

**I Escola de Física de Verão**

# **Introdução à Mecânica Quântica**

**Prof. Jorge André Swieca**

**Instituto de Física U.F.C.**

**Fevereiro, 1971**

Nos princípios deste século uma série de fenômenos vieram por em dúvida a aplicabilidade da Física Clássica a processos em nível atômico. Os principais são - 1 - A radiação do corpo negro. Aplicando a estatística clássica a radiação no interior de uma caixa (corpo negro) a temperatura T, Rayleigh e Jeans obtiveram o seguinte resultado para a densidade de energia por unidade de frequência.

$$E(\nu) = \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} K T$$

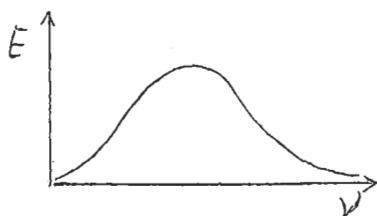


Logo a energia total  $E = \infty$

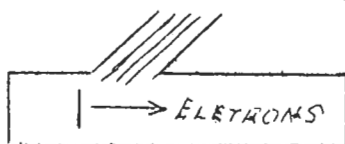
Para evitar este paradoxo Planck (1900) introduziu a audaz idéia de que a absorção e a emissão da radiação é feita de maneira discreta através de quantas de energia  $E = h\nu$ . Com isto a fórmula é :

$$E(\nu) = \frac{8 \pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

pequenos valores de  $\nu \rightarrow \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} k T$   
grandes valores de  $\nu$  (Lei de Wien)  $\rightarrow \frac{8 \pi \nu^3}{c^3} e^{-h\nu/kT}$

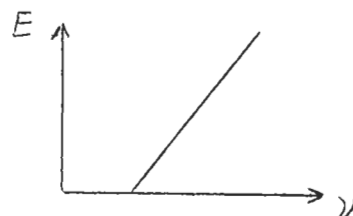


## 2 - O Efeito Fotoelétrico



Experimentalmente

$$E = h \nu - A$$



Do ponto de vista da Física Clássica este resultado é paradoxal já que a energia do eletrão não depende de intensidade de luz mas só de sua frequência.

Para aplicar este efeito Einstein (1906) estendeu a idéia de Planck postulando que a radiação eletromagnética seria intrinsecamente constituída de quantas com energia  $E = h\nu$  como se fôsem corpúsculos cuja energia depende de frequência da radiação (fotons).

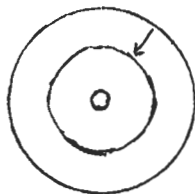
Outra confirmação de natureza corpuscular de radiação encontra-se no efeito Compton (1923).

3 - O espectro atômico discreto. As experiências do Rutherford levaram ao modelo planetário para os átomos onde os núcleos pesados e carregados positivamente teriam orbitando ao seu redor os eletrões negativos. De acordo com este modelo aplicando as leis da eletrodinâmica clássica os eletrões sendo partículas carregadas teriam que radiar, perdendo energia e aproximando-se do núcleo onde seriam finalmente absorvidos. Além disso a medida que se aproximariam do núcleo aumentariam a sua velocidade angular e portanto o seu espectro de radiação seria contínuo. O que se observa contudo são raias espectrais perfeitamente bem definidas obedecendo por exemplo no Átomo de Hidrogênio, a fórmula de

Balmer na região do visível,

$$V = R \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{m^2} \right) \quad V = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

A explicação do caráter discreto dos espectros atômicos foi obtida por Bohr (1913) numa extraordinária síntese das idéias de Planck, Einstein e Rutherford. Bohr in troduziu a noção de quotização das órbitas dos electrons postulando que as únicas órbitas permitidas seriam as que satisfizessem a relação  $L = n \hbar$  ( $\hbar = h/2\pi$  L mo mentum angular e que os electrons poderiam pular de uma órbita para outra emitin do ou absorvendo um foton com  $E = h\nu$  de acôrdo com a fórmula de Einstein.



O modêlo de Bohr para o átomo deu um ospetro atômico em pleno acôrdo com o obser vado experimentalmente para o átomo de Hidrogênio.

A sua regra de quantização ostendida por Sommerfeld (1916) para o caso de um sistema periódico qualquer

$$\oint P_i dq_i = n_i h$$

forma a base da chamada velha mecânica quântica que so desenvolveu entre 1913 o 1925. Esta teoria retém ainda as idéias básicas da física clássica impondo rogras de quantização ad-hoc que tornam discretas quantidades que clássicamente seriam contínuas. Por isto mesmo logo porcebeu-se que ela seria simplesmente um clo on tro a física clássica e uma nova teoria que ainda estava por vir. A impossibilida de de prever a intensidade de linhas espectrais o mau acôrdo com os espectros de átomos mais complicados e o ospetro Raman reforçou a necessidade de procurar uma nova teoria que reformularia de maneira mais drástica as idéias clássicas. Esta reformulação veio simultaneamente por dois caminhos. O 1º iniciou-se com a obser vação de De Broglia (1924) de que da mesma forma que a luz fenômeno clássicamente ondulatório exibe aspectos corpusculares as partículas materiais como o electron por exemplo deveria possuir propriedades ondulatórias estando a elas associada uma onda com  $E = \hbar\omega$ ,  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ .

Estas ondas de matéria foram diretamente detectadas por Davidson-Germom (1921) na difração de electrons por um cristal.

A idéia que De Broglia fazia destas ondas era bastante grosseira como as ondas produzidas por um barco, mas desenvolvida por Schroodinger (1925) levou à Mecânica Ondulatória e a Eq. de Schroodinger.

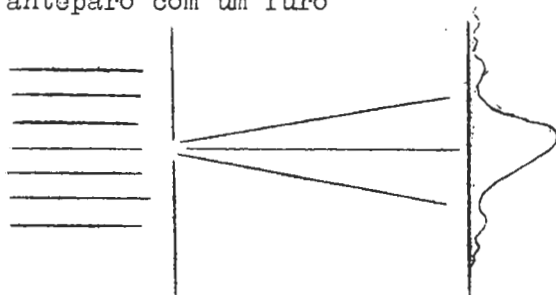
O 2º caminho que levou à nova mecânica quântica foi percorrido por Heisenberg e é de certa forma mais profundo porque basoou-se em uma reavaliação drástica dos conceitos clássicos quando aplicados ao domínio atômico. Heisonberg (1925) partiu da obsrvação de que as idéias clássicas quando aplicadas ao domínio atômico provavelmente não fazem sentido pois estão bascadas em noções como P. ex. órbita de um electron que não podem ser observadas. Decidia então formular sua te

oria em termos das quantidades diretamente observáveis como frequências diferenças de energia etc. e criou a sua mecânica das matrizes. Embora à primeira vista sua teoria seja bem diferente da de Schrodinger logo verificou-se a equivalência entre as mesmas. Uma análise mais extensa das limitações da aplicação de idéias clássicas ao domínio atômico feita pelo próprio Heisenberg e por Bohr levou à chamada Interpretação de Copenhagen da Mecânica Quântica que é a mais aceita atualmente.

## - II -

Vamos iniciar o curso propriamente dito ilustrando estas limitações das clássicas quando extrapoladas para fora do seu domínio natural por meio de algumas experiências ideais antes de entrar no formalismo da M. Q.

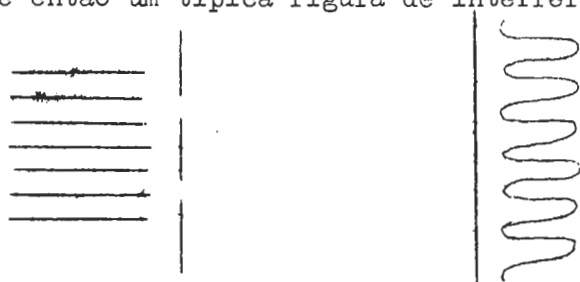
Consideremos assim um feixe de partículas por exemplo electrons incidindo sobre um anteparo com um furo



De acordo com De Broglia e como experimentalmente verificado por Davidson-Germen aos electrons devemos associar uma onda. Se o furo tiver dimensões pequenas comparadas com o comprimento de onda de De Broglia obteremos uma figura de difração

$$\Delta \theta \sim \frac{\lambda}{d} \quad \text{em completa analogia com a ótica ondulatória.}$$

Podemos agora complicar a nossa experiência introduzindo um anteparo com dois furos. Aparece então um típica figura de interferência,



que ilustra ainda mais dramaticamente o caráter ondulatório da matéria. Vamos agora diminuindo a intensidade do feixe de electrons até atingir uma intensidade bastante reduzida, digamos um electron por minuto. Notamos então que de minuto em minuto um ponto do nosso ecran aparecerá iluminado como se uma partícula ali batesse. Os pontos se distribuirão de maneira bastante irregular mas se esperarmos bastante tempo e lançarmos nº de pontos iluminados versus posição, reobtemos a figura de interferência. Duas lições podem ser daqui extraídas: A 1ª é a de que os electrons apesar de exibirem aspectos ondulatórios comportam-se também como partículas. A 2ª é a de que os aspectos ondulatórios não são devidos a um efeito de interação de um grande número de partículas mas que estão presentes mesmo em experiências envolvendo o electron onde assumem um caráter estatístico (ondas de probabilidade). Isto im

plica na dualidade onda-corpúsculo que possui um aspecto aparentemente paradoxal.

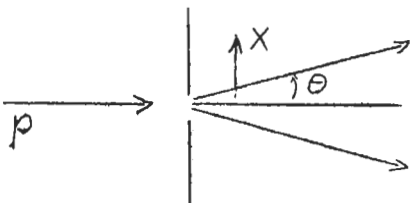
Assim vejamos: Se considerarmos os electrons como partículas poderíamos dizer que ao atravessar o anteparo êle passa ou pelo 1º ou pelo 2º buraco. Mas nôs te caso a figura de interferência observada torna-se inteiramente incompreensível. Podemos dizer assim com certeza que ao atravessar o anteparo o electron não se comporta como partícula e que não faz sentido perguntar por qual dos furos êle passou ou afirmar que êle necessariamente passou por um dos dois. Por outro lado ao bater no ecran o electron não mais se comporta como uma onda que teria uma densidade de energia proporcional a  $|\psi(x)|^2$  e que sensibilizaria o ecran em tôda a sua extensão ao passo que somente um ponto é sensibilizado; e passa a se comportar como partícula. Vemos assim que uma das características básicas de sistemas quânticos é que o seu comportamento como onda ou como partícula depende dos arranjos experimentais a que estão sujeitos.

O ecran fluorescente que permite uma medida da localização do electron exibe a sua característica corpuscular. O anteparo por outro lado exibe a sua característica ondulatória. As manifestações de onda ou corpúsculo não acontecem simultaneamente mas são complementares. (Princípio de Complementaridade - Bohr).

São visões nossas diferentes de uma mesma realidade que se manifesta de diversas formas dependendo do modo como a analisamos.

Para explorar um pouco mais a influência do arranjo experimental sôbre o sistema quântico, vamos colocar na vizinhança dos dois furos do anteparo detectores do electrons. Neste caso certamente poderemos saber e (portanto dizer) se o electron passou pelo 1º ou 2º buraco. Como compreender agora a nossa figura de interferência? Não precisamos compreendê-la porque ela simplesmente desapareceu. A presença de detectores modificou o arranjo experimental produzindo uma alteração no nosso sistema quântico de tal modo que agora também ao passar pelo anteparo o electron se comporta como partícula. Mas, dirão vocês, certamente seria possível reduzir ou controlar a alteração feita pelo nosso arranjo experimental sôbre o sistema? Não, a alteração é incontrolável. A influência do arranjo experimental sôbre o sistema está representada pelas relações de incerteza de Heisenberg

$\Delta p \Delta x \sim h$  que exprime o fato de que um arranjo experimental que foi feito para localizar um electron com grande precisão ( $\Delta x$  pequeno) necessariamente produz alterações incontroláveis sôbre o seu momento ( $\Delta p$  grande) e vice-versa. A validade destas relações pode ser ilustrada tomando o nosso exemplo de um anteparo com um furo de dimensão  $d$  como arranjo experimental para localizar o electron com coordenada  $\Delta x = d$



$$e \sim \frac{\lambda}{d}$$

$$P_x = P \cdot \operatorname{tg} \theta \sim P \cdot \frac{\lambda}{d} = \frac{P\lambda}{\Delta x} \Rightarrow \Delta P_x \Delta x = P\lambda \leq h$$

Para finalizar a discussão qualitativa vamos frisar que a teoria quântica é intrinsicamente indeterminística no sentido de que o máximo que podemos dela extrair são previsões sôbre a probabilidade de quo um acontecimento ocorra ou deixe de ocorrer. (Por exemplo a probabilidade de o electron atingir um ponto determinado

do ecran). O seu carácter probabilístico é totalmente diferente do que por exemplo ocorre na teoria cinética dos gases (clássica) onde é fruto de nossa ignorância sobre os valores do enorme número de parametros do sistema. No caso quântico a in determinação é intrínseca a própria natureza dos fenómenos. (Interpretação de Co penhagen).

### - III -

O carácter ondulatório dos fenómenos quânticos sugere que possamos dos crever o estado de um sistema (por exemplo 1 electron) por meio de uma, função  $\psi(\underline{x}, t)$  obedecendo a uma equação de onda que ainda não determinamos. Por exem plo para uma partícula com momentum  $\underline{P}$  e energia  $E = p^2/2m$  as relações de De Bro glia sugerem

$$\psi(\underline{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{P} \cdot \underline{x} - \frac{p^2}{2m} t)}.$$

Axioma 1 - O estado de uma partícula é descrito por uma função de onda  $\psi(\underline{x}, t)$  que é em geral complexa.

Como discutido no cap. II esta onda não é clássica com uma densidade de energia proporcional a  $|\psi(\underline{x}, t)|^2$  mas uma onda de probabilidade.

Axioma 2 - A densidade de probabilidade do ao fazermos uma medida de localização no tempo  $t$  encontramos a partícula nas vizinhanças de  $\underline{x}$  é  $|\psi(\underline{x}, t)|^2$ . (Born).

A probabilidade de encontrar a partícula em algum ponto do espaço sendo 1 obte mos a chamada condição de normalização  $|\psi(\underline{x}, t)|^2 = 1$ . A experiência do antepa ro com dois furos revela que existe interferência entre a onda  $\psi_1$  que passa pelo 1º furo e a onda  $\psi_2$  que passa pelo 2º. Isto mostra que a densidade de probabili dade da partícula bater no ecran num dado ponto é dada por  $|\psi_1 + \psi_2|^2$  o não  $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$

Axioma 3 - (Princípio de Superposição) Se  $\psi_1$  e  $\psi_2$  são funções de onda en tão  $\psi_1 + \psi_2$  também é. Se  $\psi_1$  é uma função de onda descrevendo um dado estado o  $\psi_1$  descreveu o mesmo estado. A condição de norma lização limita o a uma faso arbitrária.

O princípio de superposição mostra que as funções de onda podem ser tomadas como sendo vetores de um espaço vetorial. (Espaço de Hilbert das funções de quadrado integravel muito conhecido dos matemáticos). O produto escalar de 2 funções neste espaço é dado por  $(\psi, \phi) = \int \psi^*(\underline{x}, t) \phi(\underline{x}, t) d^3x$  (vorifiquo que satisfaz as prop.do prod. escalar).

Os estados de um sistema podem sor representados por funções de onda satisfazendo  $(\psi, \psi) = \int \psi^*(\underline{x}) \psi(\underline{x}) d^3x = \text{finito}$  (quadrado inte

gravel) e sempre podemos (e o faremos) sem perda de generalidade tomar  $(\psi, \psi) = 1$ .

Vimos ainda há pouco que o aparelho de medida atua sobre o estado do sistema logo sobre a sua função de onda. É razoável portanto associar aos aparelhos de medida operadores que atuem sobre os vetores de estado (funções de onda). O Princípio de Superposição sugere que estes operadores sejam lineares.

Como  $|\psi(\underline{x})|^2$  representa a densidade de probabilidade de que a partícula seja localizada nas vizinhanças de  $\underline{x}$  é claro que o valor médio de  $\underline{x}$  é dado por

$$\langle \underline{x} \rangle = \int \underline{x} \psi^*(\underline{x}) \psi(\underline{x}) d^3x = \int \psi^*(\underline{x}) \underline{x} \psi(\underline{x}) d^3x$$

Axioma 4 - As grandezas observáveis estarão associados operadores (lineares) hermitianos - O valor médio de um observável  $O$  num estado  $\psi$  é dado por  $(\psi, O_{op} \psi) = \int \psi^*(x) O_{op} \psi(x) d^3x$  onde  $O_{op}$  é o operador associado ao observável.

Observação I - Operadores hermitianos são os que satisfazem a relação

$$(\psi, O\psi) = (O\psi, \psi) = (O\psi, \psi).$$

A restrição a operadores hermitianos vem do fato de que em qualquer observação iremos obter valores médios reais.

II - É importante frisar que os valores médios acima mencionados correspondem à medidas feitas sobre um grande número de sistemas todos eles com a mesma função de onda e não à medidas sucessivas sobre o mesmo sistema. Isto porque o ato de medida altera a função de onda do sistema, de modo que ao fazer medidas sucessivas nós não mais estamos trabalhando com o sistema no mesmo estado.

O desvio médio quadrático de um observável num estado

$$\Delta O^2 = \langle (O - \langle O \rangle)^2 \rangle = (\psi, (O - \langle O \rangle)^2 \psi)$$

dá uma medida de quão bem definida está grandeza a ser observada no estado em consideração. Se o desvio médio quadrático é zero a grandeza tem um valor bem determinado i, e. todas as medidas darão o mesmo resultado. Neste caso

$$\Delta O^2 = 0 = (O - \langle O \rangle)\psi, (O - \langle O \rangle)\psi) = 0$$

$$O\psi = \langle O \rangle \psi$$

Ora  $\langle O \rangle$  é um número real e a equação acima nada mais é do que uma equação de autovalores. Em geral uma equação do tipo

$$O\psi_n = o_n \psi_n$$

possui um número infinito de soluções com  $n$  um índice discreto ou contínuo. Os  $o_n$  representam os valores que a grandeza pode tomar efetuando-se medidas sobre o sistema. Os  $\psi_n$  são os estados do sistema correspondentes a valores bem definidos

dos  $(o_n)$  de  $O$ . Não importa qual seja a função de onda inicial do sistema uma vez efetuada a medida  $O$  e obtido o autovalor  $O_n$  podemos ter certeza do que o sistema tem este valor logo será descrito por  $\psi_n$  (redução de função de onda pelo ato de medida). (A rigor só é válido nesta forma simples para as chamadas medidas de 1ª espécie).

Exemplos de operadores associados a grandezas observáveis.

A - É intuitivo que a medida de posição esteja associada ao operador  $\underline{X}$  definido

$$(\underline{x})_{op} \psi(\underline{x}) = \underline{x} \psi(\underline{x})$$

as autofunções de  $(\underline{x})_{op}$  com autovalores  $\underline{a}$  correspondendo a estados da partícula localizados em  $\underline{a}$  satisfazem

$$(\underline{x})_{op} \phi_{\underline{a}}(\underline{x}) = \underline{a} \phi_{\underline{a}}(\underline{x}) \Rightarrow \phi_{\underline{a}}(\underline{x}) = \delta(\underline{x} - \underline{a})$$

$$\delta(\underline{z}) = \begin{cases} 0, & \underline{z} \neq 0 \\ \infty, & \underline{z} = 0 \end{cases}$$

$$\int \delta(\underline{z}) d^3z = 1$$

B - A medida do momentum deve ser representada por  $(\underline{P})_{op}$  tal que atuando sobre uma autofunção  $e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{P} \cdot \underline{x} - Et)}$

$$(\underline{P})_{op} e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{P} \cdot \underline{x} - Et)} = \underline{P} e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{P} \cdot \underline{x} - Et)} \quad \text{o que implicaria}$$

$$(\underline{P})_{op} = -i\hbar \nabla$$

Problema - Verifique que  $(\underline{x})_{op}$  e  $(\underline{P})_{op}$  são hermitianos.

Em espaços vetoriais com dimensão finita é bem sabido que os operadores hermitianos possuem um conjunto completo de autovetores ortogonais. Embora isto não seja necessariamente verdadeiro em um espaço com infinitas dimensões como é o espaço das funções, somente consideraremos operadores hermitianos. Com esta propriedade qualquer função  $\psi$  pode ser expandida em termos de autofunções.

$$\psi = \sum a_n \psi_n \quad \text{Com} \quad o \psi_n = o_n \psi_n$$

$$a_n = (\psi_n, \psi)$$

Para o caso de autovalores contínuos a série deve ser substituída por uma integral. Por exemplo no caso das autofunções do operador  $\underline{P}$  temos

$$\psi(\underline{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\underline{p}) e^{i \underline{P} \cdot \underline{x}} d^3p \quad (\text{Integral de Fourier}).$$

$$g(\underline{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(\underline{x}) e^{-i \underline{P} \cdot \underline{x}} d^3p$$



É importante notar que as autofunções correspondentes a autovalores contínuos não são de quadrado integrável e portanto não são vetores próprios do nosso espaço de Hilbert. Isto contudo não causa dificuldades se nós lembrarmos que nós nunca podemos preparar um sistema num estado que tenha um valor bem definido de uma grandeza que assumo valores contínuos (mesmo clássicamente) e que portanto as autofunções correspondentes a autovalores contínuos não são fisicamente reali-záveis. São idealizações às vezes muito úteis mas em qualquer experiência real nós teremos que o valor de grandeza contínua necessariamente está num certo inter-valo.

Aplicado ao exemplo do momentum linear isto nos leva a funções de onda que são os chamados pacotes de onda

$$\psi_{p \pm \Delta p}(x) = \int_{p - \Delta p/2}^{p + \Delta p} e^{ip \cdot x / \hbar} dp^3 \quad \text{que são de quadrado integrável.}$$

Usando agora a expansão do qualquer vetor-estado em termos de autofunções do operador  $O$  obtemos

$$(\psi, O\psi) = \sum a_n^* a_m O_m \frac{(\psi_n, \psi_m)}{\delta_{nm}} = \sum |a_n|^2 O_n$$

o que juntamente com

$$(\psi, \psi) = \sum |a_n|^2 = 1$$

nos leva a interpretação de  $|a_n|^2$  como sendo a probabilidade (no caso contínuo, densidade de probabilidade) de ao fazermos a medida  $O$  obtermos o resultado  $O_n$ . Isto está em pleno acôrdo com o que foi imposto no Axioma 2 para o caso de x. (Ve-rifique).

A ortogonalidade entre autofunções correspondentes a autovalores distin-tos corresponde ao fato de serem mutuamente exclusivas as medidas com resultados diferentes. (Problema - Demonstro a ortogonalidade).

Na mecânica clássica costuma-se caracterizar o estado de uma partícula pela sua posição x e o seu momentum P. Isto implica na necessidade de observar si-multaneamente com precisão arbitrária x e P.

Na mecânica quântica as relações de incerteza de Heisenberg mostram não ser possível a medida simultânea destas duas grandezas.

Em geral para que duas grandezas possam ser simultaneamente observadas é necessário e suficiente que exista um conjunto completo de autofunções comuns aos dois operadores.

$$A\psi_i = a_i\psi_i \quad B\psi_i = b_i\psi_i$$

Teorema - A condição necessária e suficiente para que dois operadores hermitia-nos  $A$  e  $B$  tenham um conjunto completo de autofunções em comum é que o seu comutador seja nulo

$$[A, B] = AB - BA = 0$$

Problema - Procure demonstrar este teorema pelo menos no caso não degenerado, em que a cada autovalor corresponda uma única autofunção.

É intuitivo que teremos em geral o comutador entre dois operadores dando uma medida do grau de impossibilidade de observar simultaneamente as grandezas associadas a estes operadores. Com efeito seja

$$[A, B] = iC \quad (A, B, C \text{ hermitianos})$$

e consideremos os operadores hermitianos

$$\Delta A_{op} = A - \langle A \rangle \quad e \quad \Delta B_{op} = B - \langle B \rangle \quad \text{com}$$

$$[\Delta A_{op}, \Delta B_{op}] = iC.$$

Os desvios médios quadráticos são

$$\Delta A^2 = (\psi, \Delta A_{op}^2 \psi); \quad \Delta B^2 = (\psi, \Delta B_{op}^2 \psi)$$

Tomemos

$$((\alpha \Delta A_{op} + i \Delta B_{op})\psi, (\alpha \Delta A_{op} + i \Delta B_{op})\psi) = (\phi, \phi) \geq 0 \quad \text{com } \alpha \text{ real}$$

$$\begin{aligned} (\phi, \phi) &= (\psi, (\alpha \Delta A_{op} - i \Delta B_{op})(\alpha \Delta A_{op} + i \Delta B_{op})\psi) = \alpha^2 (\psi, \Delta A_{op}^2 \psi) + \\ &+ (\psi, \Delta B_{op}^2 \psi) - i\alpha (\psi, \Delta B_{op} \Delta A_{op} - \Delta A_{op} \Delta B_{op} \psi) = \alpha^2 \Delta A^2 + \Delta B^2 - \\ &- \alpha (\psi, C \psi) \geq 0 \end{aligned}$$

Para que esta curva de 2º grau em  $\alpha$  seja sempre maior do que zero é necessário o suficiente que ela não tenha zeros sobre o eixo real ou seja

$$(\psi, C \psi)^2 - 4 \Delta A^2 \Delta B^2 \leq 0 \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq |(\psi, C \psi)|/2$$

Podemos aplicar esta desigualdade ao caso particular  $A = X$  e  $B = P$  obtendo uma dedução formal das relações de incerteza de Heisenberg. Para isto calculemos

$$[x, p]$$

$$\left[ x, -i\hbar \frac{d}{dx} \right] \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) + i\hbar \frac{d}{dx} x \psi(x) = i\hbar \psi(x) \Rightarrow$$

$$[x_{op}, p_{op}] = i\hbar \quad \text{ou em geral tomando as 3 componentes} \quad [x_i, p_j] =$$

$$= i\hbar \delta_{ij} \quad (\text{Born-Jordan})$$

$$i, j = 1, 2, 3.$$

Vemos assim imediatamente que

$$\Delta x \Delta p \geq (\psi, \hbar/2 \psi) = \hbar/2 \quad (\text{rel. de incerteza de Heisenberg})$$

Por outro lado  $[x_i, x_j] = 0$  (verifique)

$$[p_i, p_j] = 0$$

é possível observar simultaneamente as 3 comp. da posição ou as 3 comp. do momentum.

Mais alguns exemplos -

Momentum angular - Clássicamente é dado por  $\underline{L} = \underline{x} \wedge \underline{p}$ . Na mecânica quântica vamos adotar a mesma expressão substituindo  $\underline{x}$  e  $\underline{p}$  por operadores.

$$\underline{L}_{op} = \underline{x}_{op} \wedge \underline{p}_{op} = -i\hbar \underline{x} \wedge \underline{\nabla}$$

Em componentes

$$L_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) ; \quad L_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) ; \quad L_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Procuramos obter agora as autofunções e autovalores de  $L_z$  (Por simetria os autovalores de  $L_x$  e  $L_y$  serão os mesmos de  $L_z$ ). Para isto é conveniente trabalhar em coordenadas polares

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Nestas coordenadas

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} = -i\hbar \left( \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \left( \frac{x}{y} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{y}{x} \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

A equação de autovalores é portanto

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\phi) = c \psi(\phi) \Rightarrow \psi(\phi) = N e^{i \frac{c}{\hbar} \phi}$$

Mas  $\psi(2\pi) = \psi(0) \Rightarrow c = m\hbar \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$

Vemos assim a quantização de componente do momentum angular que já havia sido usado por Bohr deduzida a partir da Mecânica Quântica. A constante de normalização  $N$  pode ser obtida impondo a condição

$$\int_0^{2\pi} \psi^*(\phi) \psi(\phi) d\phi = 1 \Rightarrow |N|^2 2\pi = 1 \quad N = 1/\sqrt{2\pi} \quad (\text{a menos de uma fase arbitrária e não observável}).$$

Podemos agora perguntar se é possível observar simultaneamente as 3 componentes do momentum angular.

Para isto necessitamos das regras de comutação.

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

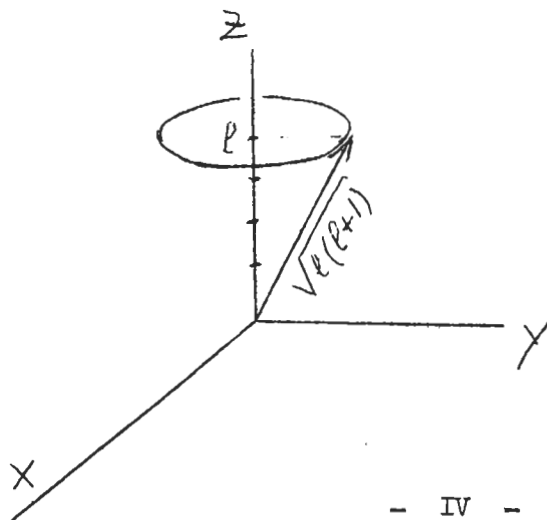
(Verifique)

que mostram imediatamente que as 3 componentes do momentum angular não são simultaneamente observáveis. Contudo o quadrado do momentum angular total

$$\vec{L} \cdot \vec{L} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L^2 \quad \text{satisfaz}$$

$$[L^2, L] = 0 \quad (\text{verifique})$$

de modo que é possível observar simultaneamente o momentum angular total e por exemplo a sua componente segundo o eixo do z. A não observabilidade simultânea de  $L_x, L_y, L_z$  é um elemento importante da nova Mecânica Quântica que leva ao resultado de que fixado um autovalor de  $L^2$ , que o cálculo mostra ser dado por  $\ell(\ell+1)\hbar^2$ , ( $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ), o máximo autovalor de  $L_z$  é dado por  $\hbar$  e não como indicaria a física clássica ou a velha mecânica quântica  $\sqrt{(\ell+1)}\hbar$ . Isto leva a uma imagem intuitiva do momentum angular total precessionando em torno do eixo do z.



- IV -

Por enquanto estivemos estudando a cinemática da Mecânica Quântica. O problema dinâmico surge quando procuramos determinar a evolução temporal do um sistema. Como o estado de um sistema quântico é descrito por uma função de onda é claro que a dinâmica será especificada por meio de uma equação de ondas.

Considoremos de início a onda plana de De Broglie.

$$\psi_p(\underline{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{p} \cdot \underline{x} - E t)} \quad (1)$$

que descreve uma partícula livre com momentum e energia bem definidos.

A relação clássica entre energia momentum

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (2)$$

representa agora uma relação entre os autovalores do operador energia (ou Hamiltoniana) e do momentum.

De (1) segue

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_p(\underline{x}, t) = E \psi_p(\underline{x}, t) \quad (3)$$

$$(-i \hbar \nabla)^2 \psi_p(\underline{x}, t) = p^2 \psi_p(\underline{x}, t)$$

$$\hookrightarrow p \circ p$$

Comparando (3) com (2) obtemos imediatamente a equação de ondas satisfeita por (1)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_p(\underline{x}, t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_p(\underline{x}, t) \quad (4)$$

↳ Laplaciano

Pelo princípio de superposição e pela completeza das autofunções do operador montum a onda mais geral que descreve uma partícula livre será

$$\psi(\underline{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\underline{p}) e^{i \left( \underline{p} \cdot \underline{x} - \frac{p^2}{2m} t \right)} d^3 p \quad (5)$$

A linearidade da equação (4) mostra que também (5) satisfará a mesma equação

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{x}, t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{x}, t) \quad (4)$$

Temos, assim a equação de ondas que descreve a evolução temporal de uma partícula livre. É claro que o caso mais interessante que é o de uma partícula sujeita a um potencial ainda está em aberto.

Podemos ter um guia heurístico para a equação mais geral notando que (4) pode ser obtida da relação clássica (2) mediante a substituição

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5)$$

$$\underline{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$$

Considerando (5) como regra geral e lembrando que a energia de uma partícula sujeita ao potencial  $V(\underline{x}, t)$  é

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

chegamos a

Axioma 5 - A evolução temporal da função de onda de uma partícula sujeita a um potencial  $V$  é dada pela equação de Schroedinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{x}, t) = \left( - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{x}, t) \right) \psi(\underline{x}, t) \quad (6)$$

O operador  $- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$  é o chamado operador Hamiltoniano (ou energia) de uma partícula correspondendo a expressão clássica  $\frac{p^2}{2m} + V$

Problema - Verifique que o operador energia é hermitiano.

A partir da equação de Schroedinger podemos facilmente obter uma equação que corresponde a conservação de probabilidade

Multiplicando (6) por  $\psi^*$  obtemos

$$i\hbar \psi^* (\underline{x}, t) \frac{\partial \psi}{\partial t} (\underline{x}, t) =$$

$$= - \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* (\underline{x}, t) \nabla^2 \psi (\underline{x}, t) + V (\underline{x}, t) \psi^* (\underline{x}, t) \psi (\underline{x}, t) \quad (7)$$

tomando o complexo conjugado de (6) e multiplicando por  $\psi (\underline{x}, t)$  encontramos

$$- i\hbar \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial t} (\underline{x}, t) \right) \psi (\underline{x}, t) =$$

$$= - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 \psi^* (\underline{x}, t)) \psi (\underline{x}, t) + V (\underline{x}, t) \psi^* (\underline{x}, t) \psi (\underline{x}, t) \quad (8)$$

Subtraindo (8) de (7) temos após transformações simples

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* (\underline{x}, t) \psi (\underline{x}, t))$$

$$\nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* (\underline{x}, t) \nabla \psi (\underline{x}, t) - (\nabla \psi^* (\underline{x}, t)) \psi (\underline{x}, t)) \right\} \quad (9)$$

Esta é uma típica equação de continuidade. (Em tudo semelhante à equação de continuidade  $\partial \rho / \partial t + \text{div} \vec{j} = 0$  da eletrodinâmica clássica que representa a conservação de carga).

Como  $\rho = \psi^* \psi$  representa a densidade de probabilidade então

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \}$$

deve ser entendida como uma corrente de probabilidade e reescrevemos (9) em forma

compacta como  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (9)$

Da mesma forma que uma equação do tipo (9) na eletrodinâmica clássica leva a conservação da carga, na Mecânica Quântica ela conduz a conservação de probabilidade. Assim vejamos: integrando (9) sobre um volume  $V$  do espaço obtemos

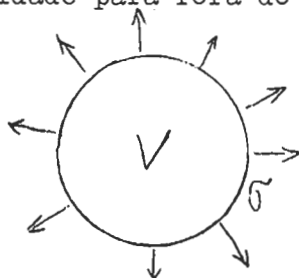
$$\frac{d}{dt} \int_V \rho d^3x + \int_V \text{div} \vec{j} d^3x = 0$$

o usando o teorema de Gauss

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho d^3x = - \int_S \vec{j} \cdot d\vec{s} \quad (10)$$

onde  $\oint$  representa a superfície do volume  $V$ .

Assim vemos que o decréscimo de probabilidade no volume  $V$  será igual ao fluxo da corrente da probabilidade para fora do volume



Fazendo agora o volume tender ao infinito e lembrando que as funções de onda sendo de quadrado integrável se anulam no infinito o termo a direita em (10) se anula e obtemos

$$\frac{d}{dt} \int \rho d^3x = 0 \quad (11)$$

o que significa que a probabilidade de encontrar a partícula em algum ponto do espaço não se altera com o tempo (e é sempre igual a 1). A Mecânica Quântica que aqui desenvolvemos não é capaz portanto de descrever processos de emissão ou absorção de partículas. (A não ser do modo fenomenológico introduzindo potenciais complexos - experimento).

Na maioria das situações de interesse físico, os potenciais que atuam sobre as partículas não dependem explicitamente do tempo. Neste caso a equação de Schroedinger pode ser simplificada pelo chamado método de separação das variáveis i. e. procuraremos soluções da forma  $\psi(\underline{x}, t) = \phi(\underline{x}) X(t)$ .

Introduzindo na equação de Schroedinger obtemos

$$i\hbar \phi(\underline{x}) \frac{dX(t)}{dt} = X(t) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{x}) \right) \phi(\underline{x})$$

ou dividindo por  $\phi(\underline{x}) X(t)$

$$\frac{i\hbar}{X(t)} \frac{dX(t)}{dt} = \frac{1}{\phi(\underline{x})} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{x}) \right) \phi(\underline{x}) \quad (12)$$

como o termo a esquerda em (12) depende somente de  $t$  e o a direita somente de  $\underline{x}$  a igualdade entre ambos significa que são constantes e portanto chamando a constante de  $E$

$$\frac{dX(t)}{dt} = -i\hbar E X(t) \Rightarrow X(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{x}) \right) \phi(\underline{x}) = E \phi(\underline{x})$$

o que nada mais é do que a equação de autovalores para a energia. Chamando de  $\phi_n(\underline{x})$  e  $E_n$  as soluções genéricas deste problema de autovalores vemos que pela linearidade da equação de Schroedinger e completude das autofunções do operador energia teremos como solução geral da equação do Schroedinger

$$\psi(\underline{x}, t) = \sum a_n \phi_n(\underline{x}) e^{-i E_n t/\hbar} \quad (13)$$

que generaliza a expansão (5). Os coeficientes  $a_n$  são determinados pelas condições iniciais do problema, por exemplo pela função de onda no instante  $t$ . (Note a grande analogia entre o que fizemos e o problema ondulatório clássico de estudar o comportamento da radiação numa cavidade ressonante).

Vemos assim que para potenciais que não dependem de tempo o problema dinâmico pode ser reduzido a obtenção das autofunções e autovalores da energia.

O problema de autovalores para a energia é de interesse central na Mecânica Quântica.

Iremos analisá-lo agora com alguns exemplos simples.

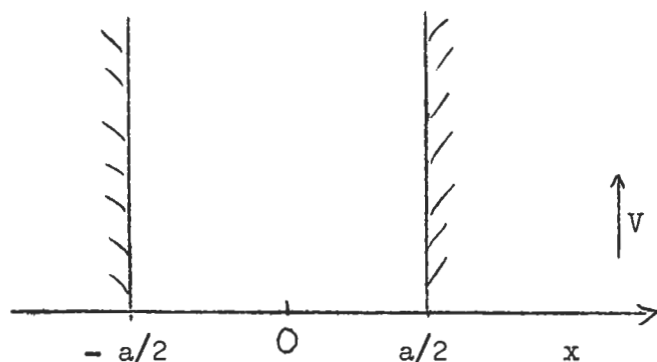
- V -

Para simplificar estudaremos agora problemas em uma dimensão espacial.

1 - Partícula numa caixa impenetrável.

Uma caixa impenetrável (que é naturalmente uma idealização) pode ser representada por um potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } -a/2 < x < a/2 \\ \infty & \text{para } |x| > a/2 \end{cases}$$



A equação de autovalores para a energia (também chamada de equação de Schroedinger)

$$E_n \phi_n = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) \phi_n \quad \xrightarrow{\text{1 dimensão espacial}}$$

na região  $|x| < a/2$  se reduz simplesmente à

$$E_n \phi_n(x) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \phi_n(x)$$



que tem por solução geral

$$\phi_n(x) = A_n \cos k_n x + B_n \sin k_n x$$

$$k_n = \sqrt{\frac{2m E_n}{\hbar^2}}$$

Na região  $|x| > a/2$   $V = \infty$  e a partícula não deve se encontrar ali logo sua função de onda é zero para  $|x| > a/2$ .

Impondo a continuidade da função de onda nos pontos  $x = \pm a/2$  obtemos

$$0 = A_n \cos(k_n a/2) + B_n \sin(k_n a/2)$$

$$0 = A_n \cos(k_n a/2) - B_n \sin(k_n a/2)$$

ou somando e subtraindo

$$\left. \begin{array}{l} A_n \cos(k_n a/2) = 0 \\ B_n \sin(k_n a/2) = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} \text{ou } \cos(k_n a/2) = 0 \text{ e } B_n = 0 \\ \text{ou } \sin(k_n a/2) = 0 \text{ e } A_n = 0 \end{array} \quad \begin{array}{l} (14) \\ (15) \end{array}$$

$$\begin{aligned} \text{De (14) temos } k_n a/2 &= (2n+1)\pi/2 & E_n &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} (2n+1)^2 (\pi)^2 \\ & & n &= 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (16)$$

de onde tiramos um conjunto infinito de autovalores e autofunções  $\phi_n(x) =$

$$= A_n \cos k_n x$$

$$A_n \text{ deve ser determinado por normalização } \int_{-a/2}^{a/2} |\phi_n(x)|^2 dx = 1$$

$$\text{De (15) obtemos } k_n a/2 = n\pi = 2n\pi/2$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (2n)^2 \pi^2 \quad n = 1, 2, \dots \quad (17)$$

com as autofunções  $\phi_n(x) = B_n \sin k_n x$ . O caso  $n = 0$  é excluído aqui pois lo va a  $\phi_n = 0$  que não representa estado algum. Vemos assim,

A - juntando (16) e (17) os autovalores da energia são dados por

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (n\pi)^2 \quad n = 1, 2, \dots$$

com autofunções que são alternadamente simétricas (cos) ou antisimétricas (sen) dependendo de  $n$  ser ímpar ou par. Isto é uma propriedade geral das autofunções de potenciais simétricas que será usada mais tarde em exemplos mais complicados.

B - O menor autovalor da energia é

$$E = \frac{\hbar^2}{2m a^2} (\pi)^2 \neq 0.$$

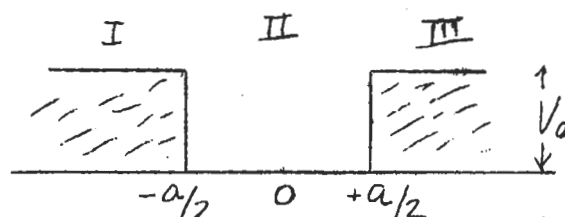
Ele corresponde a chamada energia de ponto zero que é um efeito essencialmente quântico, pois a partícula não pode ficar em repouso no interior da caixa (o que daria  $E = 0$ ) já que em virtude das relações de Heisenberg

$$\Delta p a \sim \hbar \Rightarrow E \sim \frac{\Delta p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m a^2}$$

C - A completeza das autofunções da energia neste exemplo nada mais é do que o conhecido fato de que podemos expandir qualquer função definida no intervalo  $-a/2, a/2$  em termos de uma série de Fourier. Note também a perfeita analogia entre o que fizemos e o problema de obter os modos normais de vibração de uma corda presa nos pontos  $-a/2$  e  $a/2$ .

2 - Partícula num poço de potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } |x| < a/2 \\ V_0 & \text{para } |x| > a/2 \end{cases}$$



A equação de Schroedinger se separa naturalmente em 3 regiões.

Na região II  $V = 0$  e temos

$$E_n \phi_n^{II} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_n^{II} \quad (18)$$

Para I ou III temos

$$E_n \phi_n^{I,III} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right) \phi_n^{I,III} \quad (19)$$

Existem dois casos fisicamente distintos neste problema

A -  $E < V_0$  que classicamente corresponderia a uma partícula movimentando-se entre  $-a/2$  e  $a/2$  que corresponde ao chamado estado ligado, dando valores discretos para a energia.

B -  $E > V_0$  que classicamente corresponderia a uma partícula movendo-se de  $-\infty$  a  $+\infty$  que dará um espectro contínuo para a energia.

Vamos discutir o caso A. Temos assim de (18)

$$\phi^{II}(x) = A_{II} \cos kx + B_{II} \sin kx, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (20)$$

e de (19) como  $V_0 > E$

$$\phi^{I,III}(x) = A^{I,III} e^{jx} + B^{I,III} e^{-jx}, \quad j = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (21)$$

Vemos de (21) que embora classicamente a partícula não possa penetrar nas regiões I e III quanticamente isto não é mais verdade. Contudo não devemos esperar que a probabilidade de encontrar a partícula se torne  $\infty$  quando  $x \rightarrow \pm \infty$  o que implica em

$$A^{III} = 0, \quad B^I = 0.$$

Tendo resolvido a equação de Schroedinger em I, II e III devemos agora impor a continuidade da função de onda e de sua  $1^a$  derivada em  $a/2$ . Isto porque da própria equação

$$E\phi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right),$$

obtem-se integrando num pequeno intervalo em torno de  $\pm a/2$

$$\frac{d\psi}{dx} \left( \frac{a}{2} + \epsilon \right) - \frac{d\psi}{dx} \left( \frac{a}{2} - \epsilon \right) \rightarrow 0; \quad \frac{d\psi}{dx} \left( -\frac{a}{2} + \epsilon \right) - \frac{d\psi}{dx} \left( -\frac{a}{2} - \epsilon \right) \rightarrow 0$$

o que implica na continuidade de  $\frac{d\psi}{dx}$  em  $\pm a/2$ , e integrando mais uma vez obtem-se a continuidade de  $\psi$ .

O cálculo pode ser bastante simplificado se usarmos o fato de que as autofunções do operador energia com um potencial simétrico são simétricas ou antisimétricas como já foi visto no exemplo anterior (Problema - Procure demonstrar este fato em geral).

A1 - Caso simétrico

Neste caso tomamos  $B_{II} = 0$  e  $B^{II} = A^I = B$

Basta impor a continuidade no ponto  $a/2$  pois a simetria garante que ela será também satisfeita em  $-a/2$ .

$$\phi_{II}(a/2) = \phi_{III}(a/2) \Rightarrow A \cos(ka/2) = B e^{-ja/2} \quad (22)$$

$$\frac{d\phi_{II}}{dx}(a/2) = \frac{d\phi_{III}}{dx}(a/2) \quad -kA \sin\left(k\frac{a}{2}\right) = -jB e^{-ja/2} \quad (23)$$

Dividindo (23) por (22) obtemos a equação de autovalores  $k \operatorname{tg} \left( \frac{ka}{2} \right) = j$  (24)

Esta equação não pode ser resolvida exatamente mas podemos obter uma solução gráfica.

Por isto é conveniente introduzir as variáveis  $\xi = \frac{ka}{2}$ ,  $n = \frac{ja}{2}$

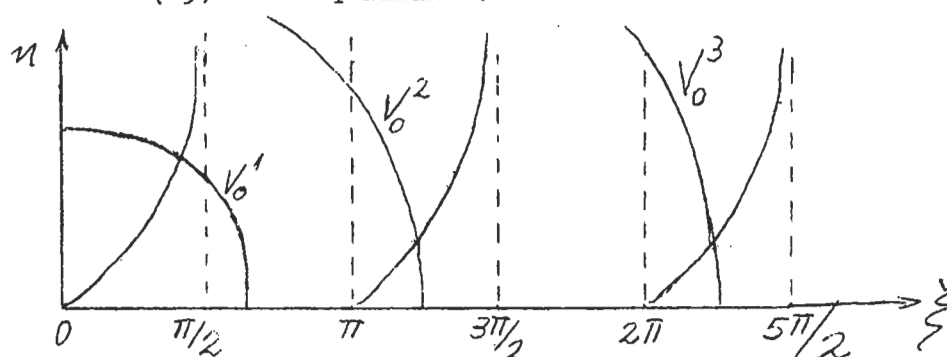
com

$$\xi^2 + n^2 = \frac{a^2}{4} \left( \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right) = \frac{a^2 m V_0}{2 \hbar^2} \quad (25)$$

e escrever (24) como

$$\xi + \operatorname{tg} \xi = n \quad (24)$$

Devemos obter soluções do (24) e (25) que apareçam como interseção da curva  $\xi + \operatorname{tg} \xi$  com a circunferência (25) no 1º quadrante.



Vemos que a medida que  $V_0$  cresce o número de soluções aumenta e que as novas soluções vão sempre aparecendo na borda do poço  $n = 0$  ou  $E = V_0$  e depois vão aprofundando.

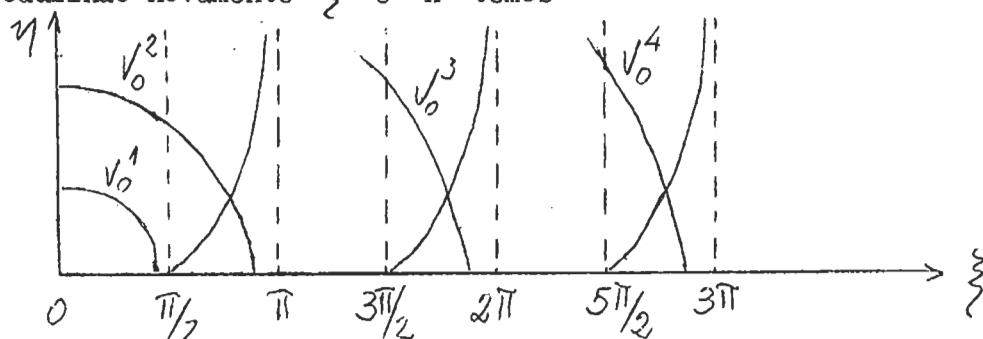
## A2 - Caso antisimétrico

Neste caso tomamos  $A_{II} = 0$  e  $B^{III} = -A^I = -A$

As condições de continuidade da função e sua 1ª derivada em  $a/2$  dão a equação de autovalores

$$k \cotg \left( \frac{ka}{2} \right) = -j.$$

Introduzindo novamente  $\xi$  e  $n$  temos



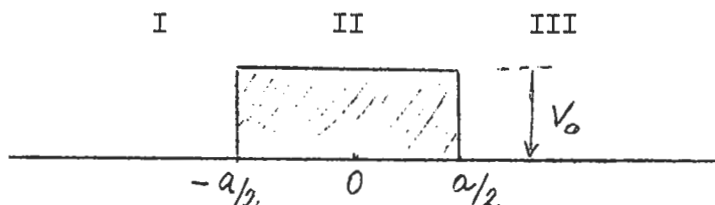
Vemos assim que para um potencial pequeno não há soluções antisimétricas e que elas vão surgindo alternadamente com as simétricas. O caso anterior  $V_0 = \infty$  pode ser obtido como situação limite (Faça-o).

Por enquanto estudamos somente o problema  $E < V_0$  correspondente ao estado ligado e vemos que neste caso os autovalores de energia são efetivamente discretos correspondendo ao movimento periódico da partícula clássica.

O problema  $E > V_0$  deixaremos como exercício pois iremos estudar um outro que a ele se assemelha mas é fisicamente mais interessante.

### 3 - Barreira de potencial - (Efeito tunel)

Neste caso temos a partícula sujeita a um potencial  $V(x)$  
$$\begin{cases} 0 & \text{para } |x| > a/2 \\ V_0 > 0 & \text{para } |x| < a/2 \end{cases}$$



Clássicamente uma partícula vindo de  $-\infty$  com  $E < V_0$  seria refletida em  $-a/2$  e não poderia nunca penetrar na região III. Como veremos isso não é verdade em Mecânica Quântica onde existe uma probabilidade da partícula passar para a região III correspondendo a efeito tunel de grande aplicação em estado sólido (semi-condutores, transistores) e física nuclear (desintegração atômica, emissão  $\alpha$ , etc.) Nas regiões I e III a equação de Schrodinger é

$$E \phi^{I,III} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi^{I,III} \quad \text{com} \quad \phi^{I,III}(x) = A^{I,III} e^{ikx} + B^{I,III} e^{-ikx} ; \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Como não queremos partículas vindo de  $+\infty$  colocamos

$$B^{III} = 0. \quad \text{Temos assim} \quad \phi^I(x) = A^I e^{ikx} + B^I e^{-ikx} \quad (26)$$

$$\phi^{III}(x) = A^{III} e^{ikx} \quad (27)$$

(26) descreve portanto a onda incidente e a refletida e (27) a onda transmitida. Introduzimos o coeficiente de transmissão

$$T = \frac{|A^{III}|^2}{|A^I|^2} \quad (28)$$

e o de reflexão

$$R = \frac{|B_I|^2}{|A_I|^2} \quad (29)$$

que dão uma medida de quanto é transmitido e quanto é refletido da onda incidente.

A conservação de probabilidade implica em  $|A_I|^2 = |A_{III}|^2 + |B_I|^2$  ou seja  $R + T = 1$ .

Para calcular os coeficientes R e T precisamos impor as condições de continuidade em  $\pm a/2$ . Neste caso não podemos usar condições de simetria, já que a condição de contorno imposta (partícula vindo de  $-\infty$ ) não é simétrica. Para  $E < V_0$  que é o caso mais interessante obtemos na região II

$$\phi^{II}(x) = A_{II} e^{jx} + B_{II} e^{-jx} \quad j = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

As condições de continuidade em  $x = -a/2$  dão

$$\text{função} \quad A_I e^{-ik a/2} + B_I e^{ik a/2} = A_{II} e^{-j a/2} + B_{II} e^{j a/2} \quad (30)$$

$$\text{derivada} \quad ik (A_I e^{-ik a/2} - B_I e^{ik a/2}) = j (A_{II} e^{-j a/2} + B_{II} e^{j a/2}) \quad (31)$$

em  $x = a/2$

$$\text{função} \quad A_{III} e^{ik a/2} = A_{II} e^{j a/2} + B_{II} e^{-j a/2} \quad (32)$$

$$\text{derivada} \quad ik A_{III} e^{ik a/2} = j (A_{II} e^{j a/2} - B_{II} e^{-j a/2}) \quad (33)$$

De (32) e (33) eliminamos  $A_{II}$  e  $B_{II}$  em função de  $A_{III}$ .

$$\text{Introduzimos em (30) e (31) e obtemos finalmente } A_I = e^{ika} A_{III} \left[ \cos hja - \frac{1}{2} \left( \frac{k}{j} - \frac{j}{k} \right) \sin hja \right]$$

$$\text{ou seja} \quad T = \left| \frac{A_{III}}{A_I} \right|^2 = \frac{1}{\cos^2 hja + \frac{1}{4} \left( \frac{k}{j} - \frac{j}{k} \right)^2 \sin^2 hja} \quad ; \quad R = 1 - T$$

Vemos que para grandes valores de  $ja$

$$T \sim e^{-2ja} \quad \text{isto é o efeito tunel}$$

decrece rapidamente com a altura do potencial  $V_0$  e com o seu alcance  $a$ .

## - VI -

Estudaremos agora um típico problema de evolução temporal da função de onda de um sistema a saber o movimento de um pacote de onda de uma partícula, livre. Novamente por simplicidade tomaremos o problema a uma dimensão espacial. Já sabemos que a função de onda mais geral para uma partícula livre é a 3 dimensões.

$$\psi(\underline{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\underline{p}) e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{p} \cdot \underline{x} - \frac{p^2}{2m} t)} d^3p$$

o a uma dimensão

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int g(p) e^{\frac{i}{\hbar} (p x - \frac{p^2}{2m} t)} dp$$

Introduzindo  $k = \frac{p}{\hbar}$  na última integral obtemos

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int a(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk \quad (34)$$

Com  $a(k) = g(p)^{\hbar}$

A inversão do Fourier do (34) com  $t = 0$  dá

$$a(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int \psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (35)$$

de modo que  $a(k)$  pode ser determinado pela condição inicial do problema e introduzindo em (34) nos dá a função de onda em qualquer instante futuro. Isto equivale a resolver o problema de Cauchy da Equação do Schroedinger.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t)$$

Tomaremos como condição inicial para o problema específico que iremos resolver

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi \Delta x^2)^{1/4}} e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} x} e^{-\frac{x^2}{4 \Delta x^2}} \quad (36)$$

onde  $\bar{p}$  é o valor médio do momentum nesta função de onda

$$\bar{p} = \int \psi^*(x, 0) (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x, 0) dx$$

$\Delta x$  é o desvio médio quadrático

o o fator  $\frac{1}{(2\pi \Delta x^2)^{1/4}}$  garante a normalização

$$\int \psi^*(x, 0) \psi(x, 0) dx = 1. \text{ (Verifique explicitamente estas 3 afirmativas).}$$

Temos assim um pacote de onda que se desloca com velocidade média (velocidade de grupo)

$$V = \frac{\bar{p}}{m} \quad \text{e que no instante } t = 0 \text{ tem uma incerteza na posição de } \Delta x.$$

Este pacote é chamado de incerteza mínima pois satisfaz as relações de incerteza de Heisenberg com o sinal de igualdade

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad \text{(Verifique)}$$

que a situação que mais se aproxima da física clássica.

Introduzindo (36). em (35) temos

$$a(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int \frac{1}{((2\pi) \Delta x^2)^{1/4}} e^{i \frac{\bar{p}}{\hbar} x} e^{-\frac{x^2}{4 \Delta x^2}} e^{-ikx} dx \quad (37)$$

A integral (37) pode ser resolvida completando o quadrado em x do expoente.

Assim escrevemos

$$e^{i \left( \frac{\bar{p}}{\hbar} - k \right) x - \frac{x^2}{4 \Delta x^2}} = e^{-\left( \frac{x}{2 \Delta x} + i \left( k - \frac{\bar{p}}{\hbar} \right) \Delta x \right)^2 - \left( k - \frac{\bar{p}}{\hbar} \right)^2 \Delta x^2}$$

$$\text{logo} \quad a(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \frac{1}{(2\pi \Delta x^2)^{1/4}} e^{-\left( k - \frac{\bar{p}}{\hbar} \right)^2 \Delta x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left( \frac{x}{2 \Delta x} + i \left( k - \frac{\bar{p}}{\hbar} \right) \Delta x \right)^2} dx$$

$$\text{Introduzindo a variável } z = \frac{x}{2 \Delta x} + i \left( k - \frac{\bar{p}}{\hbar} \right) \Delta x,$$

$$dx = \frac{dx}{2 \Delta x} \quad \text{obtemos}$$

$$a(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \frac{2 \Delta x}{(2\pi \Delta x^2)^{1/4}} e^{-\left( k - \frac{\bar{p}}{\hbar} \right)^2 \Delta x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz \quad (38)$$

A integral que aparece em (38) é bem conhecida e dá



$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi} \quad \text{Assim}$$

$$a(k) = e^{-\Delta x^2 (k - \frac{\bar{p}}{\hbar})^2} \left( \frac{2 \Delta x^2}{\pi} \right)^{1/4} \quad (39)$$

Vemos que  $a(k)$  que descreve a distribuição de momentum na função de onda (36) é uma gaussiana com centro em  $\frac{\bar{p}}{\hbar}$  e largura inversamente proporcional a  $\Delta x$  de acordo com as relações de incerteza.

Introduzindo agora  $a(k)$  dado por (39) e (34) podemos obter a evolução temporal do sistema.

A integral que aparece pode novamente ser reduzida a uma gaussiana pelo método de completar o quadrado (faça explicitamente o cálculo) e obtemos tomando o módulo quadrado para ter a densidade de probabilidade.

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \cdot \frac{1}{\left[ (\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2} \right]^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{(x - \frac{\bar{p}}{m}t)^2}{2 \left( \Delta x^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2} \right)} \right\} \quad (40)$$

Obtemos desta maneira uma distribuição de probabilidade (em  $x$ ) que é dada por uma gaussiana cujo centro se desloca com velocidade  $\frac{\bar{p}}{m}$  e cuja largura dada por  $\left[ \Delta x^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2} \right]^{1/2}$  aumenta com o tempo.

Este aumento da largura (dispersão do pacote de onda) pode ser intuitivamente compreendido como decorrendo do fato de termos uma incerteza no momentum  $\Delta p = \frac{\hbar}{2 \Delta x}$  e de velocidade  $\Delta v = \frac{\hbar}{2m \Delta x}$  logo para um tempo suficientemente grande devemos ter uma largura.

$$\Delta v t = \frac{\hbar}{2m \Delta x} \sim \left[ \Delta x^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2} \right]^{1/2}$$

Problema - Tome uma "partícula" com a massa 1kg e incerteza inicial  $\Delta x = 1\text{mm}$  e verifique que o pacote quase não sofre dispersão comportando-se de um modo que está de acordo com a física clássica.

Experimente com a massa da terra e com a massa de um electrón tomando incertezas  $\Delta x$  com ordens de grandeza razoáveis por exemplo para a terra 1 metro para o electrón  $10^{-8}\text{cm}$ .