS. DE MANEIRA GERAL, TEREMOS UMA REGIÃO DISCRETA E UMA CONTÍNUA.
PORTANTO, SE TIVERMOS A FUNÇÃO DE ONDA NO INSTANTE INICIAL $t=0$ (CONDIÇÃO INICIAL) (SUPONDO O CASO DISCRETO)

$$\psi(\vec{r},0) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r})$$

VEREMOS DEPOIS COMO ACHAR OS COEFICIENTES c_n:

$$c_n = \int \phi_n^*(\vec{r})\,\psi(\vec{r},0)\,d^3r$$

UMA VEZ ACHADOS OS c_n, A FUNÇÃO DE ONDA PARA $t>0$ É:

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n\,\phi_n(\vec{r})\,e^{-iE_nt/\hbar}$$

PACOTES DE ONDAS

CONSIDERE A FUNÇÃO DE ONDA DE UMA PARTÍCULA LIVRE:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \psi_0 \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2E}t}$$

ONDE USAMOS $\vec{k} = \vec{P}/\hbar$ E $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

A FUNÇÃO DE ONDA MAIS GERAL É UMA SUPERPOSIÇÃO LINEAR DE $\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)$ PARA TODOS OS VALORES POSSÍVEIS DE $\vec{k}$

$$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \, g(\vec{k}) \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

A NORMALIZAÇÃO $\dfrac{1}{(2\pi)^{3/2}}$ É CONVENCIONAL.

A FUNÇÃO $g(\vec{k})$ NOS DÁ OS COEFICIENTES DA COMBINAÇÃO LINEAR.

EM $t=0$:

$$\psi(\vec{r},0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \, g(\vec{k}) \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

RECONHECEMOS AQUI A EXPRESSÃO DE UMA FUNÇÃO EM TERMOS DE SUA TRANSFORMADA DE FOURIER EM 3 DIMENSÕES.
DA TEORIA DE FOURIER, SABEMOS QUE:

$$g(\vec{k}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{r},0)$$

(VER APÊNDICE I DO VOL. 2 DO COHEN).
PARA SIMPLIFICAR A DISCUSSÃO, VAMOS NOS ATER AO CASO 1D:

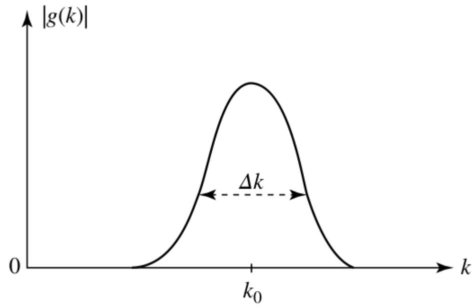
$$\psi(x,0) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} g(k)$$

$$g(k) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \psi(x,0)$$

NOTEM QUE AS DUAS EXPRESSÕES ACIMA SÃO GERAIS, MESMO PARTÍCULAS NÃO LIVRES (SUJEITAS A UM POTENCIAL), POIS SÃO PROPRIEDADES GERAIS DA TRANSF. FOURIER.

UMA PROPRIEDADE GENÉRICA DAS TRANSFORMADAS DE FOURIER

SUPONHA QUE A FORMA DE $g(k)$ SEJA DO SEGUINTE TIPO:



OU SEJA, O MÓDULO DE $g(k)$ É LOCALIZADO EM TORNO DE k_0 COM LARGURA Δk.
ENTÃO, A FUNÇÃO $\psi(x,0)$ TAMBÉM SERÁ LOCALIZADA NUMA REGIÃO DE LARGURA Δx E:

$$\Delta x \, \Delta k \gtrsim 1$$

OU SEJA, O PRODUTO $\Delta x \Delta k$ É SEMPRE MAIOR OU DA ORDEM DE 1.

ESSE FATO PODE SER PROVADO COM AS TÉCNICAS MATEMÁTICAS A SEREM DADAS MAIS ADIANTE, MAS VAMOS TENTAR UMA EXPICAÇÃO QUALITATIVA.

SUPONHA QUE:

$$g(k) = |g(k)|\, e^{i\alpha(k)}$$

E QUE $\alpha(k)$ VARIE POUCO NA REGIÃO DE LARGURA Δk EM TORNO DE k_0. PODEMOS ENTÃO APROXIMAR:

$$\alpha(k) \simeq \alpha(k_0) + \alpha'(k_0)(k-k_0)$$

LOGO:

$$\psi(x,0) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)|\, e^{ikx}\, e^{i\alpha(k_0)}\, e^{i\alpha'(k_0)(k-k_0)}$$

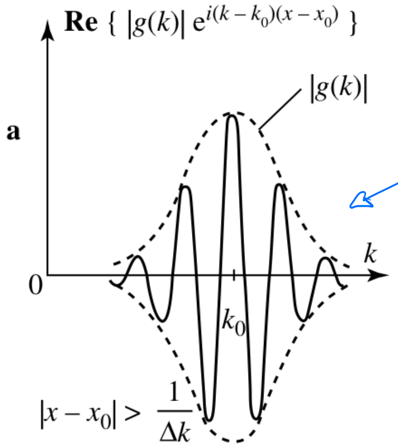
$$= e^{i\alpha(k_0)}\, e^{ik_0 x} \underbrace{\int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)|\, e^{i(k-k_0)(x-x_0)}}_{I}$$

ONDE:

$$x_0 = -\alpha'(k_0)$$

VAMOS AGORA ANALISAR A INTEGRAL ACIMA, PARA VÁRIOS VALORES DE $(x-x_0)$

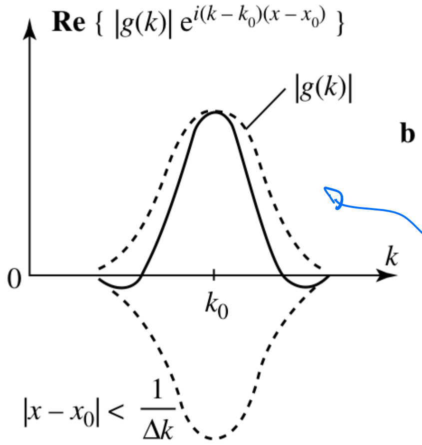
$$I = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} |g(k)| \, e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$$



SE $|x-x_0| > \frac{1}{\Delta k}$, O INTEGRANDO ACIMA OSCILA BASTANTE NA REGIÃO DE INTEGRAÇÃO:

$$\simeq \left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$$

$\Rightarrow I \simeq 0$



SE, POR OUTRO LADO, $|x-x_0| < \frac{1}{\Delta k}$, O ARGUMENTO DA EXPONENCIAL QUASE NÃO VARIA NA MESMA REGIÃO DE INTEGRAÇÃO

$\Rightarrow$ I É APRECIÁVEL

ASSIM, O VALOR DA INTEGRAL, E LOGO DE $\psi(x,0)$ SÓ É APRECIÁVEL SE:

$$|x - x_0| = \Delta x \gtrsim \frac{1}{\Delta k}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x \, \Delta k \gtrsim 1}$$ (*) VER COMENTÁRIO NA PRÓXIMA PÁGINA

LEMBRANDO QUE $k = \frac{p}{\hbar}$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x \, \Delta p \gtrsim \hbar}$$

QUE É O CHAMADO PRINCÍPIO DE INCERTEZA DE HEISENBERG. ELE É UMA CONSEQUÊNCIA MATEMÁTICA DO FATO DE QUE $g(k)$ É A TRANSF. DE FOURIER DE $\psi(x,0)$. NOTE QUE PODEMOS ESCREVER TUDO USANDO p:

$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, \phi(p) \, e^{ipx/\hbar}$$ ONDE

$$\phi(p) = g(p/\hbar)$$

(*) : NA VERDADE, PROVAMOS QUE :

$$\Delta x \, \Delta k \simeq 1$$

E NÃO SE PODE TER $\Delta x \Delta k \ll 1$.

PORÉM, É POSSÍVEL, SIM, ACONTECER QUE

$$\Delta x \, \Delta k \gg 1$$

ISSO NÃO ACONTECE NO NOSSO CASO PORQUE ASSUMIMOS QUE $\alpha(k)$ NÃO VARIA MUITO NO INTERVALO :

$$\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2} , \, k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right]$$

SE RELAXARMOS ESSA CONDIÇÃO, PODEMOS TER :

$$\Delta x \, \Delta k \gg 1$$

ASSIM, GENERICAMENTE : $\boxed{\Delta x \, \Delta k \gtrsim 1}$

TAMBÉM É UM TEOREMA DA TEORIA DE FOURIER (TEOREMA DE PARSEVAL) QUE:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\psi}(p)|^2 dp = C$$

PORTANTO, SE A DENSIDADE DE PROBABILIDADE DE MEDIR $\underline{X}$ É:

$$dP(x) = \frac{|\psi(x,0)|^2}{C} dx$$

SEGUE QUE A DENSIDADE DE PROBABILIDADE PARA MEDIDAS DE $\underline{P}$ É:

$$d\bar{P}(p) = \frac{|\bar{\psi}(p)|^2}{C} dp$$

O PRINCÍPIO DE HEISENBERG DIZ QUE SE $|\psi(x,0)|^2$ É MUITO LARGA, ENTÃO $|\bar{\psi}(p)|^2$ É MUITO FINA E VICE-VERSA, O PRODUTO DAS LARGURAS $\Delta x \Delta p$ NÃO PODENDO SER MENOR QUE $\hbar$.

EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA

VAMOS AGORA VOLTAR À DEPENDÊNCIA TEMPORAL DA FUNÇÃO DE ONDA DA PARTÍCULA LIVRE:

$$\psi(x,t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, e^{ikx}\, g(k)\, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

PARA GANHARMOS ENTENDIMENTO DO QUE ACONTECE, É ÚTIL OLHARMOS UM CASO PARTICULAR ILUSTRATIVO. SUPONHA QUE $g(k)$ SEJA UMA GAUSSIANA:

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$$

CENTRADA EM k_0 E DE LARGURA $\Delta k \simeq \frac{1}{a}$.

NESSE CASO, A INTEGRAL PODE SER FEITA ANALITICAMENTE (LISTA 1):

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \frac{e^{i\theta(x,t)}}{[\gamma(t)]^{1/4}} \exp\left[\frac{(x-v_0 t)^2}{a^2\gamma(t)}\right]$$

ONDE $\theta(x,t)$ É UMA FASE NÃO MUITO RELEVANTE, $v_0 = \frac{\hbar k}{m}$, E $\gamma(t) = 1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}$.

AS PRINCIPAIS CARACTERÍSTICAS SÃO:

a) O CENTRO DO PACOTE SE MOVE COM VELOCIDADE CONSTANTE v_0, COMO A PARTÍCULA LIVRE CLÁSSICA FARIA

b) O PACOTE TEM LARGURA

$$\Delta x = a\sqrt{\gamma(t)} = a\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$$

INICIALMENTE $(t=0)$, $\Delta x = a$ E $\Delta x \Delta k \simeq 1$, COMO ESPERADO.

MAS PARA $t>0$ OU $t<0$, O PACOTE SE ALARGA INDEFINIDAMENTE.

É INTERESSANTE NOTAR UMA INTERPRETAÇÃO MEIO CLÁSSICA PARA O ALARGAMENTO DO PACOTE. DE:

$$x = v_0 t = \frac{\hbar k t}{m}$$

PODEMOS OBTER:

$$\Delta x_c = \frac{\hbar t}{m} \Delta k = \frac{\hbar t}{m a}$$

ONDE Δx_c DENOTA O ALARGAMENTO CLÁSSICO. DE FATO, O RESULTADO QUÂNTICO, TENDE ESSENCIALMENTE A ESSE VALOR QUANDO $t \to \infty$:

$$\Delta x(t) \xrightarrow[t \to \infty]{} \frac{2 \hbar t}{m a}$$

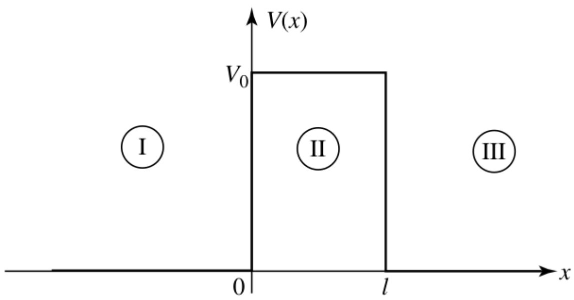
(O FATOR DE $\underline{2}$ PODE SER OBTIDO DEFININDO MAIS PRECISAMENTE Δx E Δk).

NOTE NO ENTANTO A DISCREPÂNCIA A TEMPOS CURTOS $(t \to 0)$:

$\Delta x_c \to 0$ MAS $\Delta x \to \frac{1}{a}$ DE FORMA QUE $\Delta x \Delta k \gtrsim 1$

ALGUNS POTENCIAIS UNIDIMENSIONAIS

É INSTRUTIVO CONSIDERAR O PROBLEMA DA E.S. EM 1D COM POTENCIAIS INDEPENDENTES DO TEMPO. ENTRE ESSES, AQUELES QUE SÃO CONSTANTES POR PARTES SÃO INSTRUTIVOS.



CONDIÇÕES MATEMÁTICAS SOBRE A FUNÇÃO DE ONDA:

1) A FUNÇÃO DE ONDA É SEMPRE FINITA.
2) A FUNÇÃO DE ONDA É SEMPRE CONTÍNUA, MESMO EM PONTOS EM QUE V(x) É DESCONTÍNUO.
3) A DERIVADA DE $\psi(x)$ É CONTÍNUA SE O POTENCIAL É FINITO.

SE O POTENCIAL FOR INFINITO EM ALGUM PONTO OU REGIÃO, A DERIVADA É DESCONTÍNUA

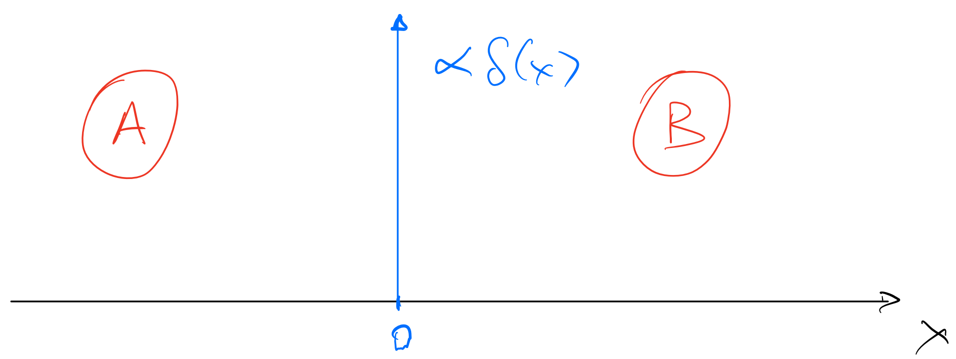
ALGUNS PROBLEMAS IMPORTANTES SÃO VISTOS NO CURSO DE ESTRUTURA DA MATÉRIA E NÃO SERÃO REPETIDOS AQUI. O COMPLEMENTO H_I DO LIVRO ILUSTRA OS CÁLCULOS:

1) POTENCIAL DEGRAU (2a)
2) BARREIRA DE POTENCIAL (2b)
3) POÇO QUADRADO (2c)

OS EXERCÍCIOS DA LISTA EXPLORAM O CASO DO POTENCIAL DELTA DE DIRAC

$$V(x) = \alpha\, \delta(x)$$

COM $\alpha < 0$. COMO ILUSTRAÇÃO, VAMOS RESOLVER O PROBLEMA DO TUNELAMENTO NO CASO $\alpha > 0$.



TANTO NA REGIÃO $\underline{A}$ QUANTO NA $\underline{B}$ $V(x)=0$ E A E.S. (IND. DO TEMPO) FICA:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\,\psi(x) \Rightarrow \psi'' = -\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi$$

CUJAS SOLUÇÃO SÃO EXPONENCIAIS COMPLEXAS, COM SOLUÇÃO GERAL:

$$\psi(x) = C_1\, e^{ikx} + C_2\, e^{-ikx}$$

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

PARA UMA PARTÍCULA INCIDENTE PELA ESQUERDA, DEVEMOS ESCOLHER:

$$\psi_A(x) = A\, e^{ikx} + B e^{-ikx} \qquad (x<0)$$

$$\psi_B(x) = C\, e^{ikx} \qquad (x>0)$$

LEMBRE-SE DE QUE A EVOLUÇÃO TEMPORAL TRAZ UM FATOR $e^{-iEt/\hbar}$ $(E = \hbar^2k^2/2m)$ E

$e^{ikx}\, e^{-iEt/\hbar} = e^{i(kx-\omega t)}$ $\Rightarrow$ ONDA CAMINHANTE PARA A DIREITA

E $e^{-ikx}e^{-iEt/\hbar} = e^{-i(kx+\omega t)}$ ⇒ ONDA CAMINHANTE PARA A ESQUERDA

AGORA IMPOMOS AS CONDIÇÕES MATEMÁTICAS QUE $\psi(x)$ DEVE SATISFAZER:

1) $\psi(x)$ É CONTÍNUA EM $x=0$:

$$\psi_A(x\to 0^-) = \psi_B(x\to 0^+)$$

$$\Rightarrow \boxed{A + B = C}$$

2) COMO O POTENCIAL NÃO É FINITO, A DERIVADA DA FUNÇÃO DE ONDA PODE APRESENTAR UMA DESCONTINUIDADE EM $x=0$.

INTEGRAMOS A E.S.I.T, DE $-\epsilon$ a $+\epsilon$ $(\epsilon\to 0^+)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi''(x)\,dx}_{\downarrow} + \alpha\underbrace{\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)\,dx}_{\psi(0)} = E\underbrace{\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)\,dx}_{\simeq\,\psi(0)\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}dx\ \xrightarrow[\epsilon\to 0^+]{}\ 0}$$

$$\psi'(\epsilon)-\psi'(-\epsilon)\xrightarrow[\epsilon\to 0^+]{}\psi'(0^+)-\psi'(0^-)$$

$$\Rightarrow \psi'(0^+)-\psi'(0^-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

QUE NOS DÁ A DESCONTINUIDADE DA DERIVADA. USANDO A FORMA DE $\psi(x)$:

$$\psi_A'(x) = ik\left(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}\right) \xrightarrow[x\to 0^-]{} ik(A-B) = \psi'(0^-)$$

$$\psi_B'(x) = ikCe^{ikx} \xrightarrow[x\to 0^+]{} ikC = \psi'(0^+)$$

$$\Rightarrow \quad ikC - ik(A-B) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}C$$

$$C - (A-B) = \left(\frac{2m\alpha}{i\hbar^2 k}\right)C = -i\frac{q}{k}C$$

$$\boxed{A - B = \left(1 + 2i\frac{q}{k}\right)C}$$

ONDE $q = \dfrac{m\alpha}{\hbar^2}$

RESOLVENDO PARA B E C EM TERMOS DE A:

$$B = \frac{-iq/k}{1+iq/k}A = \left(\frac{-i\theta}{1+i\theta}\right)A$$

$$C = \frac{1}{1+iq/k}A = \left(\frac{1}{1+i\theta}\right)A$$

ONDE: $\theta = \dfrac{q}{k}$

OS COEFICIENTES DE TRANSMISSÃO T E DE REFLEXÃO R SÃO DADOS POR:

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\theta^2}{1+\theta^2}$$

$$T = \frac{1}{1+\theta^2}$$

ONDE: $\theta^2 = \frac{g^2}{k^2} = \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2 E}$

NOTE QUE $R+T=1$. ALÉM DISSO, A SOLUÇÃO

$$\psi_A(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \qquad (x<0)$$

$$\psi_B(x) = C e^{ikx} \qquad (x>0)$$

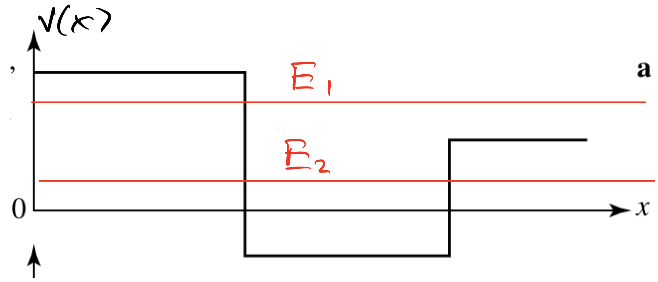
EXISTE PARA QUALQUER VALOR DE $k>0$ $(E>0)$. HÁ UM <u>CONTÍNUO</u> DE SOLUÇÕES.

FINALMENTE

$$\int |\psi(x)|^2 dx \rightarrow \infty$$

AS FUNÇÕES DE ONDA <u>NÃO</u> SÃO $L^2(\mathbb{R},\mathbb{C})$!

DE MANEIRA GERAL, PARA POTENCIAIS GENÉRICOS 1D DO TIPO:



TEMOS QUE:

a) PARA ENERGIAS COMO E_1, TAIS QUE $E_1 > V(x)$ SE $x \to \infty$ E/OU $x \to -\infty$, AS FUNÇÕES DE ONDA FORMAM UM CONTÍNUO E NÃO SÃO DE QUADRADO INTEGRÁVEL.

b) POR OUTRO LADO, PARA ENERGIAS COMO E_2, TAIS QUE $E_2 < V(x)$ SE $x \to \infty$ E $x \to -\infty$, AS FUNÇÕES DE ONDA SÓ EXISTEM PARA VALORES DISCRETOS DE ENERGIA E SÃO DE QUADRADO INTEGRÁVEL.

EXEMPLOS DESSE ÚLTIMO TIPO SÃO O PROBLEMA 2 DO CAP. 1 OU O POÇO QUADRADO DE (H_I-2c). EXEMPLOS DO TIPO (a) SÃO (H_I-2a E 2c), ALÉM DO CASO RESOLVIDO NAS PÁGINAS ANTERIORES.