# Propriedades das autofunções

Por representarem propriedades de um sistema físico, as autofunções devem apresentar características que reflitam isso.

Assim:

$\psi(x)$ deve ser finita (1)

$\psi(x)$ deve ser unívoca (2)

$\psi(x)$ deve ser contínua (3)

$\mathrm{d}\psi(x)/\mathrm{d}x$ deve ser finita (4)

$\mathrm{d}\psi(x)/\mathrm{d}x$ deve ser unívoca (5)

$\mathrm{d}\psi(x)/\mathrm{d}x$ deve ser contínua (6)

$P(x)$ finita e unívoca $\Rightarrow$ (1) & (2)

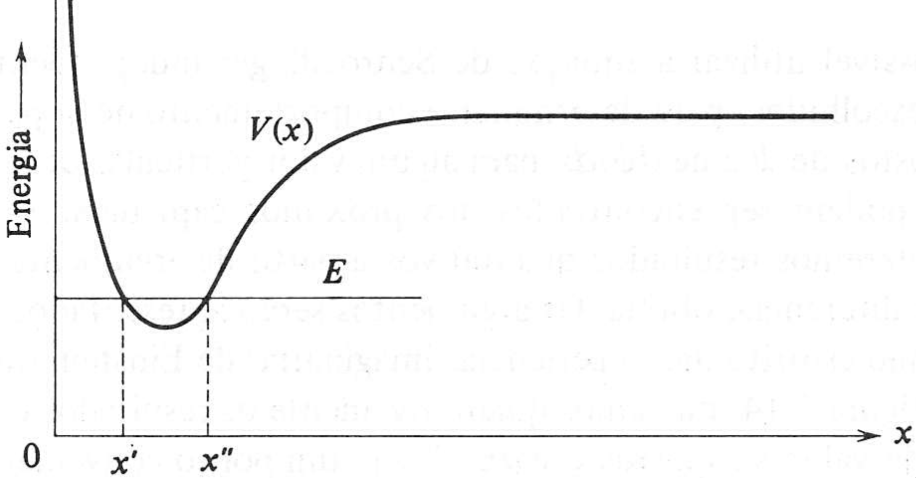
Valores esperados finitos e unívocos $\Rightarrow$ (4) & (5)

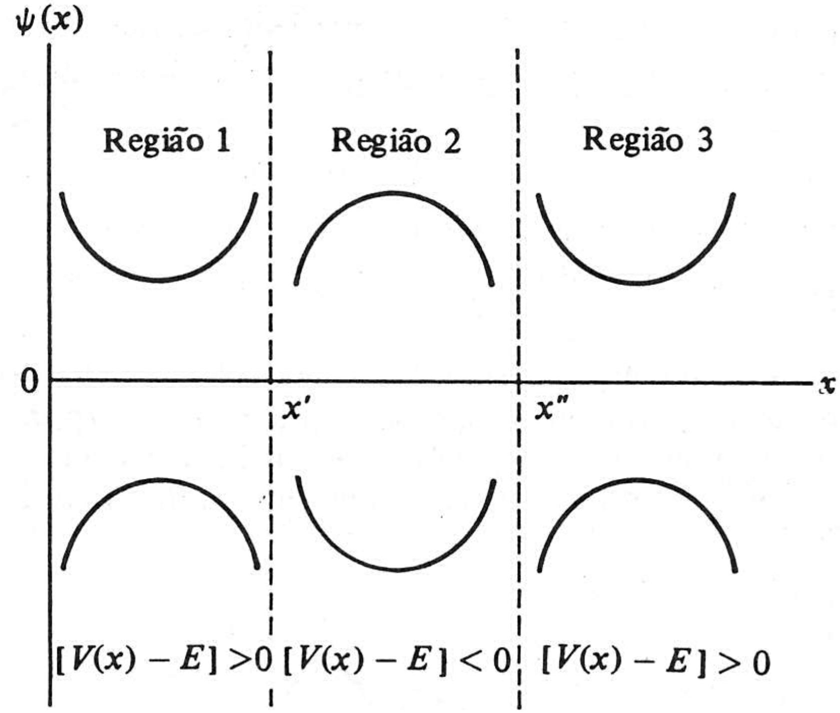
(4) $\Rightarrow$ (3)

$V(x)$, $E$ e $\psi(x)$ finitos $\Rightarrow d^2\psi/dx^2$ finita $\Rightarrow$ (6)

Análise qualitativa do comportamento das autofunções para um potencial $V(x)$:

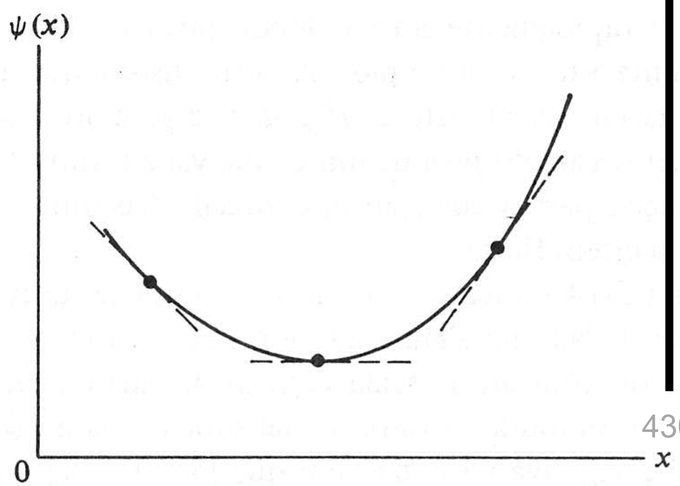
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi$$

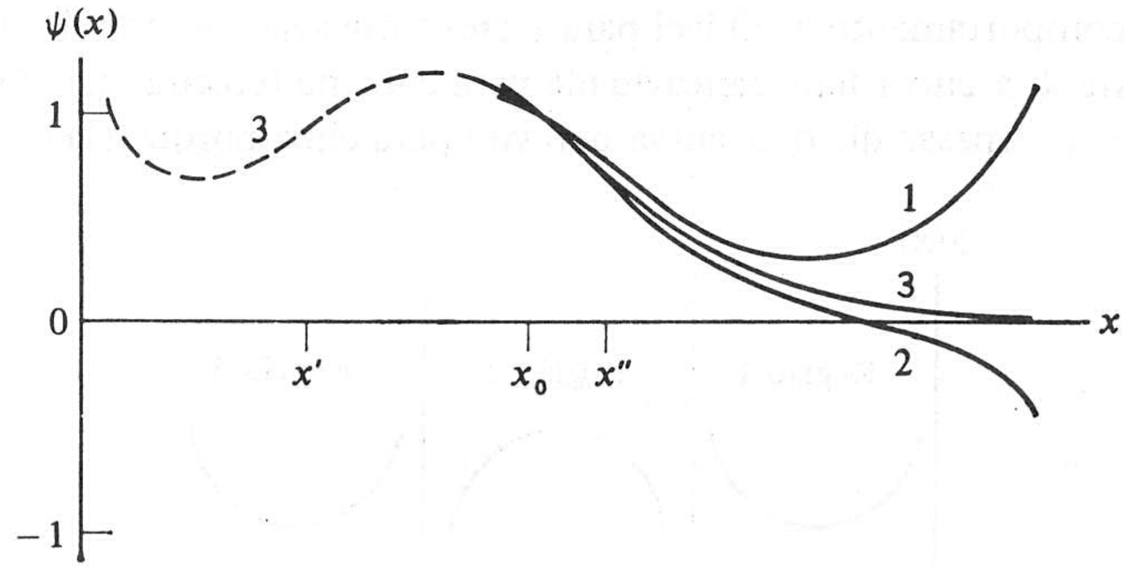


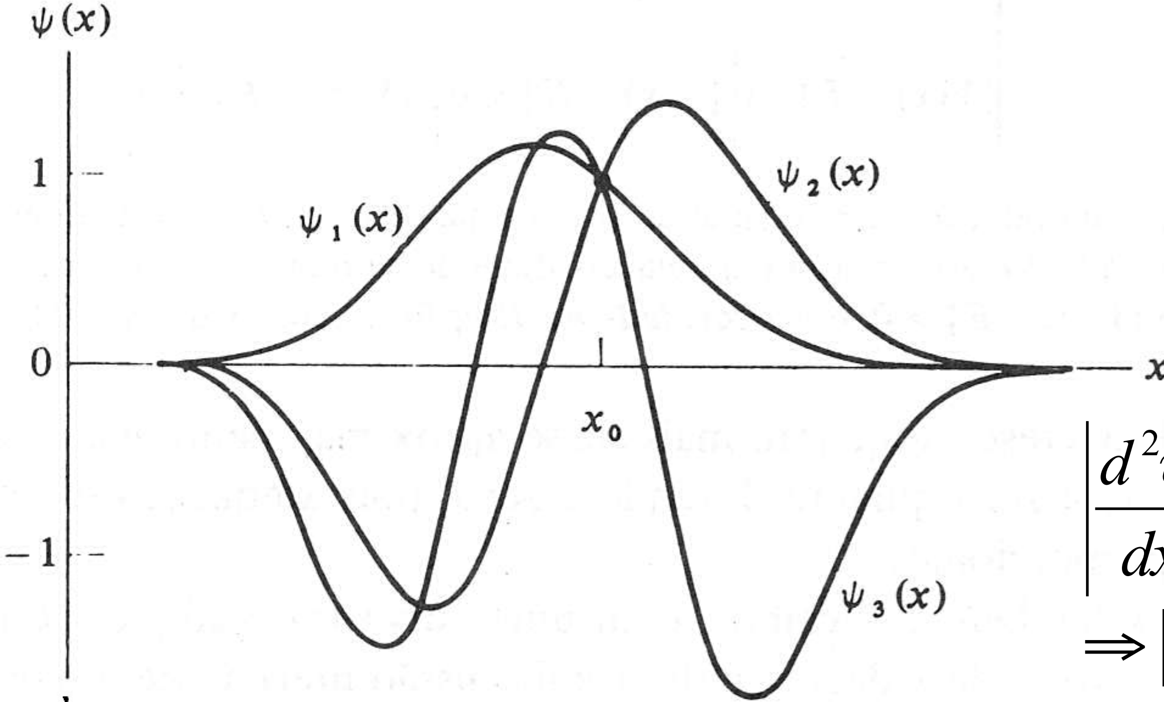




Se $\left[V(x) - E\right] > 0 \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2}$

tem o mesmo sinal que $\psi$



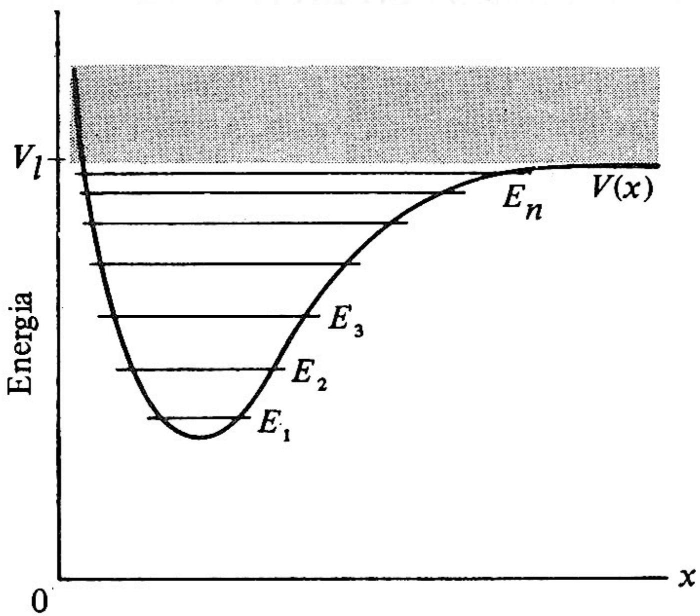






$$\left|\frac{d^2\psi_2}{dx^2}\right| > \left|\frac{d^2\psi_1}{dx^2}\right| \Rightarrow$$

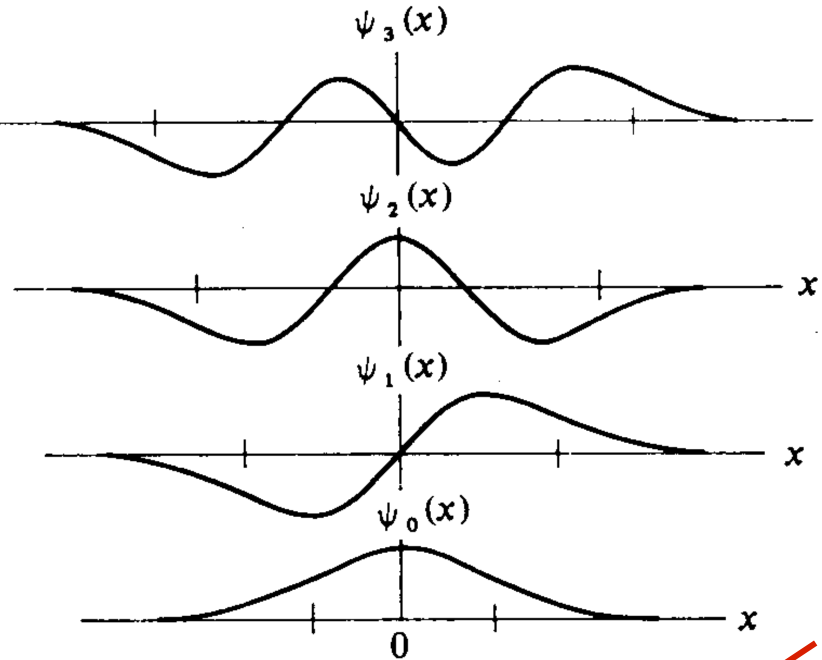
$$\Rightarrow \left|V(x) - E_2\right| > \left|V(x) - E_1\right| \Rightarrow$$

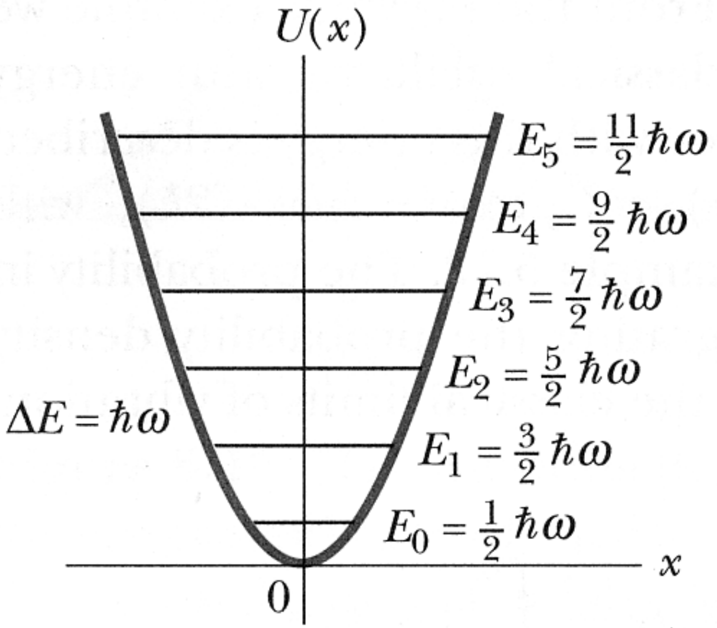
$$\Rightarrow E_2 > E_1$$



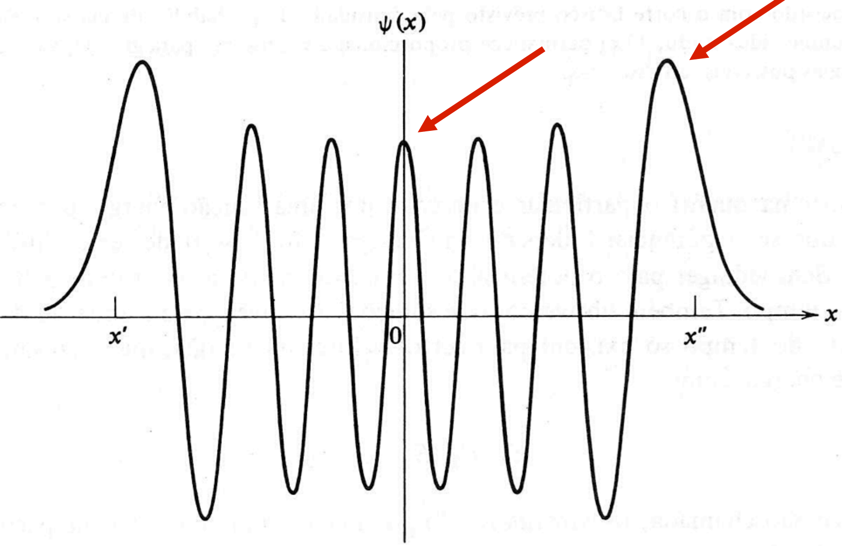

Se $E > V_l$ a solução é oscilatória e $E$ pode variar continuamente, pois não há restrições.

## Voltando ao oscilador harmônico

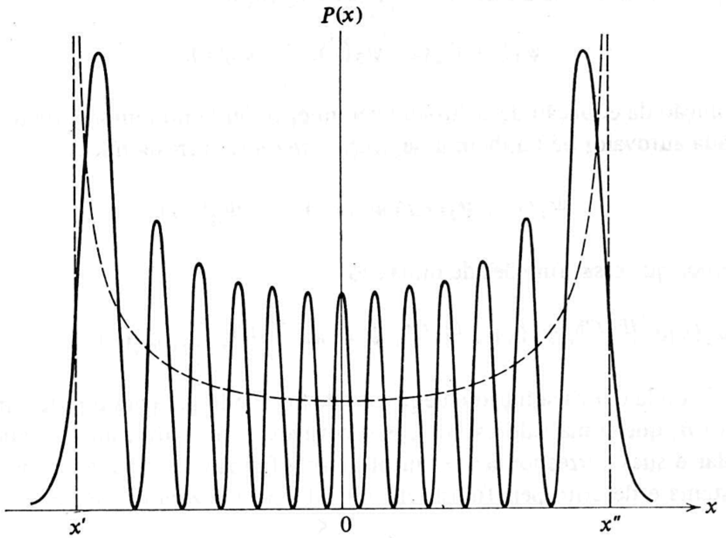



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi$$




$$\xrightarrow{|\psi|^2}$$



# Soluções da equação de Schrödinger

## O potencial nulo: $V(x) = 0, \forall x.$

Partícula livre, pois $F(x) = -\,\mathrm{d}V(x)/\mathrm{d}x = 0.$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)\;;\;\text{ e }\quad \Psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

válido para qualquer valor de $E \geq 0$.

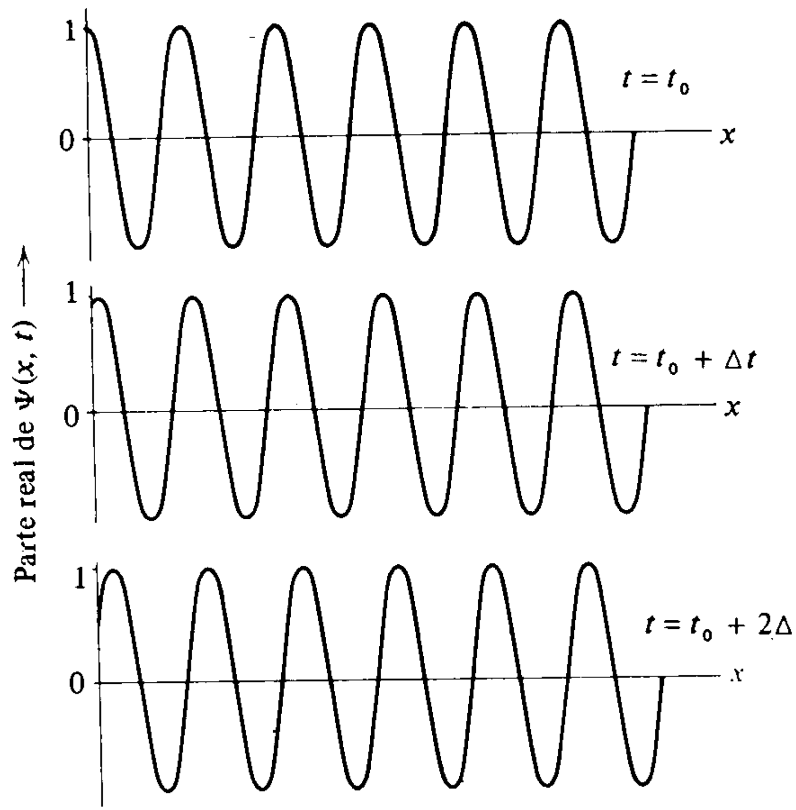
Porque não $E < 0$? Nesse caso $d^2\psi/dx^2$ tem mesmo o sinal que $\psi \Rightarrow$ $\Rightarrow \psi \rightarrow \pm\,\infty$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = e^{ikx}$$

Podemos escrever $\Psi(x,t) = e^{ikx}e^{-i\omega t} =$ $= e^{ikx}e^{-iEt/\hbar} = e^{i(kx-\omega t)}$, que representa uma onda que se propaga para $x \rightarrow +\,\infty$.

Outra solução possível é: $\Psi(x,t) = e^{-i(kx+\omega t)}$, que representa uma onda que se propaga para $x \rightarrow -\,\infty$. Como ambas são soluções, então $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ também deve ser.



$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = i^2k^2Ae^{ikx} + i^2k^2Be^{-ikx} = -k^2\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

A solução geral de uma eq. diferencial que envolve $d^2/dx^2$ contém 2 constantes arbitrárias, pois equivale a fazer 2 integrações sucessivas, que geram 2 constantes.

Determinação do momento da partícula:

$$\bar{p} = \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\,dx$$

Mas $-i\hbar\dfrac{\partial\psi(x)}{\partial x} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar ik\psi(x) = \hbar k\psi(x) = +\sqrt{2mE}\,\psi(x)$

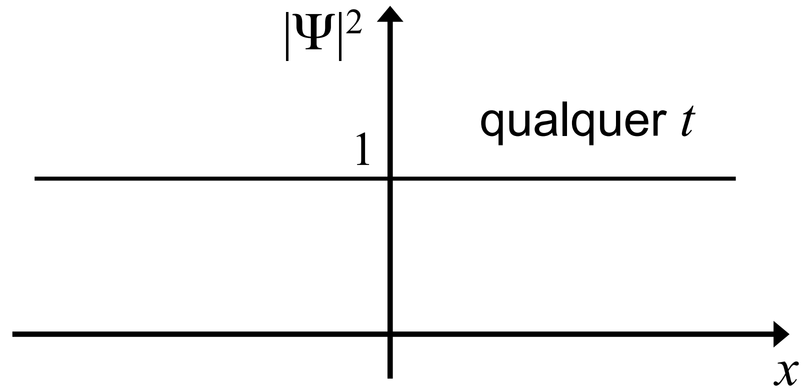
Portanto, $\langle \mathrm{p} \rangle = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\sqrt{2mE}\,\psi(x)dx = \sqrt{2mE}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx = \sqrt{2mE}$

No outro caso, $\Psi(x,t) = e^{-i(kx+\omega t)}$ , teremos: $\langle p \rangle = -\sqrt{2mE}$

Temos também que: $\Psi^*\Psi = A^* e^{-i(kx-\omega t)} A e^{i(kx-\omega t)} = A^* A$

que independe de $x$.

Portanto a partícula tem a mesma probabilidade de ser encontrada em qualquer ponto do eixo $x$. Nesse caso, $\Delta x = \infty$. Mas $\Delta p = 0$.




$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \ . \qquad \text{Mas} \ \langle p \rangle^2 = 2mE.$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* p^2 \psi \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi \, dx$$

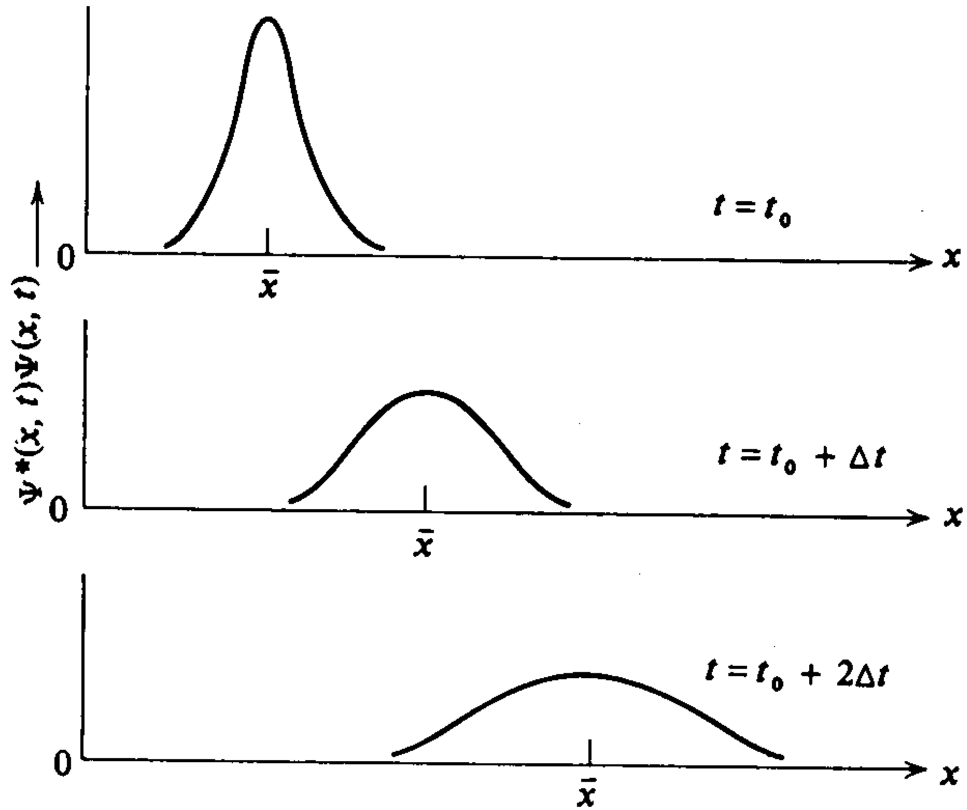
$$\text{Mas} \ -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\hbar^2 (ik)^2 \psi = \hbar^2 k^2 \psi.$$

$$\text{Portanto:} \ \langle p^2 \rangle = \hbar^2 k^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx = 2mE$$ E assim o produto $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

Situação física: ∞ em relação ao tamanho do sistema. Partículas de um feixe de um acelerador, são descritas por ondas planas em relação aos átomos do alvo.

Normalização "na caixa".

No caso de um pacote de onda pode haver dispersão.



Caso em que $V(x)$ varia lentamente: ~ constante sobre 1 $\lambda$ da partícula.

Nesse caso, a variação temporal da velocidade se relaciona com a variação espacial de $V(x)$.

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{d\overline{x}}{dt}\right) = \overline{\frac{d}{dx}\left(-\frac{V(x)}{m}\right)} \Rightarrow \frac{d^2\overline{x}}{dt^2} = \frac{-\overline{\frac{dV}{dx}}}{m} = \frac{\overline{F(x)}}{m}$$

Portanto, em média, a aceleração da partícula é igual à força média que age sobre ela, dividida pela massa. Flutuações sobre o valor que seria esperado pela lei de Newton ocorrem, refletindo o princípio da incerteza.

Mas, no limite macroscópico, essas flutuações são desprezíveis. Não precisamos de médias sobre a posição nem sobre o potencial. Além disso, como o $\lambda$ de uma partícula macroscópica é sempre muito pequeno, $V(x)$ sempre varia lentamente.