

Mecânica Quântica I

LEFT, 3º ano 2021-2022

Filipe Joaquim, Bernardo Gonçalves, João Penedo

Série 2 - Potenciais unidimensionais, estados ligados e de dispersão, aplicações

Problema 2.1. Sobreposição de estados estacionários 1

Considere uma partícula num poço infinito de potencial que se encontra inicialmente numa sobreposição dos dois primeiros estados estacionários:

$$\Psi(x, 0) = A[u_1(x) + u_2(x)]. \quad (2.1)$$

Responda às seguintes questões.

- i) Determine a constante A (considere-a real e positiva) de modo que $\Psi(x, 0)$ esteja convenientemente normalizada. Terá que se preocupar em normalizar a função de onda para $t > 0$? Justifique.
- ii) Determine $\Psi(x, t)$ e a densidade de probabilidade $\rho(x, t)$ usando $\omega \equiv \pi^2 \hbar / (2ma^2)$.
- iii) Calcule $\langle x \rangle$ e verifique que oscila no tempo. Qual é a frequência angular e a amplitude da oscilação?
- iv) Calcule $\langle p \rangle$. É mais fácil do que pode parecer.
- v) Quando a energia é medida, quais são os valores possíveis que se podem obter? E com que probabilidades? Calcule o valor expectável de H e compare/relacione com as energias E_1 e E_2 .

Respostas: i) $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$; ii) $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-i\omega t} [\sin(\frac{\pi}{a}x) + \sin(\frac{2\pi}{a}x)e^{-3i\omega t}]$; $|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a} [\sin^2(\frac{\pi}{a}x) + \sin^2(\frac{2\pi}{a}x) + 2\sin(\frac{\pi}{a}x)\sin(\frac{2\pi}{a}x)\cos(3\omega t)]$; iii) $\langle x \rangle = \frac{a}{2} [1 - \frac{32}{9\pi^2} \cos(3\omega t)]$; iv) $\langle p \rangle = \frac{8\hbar}{3a} \sin(3\omega t)$; v) $\langle H \rangle = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{4ma^2}$.

Problema 2.2. Sobreposição de estados estacionários 2

Considere novamente uma partícula num poço infinito de potencial que se encontra inicialmente numa sobreposição de dois estados estacionários:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_1(x) + u_3(x)], \quad (2.2)$$

neste caso, o estado fundamental e o segundo estado excitado. Responda às seguintes questões.

- i) Determine $\Psi(x, t)$ para $t > 0$.
- ii) Calcule os seguintes valores esperados: $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$.
- iii) Verifique que a quantidade $\Delta x \Delta p$ satisfaz o princípio da incerteza.

Respostas: i) $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(x) \exp(-i\omega t) + u_3(x) \exp(-i9\omega t)]$, com $\omega = \pi^2 \hbar / 2ma^2$; ii) $\langle x \rangle = a/2$, $\langle p \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = a^2 [24\pi^2 - 20 + 27 \cos 8\omega t] / 72\pi^2$, e $\langle p^2 \rangle = 5\hbar^2 \pi^2 / a^2$; iii) $\Delta x \Delta p = \hbar \sqrt{5(24\pi^2 - 56 + 27 \cos 8\omega t) / 72}$.

Problema 2.3. Função de onda triangular no poço

Uma partícula de massa m no poço infinito ($V(x) = 0$ para $0 < x < a$, $V(x) = \infty$ caso contrário) é preparada no instante inicial $t = 0$ com a função de onda

$$\psi(x) = \begin{cases} A \frac{x}{a} & 0 < x < \frac{a}{2}, \\ A \left(1 - \frac{x}{a}\right) & \frac{a}{2} < x < a. \end{cases} \quad (2.3)$$

- i) Determine a constante de normalização A a menos de uma fase.
- ii) Determine os coeficientes c_n na expansão $\psi(x) = \sum_{n=1} c_n \psi_n(x)$, em que $\psi_n(x)$ são os estados estacionários do poço.
- iii) Calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ e σ_x .
- iv) Calcule a função de onda no espaço dos momentos em $t = 0$, $\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$. Mostre que está normalizada. Desenhe o gráfico de $|\phi(p)|^2$.
Relações úteis: $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^4 x}{x^4} dx = \frac{2\pi}{3}$, $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^4 x}{x^2} dx = \frac{\pi}{2}$.
- v) Calcule $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ e σ_p .
- vi) Verifique a validade do princípio da incerteza posição-momento.
- vii) Calcule o valor médio da energia $\langle H \rangle$.

Respostas: i) $A = \sqrt{\frac{12}{a}}$; ii) $c_n = \frac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$; iii) $\langle x \rangle = \frac{a}{2}$, $\langle x^2 \rangle = \frac{11a^2}{40}$, $\sigma_x = \frac{a}{2\sqrt{10}}$;
iv) $\phi(p) = -\sqrt{\frac{6\hbar^3}{\pi a^3}} \frac{(1 - e^{-ipa/(2\hbar)})^2}{p^2}$; v) $\langle p \rangle = 0$, $\langle p^2 \rangle = \frac{12\hbar^2}{a^2}$, $\sigma_p = \frac{\sqrt{12}\hbar}{a}$; vii) $\langle H \rangle = \frac{6\hbar^2}{ma^2}$.

Problema 2.4. Poço infinito centrado

Resolva a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula de massa m no poço infinito centrado,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -a < x < a, \\ \infty & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.4)$$

Determine as funções de onda dos estados estacionários (a menos de uma fase) e as energias permitidas correspondentes. Verifique a consistência com os resultados para o poço *standard* ($V(x) = 0$ para $0 < x < a$, $V(x) = \infty$ caso contrário).

Respostas: $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$ para n ímpar, $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$ para n par, $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2}$.

Problema 2.5. Poço infinito duplicado

Considere uma partícula no estado fundamental de um poço infinito de potencial.

- i) Determine a força que actua nas paredes devido à presença da partícula.
- ii) Subitamente o poço expande para o dobro do seu tamanho original, i.e. a parede que estava em $x = a$ passa para $x = 2a$, deixando a função de onda (momentaneamente) intacta. Determine a probabilidade de encontrar a partícula em cada um dos estados estacionários do novo poço. Verifique que a soma em n das probabilidades obtidas é a unidade (pode, por exemplo, utilizar o *Mathematica*).
- iii) Tendo em conta os resultados a que chegou na alínea anterior, quais são os dois estados mais prováveis? Quais as probabilidades e energias associadas a esses estados?

- iv) Qual é o valor esperado da energia? Compare este resultado com o valor esperado antes da parede se ter movido.
- v) Se a parede se mover de forma adiabática de $x = a$ para $x = 2a$, qual é o estado final? Calcule o trabalho realizado durante o processo.

Sugestão: pesquise o teorema adiabático em mecânica quântica.

Respostas: i) $F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^3}$; ii) $P_n = \begin{cases} 1/2, & \text{se } n = 2 \\ 32/[\pi^2(n^2 - 4)^2], & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$; iii) Estado mais provável: $n = 2$; 2^o estado mais provável: $n = 1$; iv) $\langle H \rangle = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$; v) $\Delta E = \frac{3}{8} \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$.

Problema 2.6. Poço infinito com barreira δ

Resolva a equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula de massa m no poço infinito centrado com uma barreira δ de Dirac no seu centro,

$$V(x) = \begin{cases} \alpha \delta(x) & -a < x < a, \\ \infty & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.5)$$

- i) Considere primeiro as soluções pares (não é necessário normalizar as funções de onda). Determine graficamente as energias permitidas.
- ii) Considere agora as soluções ímpares. Quais são as energias permitidas?
- iii) Comente os casos limite $\alpha \rightarrow 0$ e $\alpha \rightarrow \infty$.

Respostas: i) $\psi_n = A \left(\sin k_n x + \frac{\hbar^2 k_n}{m\alpha} \cos k_n x \right)$ para $x \in [0, a]$ e $E_n \gtrsim \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2}$, com n ímpar; ii) solução do problema 2.4 com n par.

Problema 2.7. Delta de Dirac duplo

Considere um potencial com duas funções δ da seguinte forma:

$$V(x) = -\alpha [\delta(x+a) + \delta(x-a)] , \quad (2.6)$$

onde α e a são constantes positivas.

- i) Comece por fazer o esboço deste potencial.
- ii) Investigue o número de estados ligados que possui o potencial apresentado e para que condições do parâmetro α . Esboce as funções de onda.

Tenha em atenção os seguintes pontos:

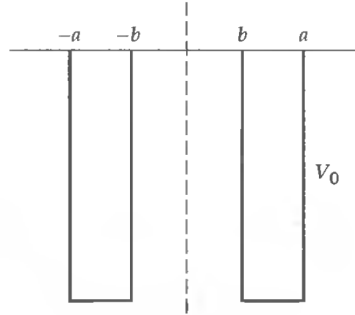
- Quando $V(x)$ é uma função par, então $\psi(x)$ pode sempre ser considerada como sendo par ou ímpar (como exercício extra pode provar esta afirmação). Comece, então, por procurar soluções pares e ímpares.
- Utilize a continuidade da função de onda e a descontinuidade da sua derivada nos pontos onde se encontram as funções Delta.
- Irá obter equações transcendentais. Resolva-as graficamente.

- iii) Encontre o coeficiente de transmissão para este potencial.

Respostas: ii) Um estado ligado se $\alpha \leq \hbar^2/2ma$ e dois estados ligados se $\alpha > \hbar^2/2ma$; iii) Considerando $z \equiv \frac{\hbar^2 k}{2m\alpha}$ e $\phi \equiv 4ka$, o coeficiente de transmissão vem $T = \frac{8z^4}{(8z^4 + 4z^2 + 1) + (4z^2 - 1) \cos \phi - 4z \sin \phi}$.

Problema 2.8. Poço finito duplo

Considere o poço de potencial finito duplo representado na figura:



Este exercício é constituído por três componentes: uma componente estritamente qualitativa, onde não são permitidos quaisquer cálculos; uma segunda componente de base analítica, e uma terceira e última parte de base computacional, onde os resultados até então obtidos serão confirmados.

Parte qualitativa:

- i) Esboce as funções de onda do estado fundamental ψ_1 e do primeiro estado excitado ψ_2 para os casos (1) $b = 0$, (2) $b \simeq \Delta$, e (3) $b \gg \Delta$, onde $\Delta = a - b$ é a largura do poço.
- ii) Como é que as energias correspondentes (E_1 e E_2) variam à medida que b vai de 0 para ∞ ? Esboce $E_1(b)$ e $E_2(b)$ no mesmo gráfico. Utilize a aproximação apresentada no Griffiths de que $E_n + V_0 \simeq \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \Delta^2}$ para um poço finito de potencial.
- iii) Este potencial pode ser usado, de uma forma bastante aproximada, como um modelo unidimensional para o potencial sentido por um electrão numa molécula diatómica, com os dois poços representando a força atractiva dos núcleos. Considerando que os núcleos têm liberdade para se movimentar, estes irão adoptar a configuração de menor energia. Tendo em conta as conclusões da alínea anterior, o electrão tende a que os núcleos se aproximem ou se afastem, no estado fundamental e no primeiro estado excitado?

Parte analítica:

- i) Procure funções de onda pares e ímpares. Não se esqueça de que pode escrever combinações de funções exponenciais como funções hiperbólicas.
- ii) Considere apenas as funções pares. Mostre que a continuidade da função de onda e da sua derivada em $x = b$ e em $x = a$ conduzem à seguinte condição:

$$\tan q(a - b) = \frac{q\alpha(1 + \tanh \alpha b)}{q^2 - \alpha^2 \tanh \alpha b}, \quad (2.7)$$

com $-E = \hbar^2 \alpha^2 / 2m$ e $E + V_0 = \hbar^2 q^2 / 2m$. Poder-lhe-á ser mais útil se verificar directamente a continuidade de $\frac{1}{\psi(x)} \frac{d\psi(x)}{dx}$. Por que razão basta verificar a continuidade nos dois pontos referidos?

- iii) Verifique que, para as soluções ímpares, a equação obtida seria idêntica à anterior apenas com a função tangente hiperbólica substituída pela cotangente hiperbólica. Não precisa de fazer contas, basta explicar porquê.
- iv) Verifique que, quando $b \rightarrow 0$, se obtêm as equações para o poço de potencial simples.

Parte computacional:

O objectivo desta secção é confirmar os resultados qualitativamente obtidos para as funções de onda na primeira secção utilizando, para isso, os resultados obtidos na segunda secção. Deverá utilizar o *Mathematica*. Apenas se descreve o procedimento para as funções pares. Para as funções ímpares, o procedimento é em tudo semelhante.

- i) Comece por encontrar soluções da Equação (2.7). Para tal, introduza as variáveis $y = q\Delta$, $\eta = b/\Delta$, com $\Delta = a - b$, e a variável λ

$$\lambda = \frac{2mV_0\Delta^2}{\hbar^2}, \quad (2.8)$$

e mostre que a Equação (2.7) se pode escrever como

$$\tan y = \frac{y\sqrt{\lambda - y^2} \left(1 + \tanh\left(\eta\sqrt{\lambda - y^2}\right)\right)}{y^2 - (\lambda - y^2) \tanh\left(\eta\sqrt{\lambda - y^2}\right)}. \quad (2.9)$$

Para as soluções ímpares, o resultado é idêntico, com a tangente hiperbólica substituída pela cotangente hiperbólica. A variável η é uma medida da separação dos dois poços e λ é uma medida da largura e da profundidade do poço.

De forma a testar as três regiões da primeira alínea da primeira secção, vão-se considerar três casos distintos: (1) $\eta = 10^{-3}$, (2) $\eta = 0.5$, e (3) $\eta = 5$. Considere $\lambda = 20$. Comece por um destes casos e resolva numericamente a equação e encontre y para o estado fundamental (pode usar a função FindRoot). Primeiro tente perceber onde se encontram as soluções graficamente (usando a função Plot).

- ii) Garanta que a função de onda e a sua derivada são contínuas em $x = b$ e em $x = a$. Considere a mudança de variável de espaço $x \rightarrow x/\Delta$ e tenha em conta as variáveis definidas na alínea anterior. Escreva a função de onda que considerou nestas novas variáveis. Em que pontos deve assegurar a continuidade, apenas em função das novas variáveis? Resolva o sistema de equações que obtém usando a função Solve. Verifique que tem liberdade para escolher uma das quatro incógnitas que procura.
- iii) Deve, igualmente, garantir que a função de onda está normalizada. Como é que o pode fazer?
- iv) Faça o gráfico da função de onda que obteve, correspondente ao estado fundamental, na nova variável espacial. Como é que deve escrever os coeficientes da função de onda em todo o espaço de forma a garantir que a função é par?
- v) Repita para os três valores de η . Compare com os seus resultados da primeira secção.
- vi) Repita para funções ímpares e encontre o gráfico do primeiro estado excitado para os três valores de η . Compare com os resultados da primeira secção.
- vii) Investigue o que acontece para vários valores de λ e de η . Pode verificar, por exemplo, que quando a separação dos dois poços é significativa o suficiente, as soluções pares e ímpares tendem uma para outra. Pode verificar ainda que, para determinados valores de λ e de η , a equação ímpar pode não ter soluções, enquanto que a par tem sempre pelo menos uma solução.

Problema 2.9. Dentro ou fora do poço?

Uma partícula de massa m encontra-se no potencial dado por

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ -V_0 & 0 < x < a, \\ 0 & x > a. \end{cases} \quad (2.10)$$

Considere $V_0 = 32\hbar^2/ma^2$.

- i) Quantos estados ligados existem? Apoie-se, por exemplo, no *Mathematica* para perceber graficamente quantas soluções existem.
- ii) No estado ligado de maior energia, qual é a probabilidade da partícula se encontrar na região $x > a$, i.e. fora do poço? Comente o resultado obtido. Uma vez mais, utilize o *Mathematica* para encontrar o valor da solução correspondente ao estado de maior energia.

Considere agora V_0 de tal forma que apenas existe um estado ligado.

- iii) Qual é o intervalo em que V_0 deve estar para que haja apenas um único estado ligado?
- iv) Suponha que subitamente o potencial passa a ser $-V_0$ para $x > b$, com b genérico e $b > a$. Calcule a probabilidade de transmissão através da barreira. Faça os limites $b \rightarrow 2a$ e $b \rightarrow \infty$. Comente.

Respostas: i) Existem três estados ligados; ii) 54.2%; iii) $\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} < V_0 < \frac{9\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$;
iv) $T = \frac{16k^2l^2}{(e^{4al} + e^{4bl})(k^2 + l^2)^2 - 2e^{2(a+b)l}(k^4 + l^4 - 6k^2l^2)}$, com $k = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ e $l = \sqrt{-2mE}/\hbar$.

Problema 2.10. Potencial sem reflexão

Considere uma partícula de massa m sujeita ao potencial

$$V(x) = -\frac{a^2\hbar^2}{m} \text{sech}^2(ax), \quad (2.11)$$

onde $\text{sech}(y) = 2/(e^y + e^{-y})$ é a secante hiperbólica e a é uma constante positiva.

- i) Verifique que este potencial admite o estado ligado $\psi_0(x) = A \text{sech}(ax)$. Normalize-o, determine a sua energia e desenhe os gráficos de $V(x)$ e de $\psi_0(x)$.

Relações úteis: $\text{sech}'(y) = -\text{sech}(y) \tanh(y)$, $\tanh'(y) = \text{sech}^2(y)$, $\text{sech}^2(y) + \tanh^2(y) = 1$.

$\tanh(y) = (e^y - e^{-y})/(e^y + e^{-y})$ é a tangente hiperbólica.

- ii) Verifique que este potencial admite um estado de dispersão com energia $E > 0$,

$$\psi_k(x) = A \left(\frac{ik - a \tanh(ax)}{ik + a} \right) e^{ikx}, \quad (2.12)$$

onde $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, para qualquer valor (positivo) de E .

- iii) Determine as formas assintóticas de $\psi_k(x)$ nos limites $x \rightarrow -\infty$ e $x \rightarrow \infty$. Calcule os coeficientes de reflexão R e de transmissão T .

Respostas: i) $E = -\frac{a^2\hbar^2}{2m}$; iii) $R = 0$, $T = 1$.

Problema 2.11. Meio oscilador harmónico

Sem fazer cálculos, indique os valores próprios do seguinte potencial:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ m\omega^2 x^2/2 & x \geq 0. \end{cases} \quad (2.13)$$

Problema 2.12. Oscilador Harmónico com Barreira

Considere uma partícula de massa m no potencial unidimensional dado por

$$V(x) = \begin{cases} m\omega^2 x^2/2 & |x| > b, \\ V_0 & |x| < b, \end{cases} \quad (2.14)$$

onde $V_0 \gg \hbar^2/mb^2 \gg \hbar\omega$, i.e. o potencial do oscilador harmónico com uma barreira alta, fina e praticamente impenetrável em $x = 0$.

- i) Comece por esboçar o potencial.
- ii) Qual é o espectro de baixa energia considerando a aproximação de que a barreira é completamente impenetrável?
- iii) Descreva de forma qualitativa o efeito no espectro introduzido pela penetrabilidade finita da barreira. Não é necessário fazer qualquer cálculo.

Problema 2.13. Valores médios no oscilador harmónico

Calcule, para os estados ψ_0 , ψ_1 e ψ_2 do oscilador harmónico,

- i) os valores médios da posição $\langle x \rangle$ e do momento $\langle p \rangle$
- ii) os valores médios do quadrado da posição $\langle x^2 \rangle$ e do quadrado do momento $\langle p^2 \rangle$
- iii) os valores médios da energia potencial $\langle V \rangle$ e da energia cinética $\langle T \rangle$

através de integração explícita. Verifique o princípio de incerteza para cada um destes estados.

Respostas: $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ para os três estados; $\langle T \rangle = \langle V \rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega, \frac{3}{4}\hbar\omega, \frac{5}{4}\hbar\omega$ para $n = 0, 1, 2$, respectivamente.

Problema 2.14. Solução analítica para o oscilador harmónico

Considere o potencial do oscilador harmónico de frequência ω e a função de onda

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(x^2 + \frac{i\hbar t}{m} - 2x_0 x e^{-i\omega t} + \frac{x_0^2}{2} (1 + e^{-2i\omega t}) \right) \right], \quad (2.15)$$

onde $x_0 \in \mathbb{R}$ tem as dimensões de um comprimento.

- i) Mostre que $\Psi(x, t)$ é uma solução exacta da equação de Schrödinger dependente do tempo, qualquer que seja o valor de x_0 .

Este raro exemplo de uma solução de forma fechada da eq. dependente do tempo foi descoberto pelo próprio E. Schrödinger [Naturwissenschaften 14 (1926) 664].

- ii) Determine $|\Psi(x, t)|^2$ e descreva a sua evolução no tempo (note que não estamos perante um estado estacionário).

iii) Verifique que a função de onda está normalizada.

iv) Calcule $\langle x \rangle(t)$ e $\langle p \rangle(t)$. Verifique que $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$, de acordo com o teorema de Ehrenfest.

Respostas: ii) $|\Psi|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x - a \cos \omega t)^2\right]$; iv) $\langle x \rangle = a \cos \omega t$, $\langle p \rangle = -ma\omega \sin \omega t$.

Problema 2.15. Resolução numérica do oscilador harmónico

Mostre que a equação de Schrödinger independente do tempo para o potencial do oscilador harmónico se pode escrever na forma

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - (\xi^2 - \epsilon)\psi = 0, \quad (2.16)$$

onde se introduziram as variáveis adimensionais $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ e $\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$.

Use, por exemplo, o seguinte código *Mathematica* para resolver numericamente esta equação diferencial, variando o valor de ϵ :

```
Manipulate[
  Plot[Evaluate[ psi[xi] /.
    NDSolve[{psi''[xi] - (xi^2 - eps) psi[xi] == 0, psi[0] == 1, psi'[0] == 0},
      psi[xi], {xi, -6, 6}, Method -> "ImplicitRungeKutta"]],
    {xi, -6, 6}, PlotRange -> {-4, 4}],
  {eps, 0, 10, 0.01}]
```

Para um valor genérico de ϵ , as “caudas” da solução (ψ para valores grandes de $|\xi|$) vão para $\pm\infty$ e a função de onda não é normalizável. Encontre graficamente valores de ϵ e, por conseguinte, da energia E que levam a caudas que tendem para zero, i.e. a funções normalizáveis.

Este código permite-lhe encontrar as energias do estado fundamental e do segundo estado excitado. Modifique-o para encontrar as energias do primeiro e do terceiro estados excitados.

Problema 2.16. Resolução numérica do poço infinito

Mostre que a equação de Schrödinger independente do tempo para o poço infinito (com $V(x) = 0$ para $0 < x < a$, $V(x) = \infty$ caso contrário) se pode escrever na forma

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \epsilon\psi = 0, \quad (2.17)$$

onde se introduziram as variáveis adimensionais $\xi = x/a$ e $\epsilon = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E$.

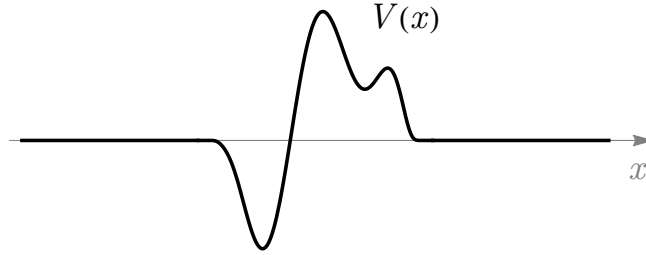
Use, por exemplo, o seguinte código *Mathematica* para resolver numericamente esta equação diferencial, variando o valor de ϵ :

```
Manipulate[
  Plot[Evaluate[ psi[xi] /.
    NDSolve[{psi''[xi] + eps psi[xi] == 0, psi[0] == 0, psi'[0] == 1},
      psi[xi], {xi, -6, 6}, Method -> "ImplicitRungeKutta"]],
    {xi, 0, 1.1}, PlotRange -> {-0.3, 0.4}, GridLines -> {{1}}],
  {eps, 0, 100, 0.05}]
```


Encontre graficamente valores de ϵ e, por conseguinte, da energia E que levam à condição de fronteira correcta, i.e. a funções de onda que se anulam quando $\xi = 1$ (ou seja, quando $x = a$). Verifique que o resultado é o esperado para o estado fundamental e para os primeiros dois estados excitados.

Problema 2.17. Matriz de dispersão

Considere um potencial unidimensional, arbitrário e localizado, i.e. $V(x) \neq 0$ apenas numa região limitada, como indica a figura. Considere apenas estados com $E > 0$.



As soluções da equação de Schrödinger à esquerda e à direita da região onde $V(x) \neq 0$ são:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{à esquerda,} \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & \text{à direita,} \end{cases} \quad (2.18)$$

com $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. As amplitudes A , B , F e G podem ser relacionadas através de

$$B = S_{11}A + S_{12}G, \quad F = S_{21}A + S_{22}G, \quad (2.19)$$

onde os coeficientes S_{ij} dependem apenas de k (logo, da energia E) e da forma do potencial $V(x)$ na região central. Estas relações podem ainda ser escritas na forma matricial

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}}_S \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

A matriz S permite assim obter as amplitudes de saída (B e F) a partir das incidentes (A e G).

- i) Use a conservação do fluxo de probabilidade para mostrar que a matriz S é unitária.
- ii) Exprima os coeficientes de reflexão e de transmissão (para uma partícula incidente ou da esquerda ou da direita) em termos dos elementos da matriz S .
- iii) Determine a matriz S para o poço de potencial $V(x) = -\alpha\delta(x)$, onde $\alpha > 0$. Verifique a sua unitariedade.

Respostas: iii) $S = \frac{1}{1-i\beta} \begin{pmatrix} i\beta & 1 \\ 1 & i\beta \end{pmatrix}$, com $\beta = m\alpha/\hbar^2 k$.

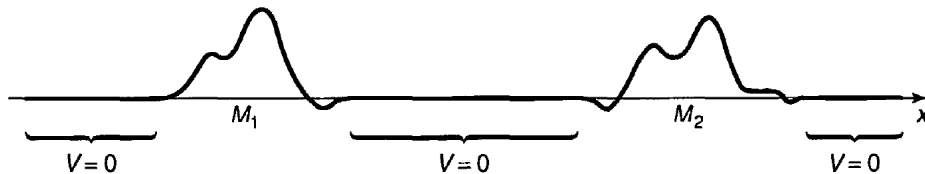
Problema 2.18. Matriz de Transferência

Tal como viu anteriormente, a matriz S permite obter as amplitudes de saída a partir das incidentes. Em alguns casos, poderá ser mais conveniente e interessante trabalhar com a matriz M , que permite obter as amplitudes à direita do potencial (F e G) em termos das amplitudes à esquerda do potencial (A e B):

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}}_M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

- i) Encontre os quatro elementos da matriz M em termos dos elementos da matriz S .
- ii) Encontre agora os elementos da matriz S em função dos elementos de M e escreva os coeficientes de reflexão e de transmissão em termos destes últimos.
- iii) Considere um potencial que consiste em duas secções isoladas, tal como se mostra na figura. Mostre que a matriz M para a combinação é o produto das matrizes M de cada secção:

$$M = M_2 M_1. \quad (2.22)$$

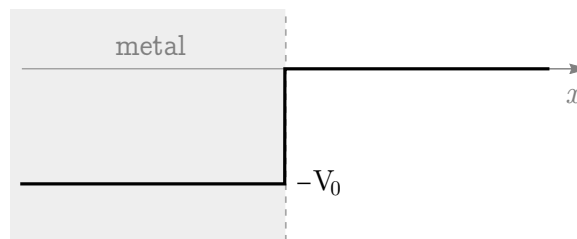


- iv) Construa a matriz M para o potencial $V(x) = -\alpha\delta(x)$, onde $\alpha > 0$, a partir da matriz S que obteve anteriormente.
- v) Construa a matriz M para o potencial $V(x) = -\alpha\delta(x-a)$. Utilizando a alínea iii), obtenha a matriz M para o potencial $V(x) = -\alpha[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$. Qual é o coeficiente de transmissão para este último potencial? Compare com o exercício do Delta de Dirac duplo.

Respostas: i) $M = \frac{1}{S_{12}} \begin{pmatrix} -\det(S) & S_{22} \\ -S_{11} & 1 \end{pmatrix}$; ii) $S = \frac{1}{M_{22}} \begin{pmatrix} -M_{21} & 1 \\ \det(M) & M_{12} \end{pmatrix}$; iv) $M = \begin{pmatrix} 1+i\beta & i\beta \\ -i\beta & 1-i\beta \end{pmatrix}$;
v) $M_1 = \begin{pmatrix} 1+i\beta & i\beta e^{-2ika} \\ -i\beta e^{2ika} & 1-i\beta \end{pmatrix}$.

Problema 2.19. Reflexão de electrões na superfície de um metal

A ligação de um electrão de condução ao respectivo metal pode ser descrita de modo simplificado por um potencial unidimensional do tipo “degrau” com $V(x < 0) = -V_0 < 0$ e $V(x > 0) = 0$, como indicado na figura. Para metais comuns, V_0 é da ordem de 10 eV.



- i) Determine as probabilidades de reflexão e de transmissão (R e T) para um electrão de condução que se aproxime da superfície do metal com $E > 0$. Compare com o caso clássico.
- ii) Mostre que para energias positivas pequenas ($E \ll V_0$) se tem $R \simeq 1 - 4\sqrt{E/V_0}$. Calcule R assumindo $V_0 = 5$ eV e $E = 0.01$ eV.
- iii) Determine R e T para um electrão de condução com $-V_0 < E < 0$. Compare com o caso clássico.
- iv) Considere agora um feixe de electrões com $E = 0.1$ eV que incide perpendicularmente no metal (da direita). Calcule a fracção reflectida R . Considere $V_0 = 5$ eV e compare com o caso clássico.
- v) O que acontece se se aumentar a energia do feixe? Calcule R para um feixe de electrões incidente capaz de produzir raios X, com $E = 100$ keV ($V_0 = 5$ eV).

Respostas: i) $R = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E})^4}$, $T = \frac{4\sqrt{E(E+V_0)}}{(\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E})^2}$; ii) $R \simeq 80\%$; iv) $R \simeq 57\%$.

Problema 2.20. Átomo sob a influência de uma parede

Um modelo aproximado para o problema de um átomo perto de uma parede pode ser considerando uma partícula a movimentar-se sob a influências do potencial unidimensional dado por

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 \delta(x) & x > -d, \\ \infty & x < -d, \end{cases} \quad (2.23)$$

com $d > 0$.

- i) Comece por esboçar o potencial.
- ii) Determine a modificação que a presença da parede causa na energia do estado ligado, quando esta se encontra muito afastada. Discuta este limite.
- iii) Qual é a condição exacta para V_0 e d de forma a que exista pelo menos um estado ligado?

Respostas: ii) $E \approx -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} + \frac{mV_0^2}{\hbar^2} \exp\left(-\frac{2mV_0d}{\hbar^2}\right)$; iii) $V_0d > \frac{\hbar^2}{2m}$.

Problema 2.21. Queda livre

Considere uma partícula de massa m sujeita ao potencial gravitacional dado por

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ mgx & x > 0. \end{cases} \quad (2.24)$$

- i) Comece por esboçar o potencial.
- ii) Assuma que a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo é separável. Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para o potencial apresentado, fazendo a mudança de variável $q = x/\alpha$, onde $\alpha = (\hbar^2/2m^2g)^{1/3}$. Encontre as soluções da equação diferencial a que chegou através do *Mathematica* utilizando a função DSolve. Como se chamam as funções que são solução da equação? Investigue um pouco mais acerca destas funções.
- iii) Que condições-fronteira tem de considerar para 1) $q \rightarrow \infty$ e 2) $q = 0$? O que obtém da primeira condição? E da segunda?
- iv) Utilize o *Mathematica* para obter o gráfico de $\psi(x)$ e $|\psi(x)|^2$ para o estado fundamental e para o sétimo estado excitado. Qual é o valor de $\langle x \rangle$ para cada caso? Utilize o *Mathematica*.
- v) Considere agora a situação em que o potencial é $V(x) = mgx$ em todo o espaço. Comece por mostrar que a função de onda dada por:

$$\Psi(x, t) = \psi_0\left(x + \frac{1}{2}gt^2, t\right) \exp\left[-i\frac{mgt}{\hbar}\left(x + \frac{1}{6}gt^2\right)\right], \quad (2.25)$$

com $\psi_0(x, t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\gamma} e^{-ax^2/\gamma^2}$, onde $\gamma = \sqrt{1 + \frac{2i\hbar at}{m}}$, satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo, para um determinado valor de a .

- vi) Encontre a expressão para $|\Psi(x, t)|^2$. Considere $m = \hbar$, $a = \pi/2$ e $g = 9.8$ e faça o gráfico de $|\Psi(x, t)|^2$ (em *Mathematica*) para $t = 0.0, 0.9, 1.8, 2.7, 3.6$ e 4.5 . Comente a evolução temporal observada.
- vii) Determine $\langle x \rangle$ e comente o resultado obtido. Pode, uma vez mais, utilizar o *Mathematica* para calcular o integral que necessita ou, então, descubra uma mudança de variável que o ajude e resolva o integral analiticamente.

- viii) Por fim, compare e comente os resultados da distribuição de probabilidades entre o primeiro e o segundo casos.

Problema 2.22. Barreira finita de potencial

Considere a barreira finita de potencial,

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.26)$$

onde $V_0 > 0$.

- i) Resolva a equação de Schrödinger e determine o coeficiente de transmissão T para o caso $E > V_0$. Determine os valores da energia para os quais a barreira se torna transparente.
- ii) Determine T para o caso $E = V_0$. Verifique que o resultado pode ser obtido a partir do resultado da alínea anterior no limite $E \rightarrow V_0$.
- iii) Mostre que

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right) \right]^{-1}$$

quando $0 < E < V_0$. Este é um exemplo de **efeito túnel**, um fenómeno puramente quântico. Qual seria o resultado esperado de acordo com a mecânica clássica?

- iv) Note que ao aumentar a largura da barreira, a probabilidade de transmissão diminui drasticamente. Mostre que no limite de a grande (T pequeno) se tem

$$T \propto e^{-2\ell a}, \quad \text{onde } \ell = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

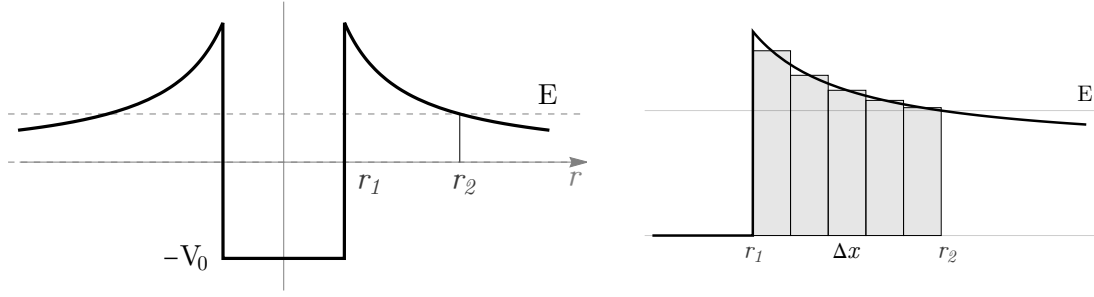
Verifique que a constante de proporcionalidade é de ordem $\mathcal{O}(1)$ para $0.1 V_0 < E < 0.9 E$.

- v) Este potencial descreve, em primeira aproximação, o funcionamento de um microscópio electrónico de efeito túnel (**scanning tunneling microscope**, STM). É graças ao efeito túnel que uma corrente de electrões pode fluir entre uma amostra e a agulha do microscópio, separadas por uma distância a . O que justifica a incrível sensibilidade do STM a esta separação?
- vi) Considere um STM com uma agulha de platina e, para simplificar, uma amostra também de platina. A função trabalho é $\phi(\text{Pt}) = V_0 - E = 5.65$ eV. Determine a razão entre a corrente medida quando a agulha dista 0.60 nm da superfície da amostra e a corrente quando a distância é de 0.62 nm. A que percentagem de variação na corrente precisa o STM de ser sensível para atingir resoluções da ordem de 0.001 nm?

Respostas: i) $T = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 \left(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} \right) \right]^{-1}$; ii) $T = \left(1 + \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 \right)^{-1}$; vi) 1.6, 2%.

Problema 2.23. Decaimento α

O decaimento α corresponde a uma transição nuclear $(A + 4, Z + 2) \rightarrow (A, Z)$ acompanhada da emissão de um núcleo de Hélio (partícula α). Este fenómeno pode ser compreendido no contexto de um modelo unidimensional simplificado, onde se considera que a partícula α está inicialmente ligada ao núcleo-filho (A, Z) e sujeita ao potencial dado na figura da esquerda.



Aqui, r_1 representa o raio nuclear, $r_1 \simeq (1.07 \text{ fm})A^{1/3}$. Para $|r| < r_1$ tem-se $V(x) = -V_0 < 0$ constante (poço de potencial nuclear). Para $|r| > r_1$, a interação electromagnética domina. No caso do urânio, a validade do potencial de Coulomb foi confirmada experimentalmente por Geiger em 1921 até alturas de barreira de pelo menos 8.6 MeV.

A observação de partículas α com menos de metade desta energia ($E \simeq 4.2 \text{ MeV}$) no decaimento do urânio-238 resulta num *puzzle* para os modelos clássicos, que proibem a partícula de escapar ao poço de potencial nuclear e à barreira de Coulomb. Este paradoxo foi resolvido por Gamow, Gurney e Condon, que em 1928 reconheceram a importância da mecânica quântica – e, em particular, do efeito túnel (ver problema 2.22) – na explicação do fenómeno.

- i) Atendendo à figura da esquerda, determine r_2 em função da energia E da partícula α .
- ii) De modo a estimar a probabilidade da partícula escapar através da barreira, esta última pode ser aproximada por um conjunto de barreiras finitas de largura Δx , ver figura da direita. Determine o factor total de transmissão T na aproximação da alínea iv) do problema 2.22, ignorando a constante de proporcionalidade e assumindo $V_0 = 0$. Escreva a resposta na forma $T = e^{-2\gamma}$. A quantidade γ é conhecida por **factor de Gamow**.
- iii) Assumindo que é legítimo tomar o limite $\Delta x \rightarrow 0$ na alínea anterior, converta o resultado num integral. Mostre que, quando $r_1 \ll r_2$, o factor de Gamow pode ser estimado por

$$\gamma \simeq \frac{K_1 Z}{\sqrt{E}} - K_2 \sqrt{Z r_1},$$

onde $K_1 \simeq 1.98 \text{ MeV}^{1/2}$ e $K_2 \simeq 1.49 \text{ fm}^{-1/2}$.

- iv) Considere uma partícula clássica com velocidade v presa neste poço de potencial. O que representa a factor de transmissão T neste contexto? Relacione o tempo de vida τ do núcleo-mãe ($A+4, Z+2$) com o factor de Gamow γ e a velocidade clássica v .
- v) Os isótopos de urânio com $A \in \{228, 230, 232, 234, 236, 238\}$ decaem principalmente através da emissão de partículas α . Procure os tempos de vida τ e as energias E das partículas α correspondentes a estes isótopos na [base de dados do Brookhaven National Laboratory](#). Faça o gráfico de $\log_{10} \tau$ versus $E^{-1/2}$ e comente o resultado – **lei de Geiger–Nuttall**, conhecida desde 1912 – à luz do que encontrou nas alíneas anteriores.

Respostas: i) $r_2 = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 E}$; ii) $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sum_i \sqrt{2m(V_i - E)}\Delta x$.