Mecânica Quântica I – Quadrimestre 2021.1

Folha de Problemas 3

Equação de Schrödinger

<u>Convenção</u>: Os exercícios são classificados de acordo com os seguintes símbolos: † indica que o exercício testa conceitos discutidos nas aulas; ‡ indica que o exercício complementa a matéria dada nas aulas teóricas. São exercícios relevantes para a vossa formação, mas que não tivemos tempo de abordar nas aulas; $^\square$ indica que o exercício é avançado. Note que um exercício pode ter mais do que um símbolo.

1 Salto de Potencial†

Um feixe de electrões acelerados por uma diferença de potencial V move-se no sentido positivo do eixo Ox, numa região do espaço onde o potencial é definido por:

$$V(x) \;=\; \begin{cases} V_0\,, & x > 0\,, \\ 0\,, & x < 0\,, \end{cases} \tag{1}$$

com $V_0 = 10$ eV – ver Figura 1.

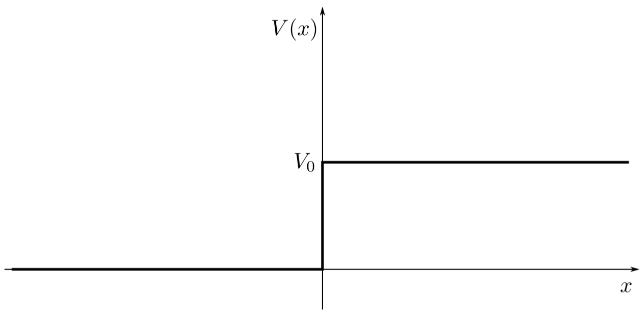

Figura 1: Representação do salto de potencial da Eq. (1)

(a) Determine a fracção do feixe que é transmitida se o potencial de aceleração dos electrões for (i) $V = 5$ V e (ii) $V = 15$ V.

(b) Compare os resultados da alínea anterior com as previsões da Física clássica para os casos (i) e (ii).

2 Barreira de Potencial†‡

Considere uma partícula movendo-se num potencial dado por

$$V(x) \;=\; \begin{cases} V_0\,, & 0 < x < b\,, \\ 0\,, & x < 0 \text{ e } x > b\,, \end{cases} \tag{2}$$

onde V_0 é uma constante positiva – ver Figura 2. Este é o modelo básico dos microscópios de efeito de túnel, uma das mais poderosas ferramentas actuais na investigação das propriedades quânticas de moléculas e cristais.

(a) Calcule a probabilidade de transmissão de uma partícula de massa m incidente da esquerda com energia $E < V_0$.

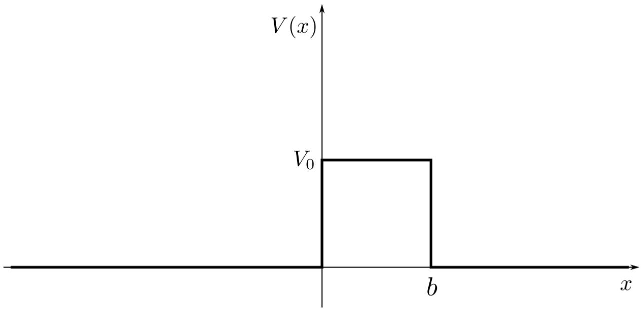

Figura 2: Representação da barreira de potencial definida pela Eq. (2)

(b) Compare esta probabilidade de transmissão da partícula quântica com a probabilidade de transmissão de uma partícula em Mecânica Clássica.

(c) O isótopo $^{212}_{83}$Bi é radioactivo, decaindo em $^{208}_{81}$Tl por emissão de uma partícula α (dois protões e dois neutrões) com energia $E = 6.0$ MeV. O nosso obectivo é estimar a vida média do isótopo $^{212}_{83}$Bi. Para isso, vamos trabalhar com um modelo (ultra-)simples para este decaimento radioactivo. Vamos considerar que o potencial (devido à força nuclear forte) sentido pela partícula α no núcleo é semelhante ao da Eq. (2):

$$V(r) \quad = \quad \begin{cases} 0 & 0 < r < R \\ V_0\,, & R < r < R+b\,, \\ 0\,, & r > R+b\,, \end{cases} \tag{3}$$

onde R e $R+b$ determinam a espessura da barreira que impede a partícula α de escapar do núcleo.

(i) Assuma que partícula α oscila entre $r = 0$ e $r = R$ com velocidade $v = \sqrt{2E/m}$. Calcule a probabilidade T de a partícula α escapar do núcleo (por efeito de túnel) de cada vez que ela chega a $r = R$.

(ii) De seguida, calcule a probabilidade por unidade de tempo de a partícula escapar do núcleo.

(iii) Definindo a vida média do núcleo de $^{212}_{83}$Bi, τ, como sendo o inverso da probabilidade de decaimento por unidade de tempo, calcule este tempo de vida média.

(iv) Como poderia melhorar este modelo do decaimento α?

3 Poço de Potencial†‡

Uma partícula de massa m move-se em uma dimensão num potencial $V(x)$ definido por

$$V(x) \quad = \quad \begin{cases} -V_0\,, & |x| < a\,, \\ 0\,, & |x| > a\,, \end{cases} \tag{4}$$

onde V_0 é uma constante positiva – ver Figura 3.

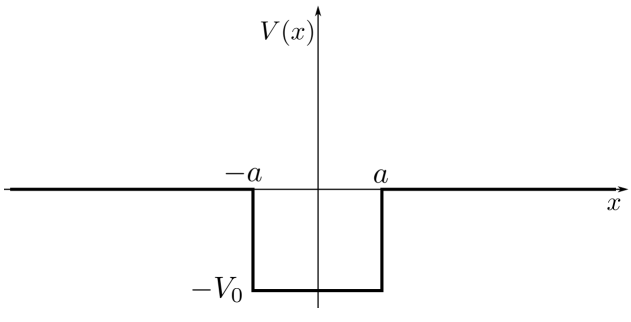

Figura 3: Representação do poço de potencial definido pela Eq. (4)

(a) Determine os estados ligados da partícula.

(b) Para o potencial da figura anterior os estados estacionários com energia positiva descrevem os estados de difusão. Considere uma partícula de massa m com energia $E > 0$ desloca-se na direcção do eixo Ox.

(i) Determine uma expressão analítica para a amplitude de transmissão t em termos de $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ e de $k_2 = \sqrt{2m(E + V_0)/\hbar^2}$.

(ii) Estude a dependência da probabilidade de transmissao $T = |t|^2$ em k_2. Determine os valores de k_2 para os quais essa probabilidade é um (i.e. o poço torna-se transparente).

(iii) Alguns átomos de gases raros de electrões de (por exemplo, o argon) têm a propriedade de não se oporem à transmissão de electrões de baixa energia (efeito de Ramsauer-Townsend). Admitindo que o modelo do poço de potencial em cima descreve tal fenómeno, e usando o raio do átomo de argon 1.5 $\mathring{A}$ para o parâmetro a do potencial na Eq. (4), determine qual o valor de V_0 para se ter uma ressonância para $E = 0.7$ eV?

4 Poço de Potencial Infinito†‡

Uma partícula de massa m move-se em uma dimensão num potencial $V(x)$ definido por

$$V(x) \quad = \quad \begin{cases} 0\,, & 0 < x < L\,, \\ +\infty\,, & x < 0 \text{ e } x > L\,, \end{cases} \tag{5}$$

como representado na figura 4.

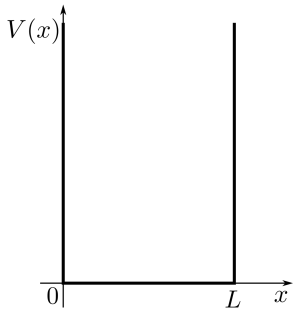

Figura 4: Representação do poço de potencial infinito definido pela Eq. (5)

(a) Comece por escrever as condições de continuidade que a função de onda e a sua derivada têm que obedecer nos pontos de descontinuidade do potencial.

(b) Existirão soluções não triviais (i.e. $\psi(x)$ não-zero em pelo menos alguma parte do espaço) quando $E < 0$?

(c) Procuremos agora soluções com $E > 0$.

1. Para resolver a equação de Schrödinger independente do tempo neste potencial, comece por escrever as soluções gerais desta equação nas diferentes regiões do espaço.
2. Imponha depois as condições de continuidade da alínea (a) obtendo duas equações.
3. Notando que a função de onda é normalizável, escreva também a equação que impõe a normalização da função de onda.
4. Resolva o sistema envolvendo as três equações das duas últimas alíneas. Encontre os valores das amplitudes das ondas planas e do vector de onda k, notando que apenas alguns valores de k são admitidos como solução do problema.
5. Encontre os valores das energias das soluções deste problema, notando que estas estão discretizadas. Estas serão as auto-energias deste problema.
6. Esboce as funções de onda dos auto-estados deste problema.

5 Potencial híbrido$^{\ddagger\Box}$

Considere uma partícula de massa m que se move em uma dimensão num potencial $V(x)$ dado por

$$V(x) \quad = \quad \begin{cases} \infty\,, & x < 0 \\ -V_0\,, & 0 < x < a\,, \\ 0\,, & x > a\,, \end{cases} \tag{6}$$

com energia $-V_0 < E < 0$ (onde V_0 é uma constante positiva) – ver Figura 5.

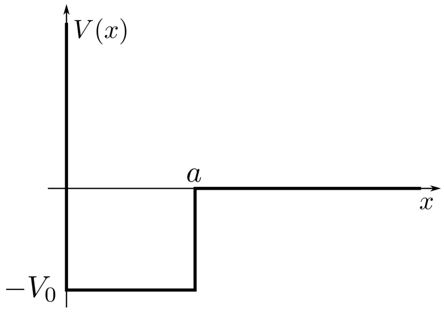

Figura 5: Representação do poço de potencial híbrido definido pela Eq. (6)

(a) Escreva as auto-funções do Hamiltoniano em função de E, V_0, m e $\hbar$.

(b) Mostre que E satisfaz a equação

$$\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \cot^2 \left[\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} a \right] \quad = \quad \frac{2mV_0}{\hbar^2}\,. \tag{7}$$

(c) Supondo que há apenas um estado ligado, determine o limite superior e o limite inferior de V_0.

6 Potencial delta de Dirac†‡

Considere que uma partícula de massa m se move em uma dimensão sob a influência de um potencial atractivo dado por $V(x) = -C\delta(x)$, onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac.

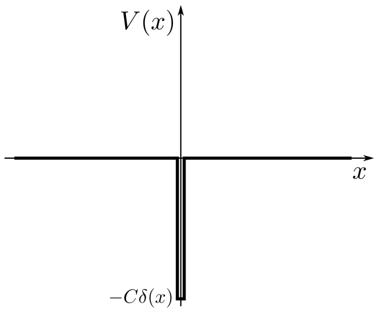

Figura 6: Representação do poço delta de Dirac, $V(x) = -C\delta(x)$.

(a) Determine a função de onda e a energia do estado ligado.

(b) Supondo que a partícula está no estado ligado, e que a intensidade do potencial varia subitamente de C para C', qual é a probabilidade de a partícula, depois de tal variação, ainda se encontrar no estado ligado?

7 Molécula diatómica$^{\ddagger\Box}$

Um modelo simplificado (em 1D) de uma molécula diatómica é o de dois poços de potencial separados por uma barreira de potencial – ver Figura 7. Cada um dos poços representa um dos núcleos da molécula. Assumamos que tal potencial é dado por,

$$V(x) \quad = \quad -\frac{\hbar^2 u}{2ma^2}\Big(\delta(x-a)+\delta(x+a)\Big)\,, \tag{8}$$

onde u é uma constante positiva sem dimensões, tendo a dimensões de comprimento. Estude os estados ligados (i.e. estados confinados) deste potencial em função de u.

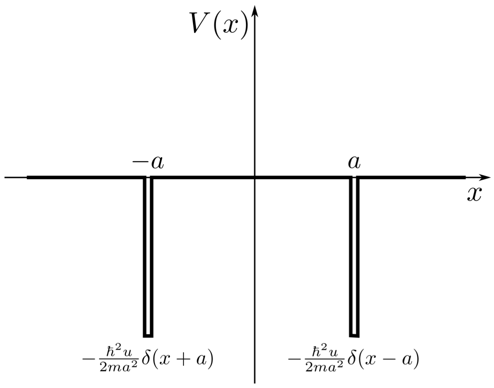

Figura 7: Representação do modelo 1D de uma molécula diatómica.

8 Poço de potencial infinito em 3D$^{\ddagger\square}$

Considere um electrão livre confinado numa caixa de dimensões L segundo as direcções x e y, dimensão d segundo a direcção z. Note que as condições de fronteira (resultantes da equação de Schrödinger – ver aulas teóricas) para a função de onda do electrão, dizem-nos que esta se deve anular em todas as superficies que delimitam a caixa em $x = 0, L$, em $y = 0, L$ e em $z = 0, d$. Suponha por fim que $L \gg d$.

(a) Explique porque é que as funções de onda dos auto-estados do Hamiltoniano se podem escrever como

$$\Psi(\vec{r}) \quad = \quad A\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z)\,, \tag{9}$$

e indique quais os valores possíveis para k_x, k_y e k_z.

(b) Determine a energia dos estados estacionários, exprimindo-a em termos das constantes $E_L \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ e $E_d \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2md^2}$.

(c) Calcule a energia do estado fundamental, E_0, em electron-Volt para o caso em que $L = 1$ cm e $d = 5$ $\mathring{A}$.

(d) Calcule a densidade de estados para este sistema, para energias acima do estado fundamental muito superiores a E_L mas muito inferiores a $3E_d$, i.e. $E_L \ll E - E_0 \ll 3E_d$.

(e) Faça uma representação esquemática de como varia a densidade de estados em função da energia (medida a partir de E_0), quando passamos pelas energias $3E_d$, $8E_d$, etc..

9 Evolução de uma função de onda gaussiana†‡

Considere uma partícula de massa m em um espaço um-dimensional. Assuma que no instante $t = 0$ a função de onda normalizada desta partícula é dada por

$$\Psi(t=0,x,\sigma_x^2) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x}}e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x}}\,, \tag{10}$$

onde $\sigma_x = \langle x^2\rangle$.

(a) Calcule $\Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$.

(b) Mostre que num instante $t > 0$ a densidade de probabilidade para a posição da partícula é dada por

$$|\Psi(t,x)|^2 = \left|\Psi(0,x,\sigma_x + \frac{\sigma_p t^2}{m^2})\right|^2 . \tag{11}$$

(c) Interprete os resultados das alíneas (a) e (b) em termos do Princípio da Incerteza de Heisenberg.