2-Fundamentos da Mecânica Quântica - Parte 1

Prof. César Augusto Dartora - UFPR

E-mail: cadartora@eletrica.ufpr.br

Curitiba-PR

Roteiro do Capítulo:

- Motivação Histórica
- Dualidade Onda-Partícula, Incerteza
- Equação de Schrödinger
- Solução do Problema do Poço de Potencial

Motivação Histórica

$\rightsquigarrow$ Em fins do Séc. XIX e início do Séc. XX alguns experimentos davam indícios de que a Física Clássica tinha falhas.

$\rightsquigarrow$ Experimento de Michelson-Morley e a Velocidade da Luz: Invariância das leis da Física por transformações de Galileu só é válida em baixas velocidades e nasce a Teoria da Relatividade Especial (1898 a 1905 - Lorentz, Fitzgerald, Poincarè, Einstein);

$\rightsquigarrow$ Radiação do Corpo Negro: a lei de Rayleigh-Jeans clássica apresenta divergências no ultravioleta e não concorda com os experimentos. Solução(1900): Planck introduz os quanta - pacotes de mínima de energia - nasce a teoria quântica;

$\rightsquigarrow$ O efeito fotoelétrico: a forma como os elétrons são arrancados de uma superfície metálica pela incidência de luz não era compreendida e a teoria eletromagnética clássica falha. Solução (1905): Einstein introduz o conceito de fóton e trata a luz como partícula;

Tanto no efeito fotoelétrico quanto na explicação da radiação do corpo negro, a energia mínima associada a uma onda de frequencia f (Hz) é dada por

$$E_f = hf \tag{1}$$

e é denominada **quantum**, sendo

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{J.s}$$

$\rightarrow$ h é a constante de Planck.

$\rightsquigarrow$ Calor Específico dos Sólidos: a estatística clássica prevê um resultado discordante do observado. Quando as vibrações de um sólido são quantizadas, dando origem aos chamados fônons, alguns problemas são resolvidos (Einstein e Debye - 1907).

$\rightsquigarrow$ Um teorema devido à Bohr e Miss van Leeuwen demonstra que, se a física estatística clássica é válida, a matéria não deve apresentar propriedades magnéticas no limite de equilíbrio termodinâmico, ou seja, a matéria não responderia à aplicação de um campo magnético. Tese de Doutoramento de Bohr em 1911.

$\rightsquigarrow$ O modelo atômico de Rutherford: nesse modelo os elétrons orbitam um núcleo muito mais massivo e com carga positiva. Concorda com o experimento de espalhamento de partículas carregadas. Falha: em uma órbita circular o elétron no átomo está acelerado e deve emitir radiação, segundo a teoria eletromagnética clássica, perdendo energia até colidir com o núcleo. Bohr em 1913 resolve o problema postulando que as órbitas eletrônicas são quantizadas.

Do ponto de vista formal os avanços foram maiores a partir dos anos 1920:

- 1925 - O spin é postulado por Uhlenbeck e Goudsmith. Experimento de Stern-Gerlach demonstra que para o elétron este é quantizado, podendo assumir os valores $S_z = \pm\hbar/2$.

- Louis de Broglie postula a dualidade onda-partícula para partículas materiais também, não somente para a luz, fato logo confirmado experimentalmente.

- 1926-1930 - Heisenberg, Dirac, Pauli, Bohr, Max Born, Schrödinger, Jordan: formalismo matemático é estabelecido. A interpretação probabilística da chamada escola de Copenhagen liderada por Bohr torna-se amplamente aceita, a despeito da divergência de alguns ilustres como Einstein e Schrödinger.

Os expoentes da Mecânica Quântica e suas contribuições principais

$*$ Werner Heisenberg: mecânica das matrizes e o princípio de incerteza;

$*$ Erwin Schrödinger: mecânica ondulatória, equivalência com o formalismo de Heisenberg, solução do átomo de Hidrogênio;

$*$ Wolfgang Pauli: princípio de exclusão, matrizes de spin;

$*$ Paul Dirac: teoria relativística do elétron, formalismo dos bras e kets, métodos de teorias de campos.

$*$ Max Born: dá a interpretação probabilística da função de ondas;

$*$ Niels Bohr: além de ter contribuído em regras mais antigas de quantização denominadas regras de Bohr-Sommerfeld, foi mentor e líder da escola de Copenhagen.

A dualidade onda-partícula e a incerteza

$\rightsquigarrow$ Louis de Broglie observou que se a luz tem comportamento dual, podendo apresentar aspectos ondulatórios na propagação e de partícula na interação com a matéria, mas não possuindo massa, era de se esperar que partículas materiais também devessem apresentar comportamento dual onda-partícula.

$\rightsquigarrow$ Definiu então que o comprimento de onda de uma partícula qualquer é dado por:

$$\lambda = \frac{h}{p} \ , \tag{2}$$

sendo $p = |\mathbf{p}|$ o módulo do momentum linear da partícula.

Para partículas materiais em velocidades não-relativísticas e com massa m, sabemos que

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} \ , \tag{3}$$

sendo $\mathbf{v}$ a velocidade de deslocamento.

• Vamos explorar um pouco esse aspecto de dualidade onda-partícula, considerando como ponto de partida a equação de ondas de Helmholtz para uma onda ψ:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(x,y,z,t) = 0 \ , \tag{4}$$

sendo k o número de onda dado por:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \ . \tag{5}$$

Sabemos que a solução de onda plana uniforme para a equação (4) é dada por:

$$\psi = \psi_0(\mathbf{k},\omega)e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \ , \tag{6}$$

sendo $\psi_0(\mathbf{k},\omega)$ uma amplitude independente do tempo e do espaço, $\mathbf{k}$ o vetor de onda, que indica a direção de propagação da onda, ω a frequência da onda e $|\mathbf{k}| = k$.

$\rightsquigarrow$ Da relação de de Broglie temos $\lambda = h/p$ e além disso $k = 2\pi/\lambda$.

- Mesclando as duas equações obtemos:

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

Definição: Constante de Planck $\hbar$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

Lembrando que o momentum linear $\mathbf{p}$ está na direção de movimento da partícula, assim como $\mathbf{k}$ é a direção de propagação da onda associada, podemos escrever uma relação vetorial:

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \ , \tag{7}$$

assim como para a energia $E = hf$ podemos expressar em termos de $\hbar$ e ω:

$$E = \hbar\omega \ , \tag{8}$$

$\rightsquigarrow$ Tendo em conta $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ e $\omega = E/\hbar$, das últimas equações, a solução de onda pode ser escrita então como:

$$\psi = \psi_0(\mathbf{p}, E)e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)} \ , \tag{9}$$

• Para não ficarmos restritos a uma onda plana uniforme, podemos encontrar uma solução geral $\Psi(\mathbf{x},t)$: esta será uma superposição de ondas planas uniformes, com diversas frequências e vetores de onda, ou em outras palavras, uma onda qualquer é a adequada superposição de ondas com momentum $\mathbf{p}$ e energia E:

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^4}\int \psi_0(\mathbf{p}, E)e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)}d^3\mathbf{p}dE \tag{10}$$

onde uma constante de normalização adequada foi acrescentada.

$\rightsquigarrow$ Observe que a equação acima nada mais é do que uma transformada de Fourier, que conecta dois espaços duais $(\mathbf{x},t) \leftrightarrow (\mathbf{p},E)$, ou seja p_x e x estão em espaços recíprocos na transformação de Fourier, assim como E e t!!!!!

• Por simplicidade vamos considerar apenas uma dimensão espacial, então:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(p_x,E)e^{i(p_x x - Et)/\hbar}dp_x dE \ , \tag{11}$$

• **Primeiro Caso**: Se a energia e o momentum são precisamente conhecidos então o espectro será dado por $\psi_0(p_x,E) = A\delta(p_x - p_0)\delta(E - E_0)$ e temos:

$$\Psi(x,t) = \frac{A}{2\pi\hbar}e^{i(p_0 x - E_0 t)/\hbar} \ , \tag{12}$$

ou seja, é uma onda plana uniforme!

$\rightsquigarrow$ A onda plana uniforme não é localizada e existe em todo o espaço. Conclusão: se conhecemos com toda certeza a energia e o momento da partícula então a incerteza de posição é infinita, e a partícula deve existir para todo tempo, uma vez que também não é localizada no tempo!

• **Segundo Caso**: Se a posição x_0 é muito bem conhecida e também a energia, então a partícula material do tipo ponto é bem localizada no espaço e o espectro deverá ser dado por dado por $\psi_0(p_x, E) = Ae^{-ip_x x_0}\delta(E - E_0)$. Substituindo na equação (11), repetida abaixo por conveniência:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0(p_x, E)e^{i(p_x x - Et)/\hbar}dp_x dE \ ,$$

temos:

$$\Psi(x,t) = \frac{A'}{2\pi\hbar}\delta(x - x_0)e^{-iE_0 t/\hbar} \ , \qquad (13)$$

ou seja, se localizamos a partícula exatamente em x_0 então o espectro de momento é plano e temos incerteza total quanto ao seu valor.

$\rightsquigarrow$ Somos levados a concluir que o princípio de incerteza de Heisenberg nada mais é do que a propriedade fundamental da transformada de Fourier. Dada a transformada geral:

$$f(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\beta) e^{i\alpha\beta} d\beta \tag{14}$$

$$F(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\alpha) e^{-i\alpha\beta} d\alpha \tag{15}$$

temos a seguinte relação entre a largura espectral $\Delta\alpha$ da função $f(\alpha)$ no domínio α e a largura $\Delta\beta$ da função $F(\beta)$ no domínio β:

$$\Delta\alpha \cdot \Delta\beta \geq \frac{1}{2} \ , \tag{16}$$

• No caso presente, tem-se que levar em conta a constante de Planck na normalização, para obter as famosas relações de incerteza de Heisenberg:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \ , \tag{17}$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \ . \tag{18}$$

A Equação de Schrödinger

- Vamos considerar a equação de ondas de Helmholtz (4):

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(x,y,z) = 0 \ ,$$

e a relação de de Broglie:

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

- Para uma partícula não-relativística temos:

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + V \ ,$$

onde $T = p^2/(2m)$ é a energia cinética, V a energia potencial e E a energia total, permitindo isolar p e calcular o valor de k em função da energia:

$$k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V) \ , \tag{19}$$

para substituir na equação de ondas acima.

Fazendo a substituição de k^2 na equação de ondas obtemos:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = \left[\nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\right]\psi = 0 \ ,$$

e reagrupando os fatores de maneira adequada obtemos a famosa equação de Schrödinger não-relativística para uma partícula:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})\right)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \ . \tag{20}$$

• A solução da equação acima deve estar sujeita a condições de contorno.

• Para estados ligados, ou "bound states", a partícula deve ficar confinada a uma certa região do espaço, e nesse caso :

$$\lim_{r\to\infty}\psi(\mathbf{x}) \to 0 \ .$$

• Os valores de E que satisfazem (20) sujeitas às condições de contorno são denominados autoenergias do sistema (pode ter espectro discreto e/ou contínuo).

• *Interpretação Probabilística da função de ondas* (Max Born):

A função de ondas ψ descreve uma amplitude de probabilidade tal que a probabilidade de encontrar uma partícula no volume $d^3\mathbf{x}$ em torno de um ponto $\mathbf{x}$ é dada por:

$$dP = |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} = \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\ d^3\mathbf{x}\ .$$

$\rightsquigarrow$ Sabendo que a probabilidade sobre todo o espaço deve ser 1, encontramos uma condição de norma para ψ:

$$\int |\psi(\mathbf{x})|^2 d^3\mathbf{x} = 1\ . \tag{21}$$

♣ Operadores quânticos e suas médias:

$\rightsquigarrow$ Na Mecânica Clássica as grandezas físicas observáveis são diretamente medidas e a cada uma delas atribuímos números ou funções, como a posição e o momento de uma partícula, $\mathbf{x}(t)$, $\mathbf{p}(t)$, sujeitas às leis de Newton:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$$

Especificando-se a força $\mathbf{F}$ que atua sobre a partícula, e as condições iniciais em $t = t_0$, o movimento $\mathbf{x}(t)$ é perfeitamente determinístico, e qualquer medida realizada adequadamente não afetará a trajetória.

$\rightsquigarrow$ Na Mecânica Quântica os **observáveis físicos** ganham o status de **operadores matemáticos** (operadores diferenciais ou matrizes), sendo que os valores medidos serão apenas os autovalores destes operadores.

$\rightsquigarrow$ O que podemos conhecer em geral, são médias dos operadores sobre várias medidas.

$\rightsquigarrow$ O sistema físico será descrito pela evolução da função de ondas $\psi(\mathbf{x},t)$, que deve satisfazer a equação de Schrödinger.

$\rightsquigarrow$ No limite clássico, pelo princípio de correspondência de Bohr, retomam-se as leis da Física Clássica (leis de Newton no exemplo acima) quando $\hbar \to 0$ e os valores médios dos operadores satisfazem as leis clássicas.

• Mas qual é a forma diferencial dos operadores de energia $\hat{E}$ e momentum linear $\hat{\mathbf{p}}$?

$\rightsquigarrow$ A resposta está na análise da onda plana uniforme, cujos valores de energia e momentum são bem conhecidos, ou seja, dado que:

$$\psi_{\mathbf{p_0},E_0} = \psi_0 e^{i(\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{x}-E_0 t)/\hbar}$$

esta deve ser autofunção dos operadores $\hat{E}$ e $\hat{\mathbf{E}}$, com autovalores $(E_0,\mathbf{p}_0)$, tal que:

$$\hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p_0},E_0} = \mathbf{p}_0\psi_{\mathbf{p_0},E_0}$$
$$\hat{E}\psi_{\mathbf{p_0},E_0} = E_0\psi_{\mathbf{p_0},E_0}$$

• Fica como exercício verificar que:

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ , \tag{22}$$
$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla\ , \tag{23}$$

• Médias de Operadores:

Dado um operador quântico qualquer $\hat{A}$, define-se o seu valor médio em relação ao estado físico ψé dado por:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{A} \psi(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} \ . \tag{24}$$

Exercício: Demonstrar o teorema de Ehrenfest (correspondência clássica):

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle \ , \tag{25}$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \mathbf{F} = -\nabla \langle V(\mathbf{x}) \rangle \ , \tag{26}$$

• O operador Hamiltoniano e a Eq. de Schrödinger dependente do tempo

$\rightsquigarrow$ Vamos quantizar um sistema clássico simplesmente substituindo as grandezas clássicas por seus respectivos operadores quânticos, ou seja, escrevemos a função Hamiltoniana do sistema clássico e então fazemos as substituições que seguem:

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \ , \tag{27}$$

$$\mathbf{p} \to -i\hbar\nabla \ , \tag{28}$$

$\rightsquigarrow$ A função Hamiltoniana do sistema clássico é simplesmente a soma de todas as energias dos sistema. No caso de uma partícula de massa m, temos simplesmente:

$$H = T + V = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x},t) = E$$

Convertendo à Mecânica Quântica, sabemos que os operadores atuam sobre a função de ondas:

$$H = T + V = E \rightarrow \hat{H}\psi = \hat{E}\psi \ ,$$

de onde tiramos a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\hat{H}\psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t) \ . \tag{29}$$

sendo para o caso da partícula

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2 + V(\mathbf{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x},t) \tag{30}$$

$\leadsto$ A equação (29) é bem geral e pode ser aplicada a sistemas com muitas partícula, ou então sistemas de spin, etc. No caso descrito para uma partícula única $\hat{H}$ é um operador diferencial com autovalores correspondentes. Como equações de autofunções e autovalores podem ser representados em forma matricial, este operador $\hat{H}$ pode ser descrito através de uma matriz apropriada.

Partindo de (29), reescrita abaixo por comodidade:

$$\hat{H}\psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t) \ .$$

podemos recuperar o resultado da equação independente do tempo, obtida anteriormente. Para tal basta supor:

$$\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar} \ ,$$

e substituir na equação para obter:

$$\hat{H}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z).$$

$\leadsto$ Como já mencionado, a equação acima é uma equação de autovalor, sendo que a cada autovalor E deve corresponder uma autofunção $\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}$.

O Poço de Potencial Infinito Unidimensional

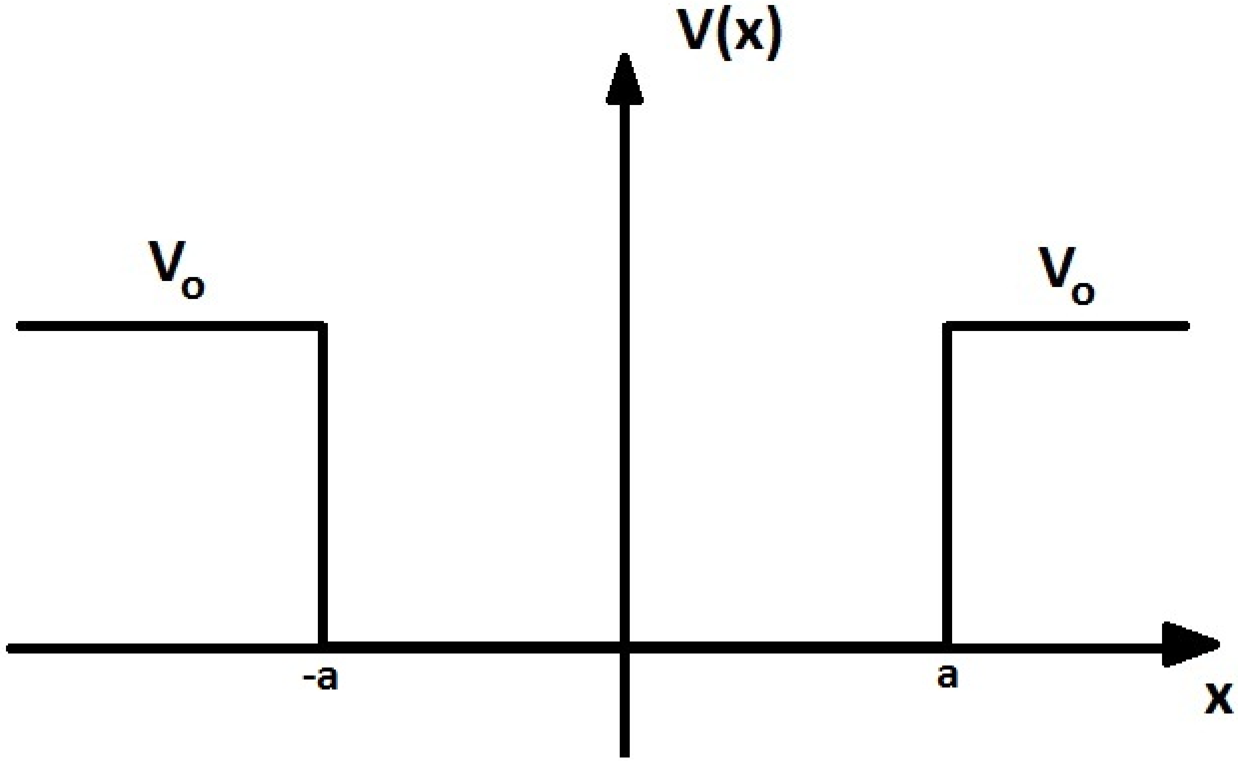
• Para fixar conceitos vamos considerar o problema de um poço de potencial infinito em uma dimensão espacial x.

Nesse caso, a equação a ser resolvida é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \ , \qquad (31)$$

$\rightsquigarrow$ Devemos especificar agora a energia potencial $V(x)$, que está mostrado na próxima página.

Poço de Potencial Infinito Unidimensional: $V_0 \to \infty$.



$\rightsquigarrow$ Observe que $\psi \to 0$ para $|x| \geq a$, uma vez que $V_0 \to \infty$ e portanto é impenetrável.

• Devemos resolver o problema acima descrito, sujeito à condição:

$$\psi(x=a)=\psi(x=-a)=0 \ .$$

Para tal, vale observar que $V(x)=V(-x)$ e o termo de energia cinética obviamente é invariante por simetria de inversão.

$\diamondsuit$ Antes de prosseguir a análise vale a pena fazer um comentário a respeito de simetrias.

• SIMETRIAS E CONSEQUÊNCIAS:

Imagine que o operador Hamiltoniano do sistema satisfaça a seguinte equação

$$\hat{H}\psi=E\psi \ ,$$

e é invariante por uma transformação de simetria, que iremos denotar $\hat{S}$.

Imagine que $\hat{H}$ possa ser representado na forma matricial (sempre é possível!), tal que uma transformação de similaridade (de simetria) o deixe invariante, ou seja:

$$\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1} = \hat{H} \ .$$

$\rightsquigarrow$ Todas as operações de simetria de $\hat{H}$ formam um grupo denominado *Grupo das Simetrias de* $\hat{H}$. Existe um ramo da matemática que estuda certas relações como essas denominado *Teoria de Grupos*!

Aplicando a operação $\hat{S}$ à eq. de Schrödinger, obtemos:

$$\hat{S}\hat{H}\psi = \hat{S}E\psi \ ,$$

Utilizando a matriz identidade $\hat{S}\hat{S}^{-1} = \hat{S}^{-1}\hat{S} = 1$:

$$\hat{S}\hat{H}(\hat{S}^{-1}\hat{S})\psi = (\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1})\hat{S}\psi = E\hat{S}\psi \ ,$$

mas $\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1} = \hat{H}$ de tal forma que definindo:

$$\psi' = \hat{S}\psi$$

$$\hat{H}\psi' = E\psi'$$

$\rightsquigarrow$ Se ψ' não é idêntica a ψ então mais de uma autofunção de $\hat{H}$ tem a mesma autoenergia E!!! Isso é denominado degenerescência!!!

$\rightsquigarrow$ Conclusão: Simetria = Degenerescência espectral!!! Mais de uma autofunção pode ter o mesmo valor de energia.

$\rightsquigarrow$ É possível colocar interações no sistema. Por exemplo originalmente um átomo pode estar livre no espaço e o seu Hamiltoniano tem certas simetrias. Alguns níveis de energia serão degenerados. Em princípio o nível orbital ns apresenta degenerescência com relação ao spin.

$\rightsquigarrow$ Se interações adicionais são incluídas no sistema, como aplicação de um campo magnético no caso do spin, que não compartilham das simetrias originais de $\hat{H}$, algumas dessas simetrias poderão ser quebradas. No exemplo dado, um dos spins será favorecido energeticamente na presença do campo, em relação ao outro e nesse caso, a degenerescência de spin foi removida!

$\rightsquigarrow$ Um mesmo nível de energia pode possuir duas ou mais autofunções relacionadas por uma transformação de simetria. Se a simetria é quebrada, então essas diferentes autofunções poderão corresponder a níveis diferentes de energia. Diz-se que por efeito de interação e/ou quebra de simetria ocorreu a separação (splitting) de alguns níveis degenerados.

• Voltando à análise do poço de potencial, verificamos que para a operação de inversão $\hat{P}x = -x$, o Hamiltoniano é invariante, ou seja, $\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} = \hat{H}$.

Nesse caso:

$$\hat{H}(\hat{P}\psi(x)) = E(\hat{P}\psi(x))$$

ou seja $\psi(x)$ e $\hat{P}\psi(x)$ tem a mesma energia. No caso unidimensional, vamos admitir $\psi(x)$ e $\hat{P}\psi(x)$ são idênticas a menos de um sinal, ou seja, as autofunções $\psi(x)$ devem ser autofunções do operador de paridade $\hat{P}$:

$$\hat{P}\psi(x) = \pm 1\psi(-x).$$

• Resolvendo a equação diferencial na região $V(x) = 0$, uma vez que $\psi(x)$ deve se anular para $|x| \geq a$, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \ , -a \leq x \leq a; \tag{32}$$

cuja solução geral, sujeita a condições de contorno e simetria, é dada por

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

onde A e B são constantes a determinar e

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ .$$

• *Funções de Paridade Par*

Nesse caso $\psi(x) = \psi(-x)$, implicando $B = 0$.

$$\psi(x) = A\cos(kx) \ , \tag{33}$$

Aplicando as condições de contorno $\psi(a) = \psi(-a) = 0$, temos para $A \neq 0$:

$$\cos(ka) = 0 \rightarrow k_n = n\frac{\pi}{2a} \ , n = 1, 3, 5, 7...$$

e as autoenergias então serão dadas por:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}n^2 = E_0 n^2 \ , n = 1, 3, 5, 7...$$

com $E_0 = \hbar^2\pi^2/(8ma^2)$.

Exercício 1) Determinar o coeficiente A_n nas funções pares, para normalizar a função na forma

$$\int_{-a}^{a} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \ .$$

Exercício 2) *Funções de Paridade Ímpar*

$$\psi(x) = -\psi(-x)$$

Demonstre que para as funções ímpares $A = 0$ e $B \neq 0$ na solução geral, ou seja:

$$\psi(x) = B\sin(kx) \ , \tag{34}$$

encontre B_n para normalização da função e ainda mostre que:

$$E_n = E_0 n^2 \ , n = 2, 4, 6, 8...$$

$\rightsquigarrow$ Observe que no poço de potencial infinito o espectro de energias é discreto, porém infinito. Para $n >> 1$ a razão entre $(n+1)^2$ e n^2 tende para a unidade, ou seja, o espectro tende ao contínuum embora seja discreto!

$\rightsquigarrow$ Além disso, vamos analisar a inclusão de uma perturbação, por exemplo aplicação de um campo elétrico uniforme ao longo de x, que pode ser obtido de um potencial na forma $V'(x) = -eE_0x$.

$\rightsquigarrow$ Nesse caso a perturbação V' permite que uma partícula com carga e, massa m possa "saltar" de um estado par para um estado ímpar, mas não para outro estado par, pois a probabilidade de ocorrer essa transição seria dada por

$$P \propto \int_{-a}^{a} \psi_m(x)^* V'(x) \psi_n(x) dx \ .$$

$\rightsquigarrow$ Uma vez que $V'(x)$ é uma função ímpar, somente para produtos $\psi_m^*\psi_n$ ímpares, com resultado total par $\psi_m V' \psi_n$ a integral é não nula. Este tipo de resultado derivado das simetrias das autofunções leva o nome de *Regras de Seleção*!

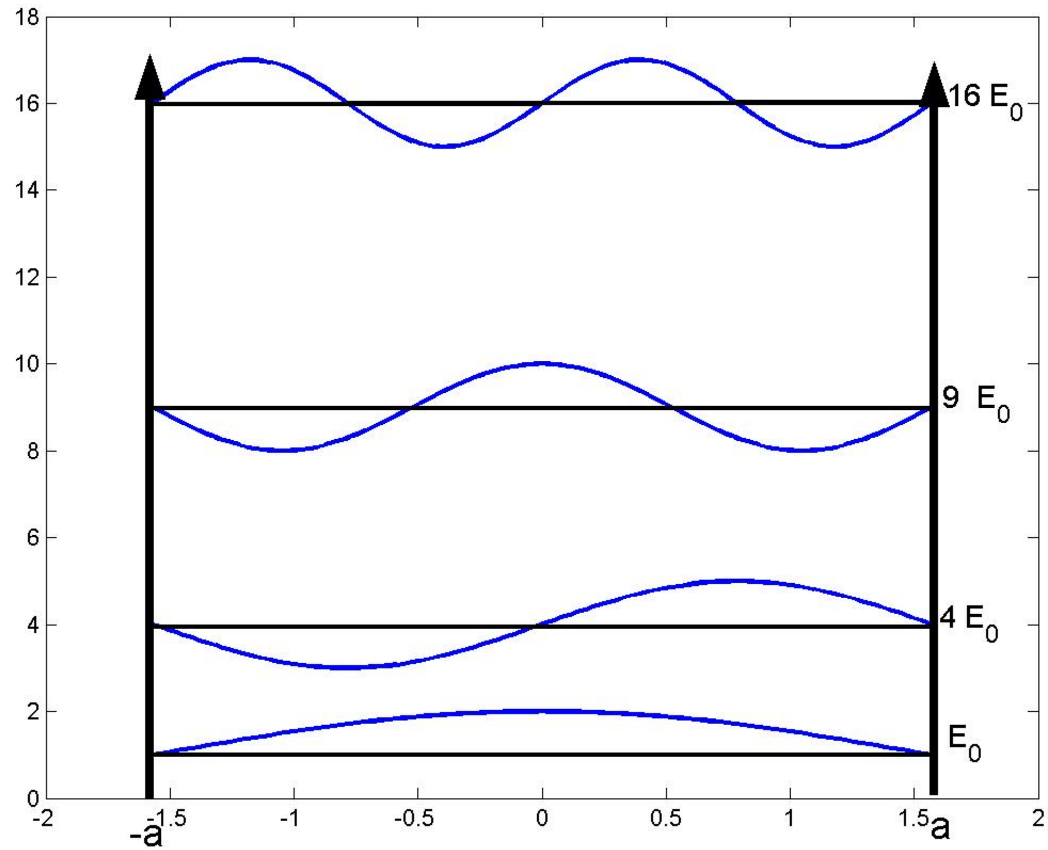


Figure 1: Gráfico das soluções com energias $E = E_0 n^2$, para $n = 1, 2, 3, 4...$ no poço de potencial. Observe que soluções pares e ímpares são intercaladas, mas o estado de mais baixa energia é par e o primeiro estado excitado é ímpar.

Exercício: Encontre a solução do problema do poço de potencial simétrico, igual ao analisado em aula, porém com V_0 finito. Nesse caso haverá uma parte do espectro de energias discreto, para $E < V_0$ e uma parte contínua, para $E > V_0$.

Você deverá encontrar as equações transcendentais na forma:

$$k\tan(ka) = \alpha \quad (\text{ Modo } \ \text{Par}) \quad \text{e} \quad k\cot(ka) = -\alpha \quad (\text{ Modo } \ \text{Impar}) \ .$$

onde $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ e $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$

Deve haver continuidade de $\psi(x)$ e $d\psi(x)/dx$ nas interfaces $x = \pm a$!!

Dica: Utilizar soluções com paridade definida (par ou ímpar separadamente) e no caso $E < V_0$:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{-\alpha|x|} \;, |x| > a, \\ \psi(x) &= B\cos(kx) + C\sin(kx), -a \leq x \leq a, \end{aligned}$$

Para o caso $E > V_0$ você deverá redefinir α para $\alpha = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$ e a solução $\psi(x)$ para $\psi(x) = A'\cos(\alpha x) + B'\sin(\alpha x)$ nas regiões $x < -a$ e $x > a$.

Observe que o valor de k é contínuo e consequentemente o espectro de energia E, para $E >> V_0$, pois nesse caso $\alpha \to k$.