AULA 10

Exercícios

Meta da aula

Aplicar o formalismo quântico estudado neste módulo à resolução de um conjunto de exercícios.

objetivo

- aplicar os conhecimentos adquiridos nas Aulas 4 a 9 por meio da resolução de problemas diversos.

Pré-requisitos

Os conteúdos das Aulas de 4 a 9 desta disciplina.

INTRODUÇÃO

Nesta aula, faremos uma revisão das Aulas 4 a 9 do Módulo 2. Para tal, formulamos uma lista de exercícios na qual você poderá aplicar seus conhecimentos e rever alguns conceitos.

1. FUNÇÃO DE ONDA E EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER (AULA 4)

1.1. Mostre que se $\Psi_1(x, t)$ e $\Psi_2(x, t)$ são soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo em uma dimensão, $\Psi(x, t) = C_1\Psi_1(x, t) + C_2\Psi_2(x, t)$ (onde C_1 e C_2 são constantes arbitrárias) também é solução.

RESPOSTA COMENTADA

Se $\Psi_1(x, t)$ e $\Psi_2(x, t)$ são soluções da equação de Schrödinger, então:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_1(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi_1(x,t) \quad \text{e}$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_2(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi_2(x,t)$$

Se multiplicarmos a primeira equação por C_1 e a segunda por C_2, e depois somarmos as duas equações, obtemos:

$$i\hbar\frac{\partial\left[C_1\Psi_1(x,t)+C_2\Psi_2(x,t)\right]}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\left[C_1\Psi_1(x,t)+C_2\Psi_2(x,t)\right]}{\partial x^2}$$

$$+V(x,t)\left[C_1\Psi_1(x,t)+C_2\Psi_2(x,t)\right]$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t),$$

como queríamos demonstrar. Este resultado revela uma propriedade das equações diferenciais lineares: uma combinação linear de duas soluções é também uma solução.

2. OPERADORES MOMENTO E ENERGIA (AULA 5), PRINCÍPIO DA INCERTEZA (AULA 5) E O CASO ESTACIONÁRIO (AULA 6)

2.1. Um "estado ligado" é um estado quântico que está confinado a uma região do espaço, "ligado" a um poço de energia potencial. Veremos muitos exemplos de estados ligados nas próximas aulas. Matematicamente, podemos dizer que, para um estado ligado em torno de $x = 0$ em uma dimensão, $\lim_{x\to\infty}\psi(x) = \lim_{x\to-\infty}\psi(x) = 0.$

(a) Mostre que, no caso estacionário em uma dimensão, a corrente de densidade de probabilidade é nula para um estado ligado, em qualquer ponto do espaço.

(b) Usando o resultado do item anterior, mostre que $\langle p\rangle = 0$ para um estado ligado em uma dimensão. Dica: Use integração por partes.

RESPOSTA COMENTADA

(a) Mostramos na Aula 6 que, em qualquer situação estacionária (potencial independente do tempo), a densidade de corrente de probabilidade é constante para todo x. Basta então olharmos para a definição desta quantidade, a saber:

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi(x)\frac{d\psi^*(x)}{dx} - \psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}\right],$$

para notarmos que, como $\Psi(x)$ vai a zero no limite $x\to\infty$, $j(x)$ também deve ir a zero nesse limite. Assim, como $j(x)$ deve ser constante em todo x, essa constante é nula.

Como $j(x) = 0$ em todo o espaço, mesmo nos pontos em que $\Psi(x)$ é não-nula, podemos escrever:

$$\psi(x)\frac{d\psi^*(x)}{dx} = \psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}.$$

Este resultado nos será útil no próximo item.

(b) Temos que $\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)\,dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx.$

Integrando por partes: $\langle p\rangle = -i\hbar\left[\psi^*(x)\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\frac{d\psi^*(x)}{dx}dx\right].$

Pelo resultado encontrado no item anterior, ou seja, $\psi(x)\dfrac{d\psi^*(x)}{dx} = \psi^*(x)\dfrac{d\psi(x)}{dx}$,
podemos escrever: $\left\langle p\right\rangle = -i\hbar \ \ \psi^*(x)\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \left\langle p\right\rangle \Rightarrow$

$$\left\langle p\right\rangle = -\frac{i\hbar}{2}\psi^*(x)\psi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0.$$

Na última passagem usamos que $\lim\limits_{x\to\infty}\psi(x) = \lim\limits_{x\to-\infty}\psi(x) = 0.$

2.2. Na Atividade Final 4 da Aula 5, utilizamos o Princípio da Incerteza para estimar a energia cinética de partículas quânticas confinadas em determinadas regiões do espaço. Este procedimento é bastante útil quando queremos obter rapidamente uma estimativa da energia de uma partícula, sem termos que necessariamente resolver a equação de Schrödinger. Vamos utilizar novamente esse procedimento neste exercício, em que vamos usar o Princípio da Incerteza para *estimar* a energia do estado fundamental do oscilador harmônico.

(a) A energia do oscilador harmônico é dada por $E = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2$; em que o primeiro termo é a energia cinética e o segundo é a energia potencial. Sabendo que $\Delta p = \sqrt{\left\langle p^2\right\rangle - \left\langle p\right\rangle^2}$ e $\Delta x = \sqrt{\left\langle x^2\right\rangle - \left\langle x\right\rangle^2}$, e que o estado fundamental é um estado ligado, usando o resultado do exercício 2.1 escreva uma expressão para o valor esperado da energia em termos das incertezas Δp e Δx. Note que, por simetria, $\left\langle x\right\rangle = 0$.

(b) Usando o Princípio da Incerteza e impondo que o estado deva ter incerteza mínima, elimine Δx da expressão obtida no item (a), obtendo uma expressão para $\langle E\rangle$ que é apenas função de Δp.

(c) Minimize a expressão para $\langle E\rangle$ obtida no item anterior em relação a Δp e encontre a energia estimada do estado fundamental.

RESPOSTA COMENTADA

(a) O valor esperado da energia será dado por: $\langle E\rangle = \dfrac{\langle p^2\rangle}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle$.

Sabendo que $\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$ *e* $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$, *e usando* $\langle x\rangle = 0$

e $\langle p\rangle = 0$, *obtemos* $\langle E\rangle = \dfrac{(\Delta p)^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$.

(b) O Princípio da Incerteza diz que $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$. *Se impusermos incerteza mínima, temos a igualdade* $\Delta x\Delta p = \hbar/2$, *de modo que podemos eliminar* Δx *da expressão para* $\langle E\rangle$, *obtendo* $\langle E\rangle = \dfrac{(\Delta p)^2}{2m} + \dfrac{m\hbar^2\omega^2}{8(\Delta p)^2}$.

(c) Minimizando, ou seja, impondo que $\dfrac{d\langle E\rangle}{d(\Delta p)} = 0$, *obtemos:*

$$\frac{\Delta p}{m} - \frac{m\hbar^2\omega^2}{4(\Delta p)^3} = 0 \Rightarrow (\Delta p)^4 = \frac{m^2\hbar^2\omega^2}{4} \Rightarrow (\Delta p)^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}$$

Substituindo esse valor na expressão para $\langle E\rangle$, *obtemos finalmente nossa expressão para a energia do estado fundamental do oscilador harmônico simples:*

$$\langle E\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Nesse caso, nossa estimativa foi perfeita! O valor correto da energia do estado fundamental do oscilador harmônico é precisamente $\hbar\omega/2$, *e encontramos este valor sem precisarmos resolver a equação de Schrödinger.*

2.3. Vimos na Aula 6 que uma função de onda ψ é autofunção do operador O com autovalor λ apenas se a igualdade $O\psi(x) = \lambda\psi(x)$ for satisfeita. Se ψ não for autofunção do operador O, teremos $O\psi(x) = f(x)\psi(x)$, onde $f(x)$ é uma função e não um número. De forma qualitativa, podemos associar $f(x)$ ao valor local (ou seja, no ponto x) da grandeza representada pelo operador O.

(a) Em uma região do espaço, uma partícula de massa m possui uma função de onda dada por $\psi(x) = Ae^{-x^2/a^2}$ e uma energia dada por $E = \hbar^2/ma^2$, onde a é um comprimento. Determine, como função de x, a energia potencial $V(x)$ e a energia cinética $K(x)$ da partícula. Faça gráficos de $V(x)$ e $K(x)$.

(b) Repita o item (a) para uma energia total nula.

RESPOSTA COMENTADA

(a) O operador energia cinética é $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}$. *Aplicando-o à função de onda* $\psi(x) = Ae^{-x^2/a^2}$, *obtemos:*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(Ae^{-x^2/a^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4x^2}{a^4}-\frac{2}{a^2}\right)\left(Ae^{-x^2/a^2}\right).$$

Desta forma, a energia cinética local é $K(x) = \dfrac{\hbar^2}{ma^2}\left(1-\dfrac{2x^2}{a^2}\right)$.

Repare que, para $|x| > a/\sqrt{2}$ *, temos energia cinética negativa. Isso define os pontos de retorno clássicos. De acordo com a física clássica, seria impossível que a partícula fosse encontrada além desses pontos de retorno. No entanto, como vimos também no caso do degrau de potencial, de acordo com a mecânica quântica, existe uma probabilidade não-nula de encontrarmos a partícula nessas regiões.*

Podemos obter a energia potencial por $V(x) = E - K(x) = \dfrac{2\hbar^2}{ma^4}x^2$ *. Veja que temos aqui, mais uma vez, o oscilador harmônico simples. Os gráficos de* $V(x)$ *e* $K(x)$ *estão mostrados na* ***Figura 12.1.a****.*

(b) A energia cinética será idêntica à do item (a), $K(x) = \dfrac{\hbar^2}{ma^2}\left(1-\dfrac{2x^2}{a^2}\right)$.

Agora temos E = 0, de modo que a energia potencial será dada por $V(x) = -K(x) = \dfrac{\hbar^2}{ma^2}\left(\dfrac{2x^2}{a^2}-1\right)$. *Note que esta é uma energia potencial idêntica à do item (a), a menos de uma constante aditiva igual a* $-\dfrac{\hbar^2}{ma^2}$ *.*

Portanto, trata-se apenas de uma definição diferente do zero de energia, que não tem influência alguma na dinâmica da partícula. Os gráficos de $V(x)$ *e* $K(x)$ *estão mostrados na* ***Figura 12.1.b****.*

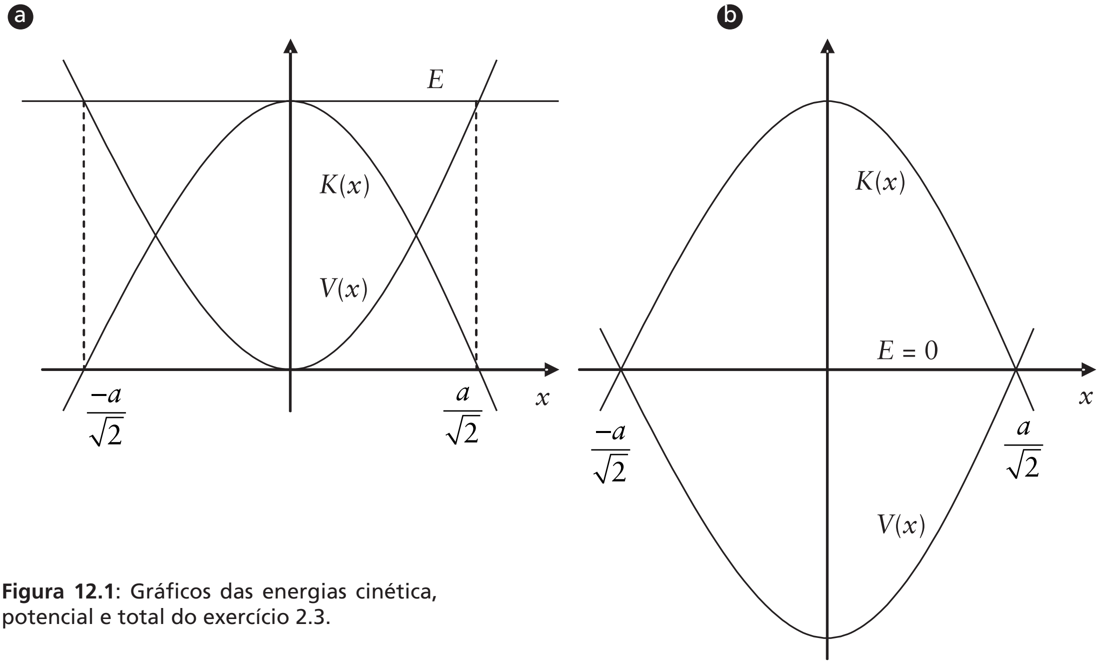

Figura 12.1: Gráficos das energias cinética, potencial e total do exercício 2.3.

2.4. A função de onda de uma partícula livre é dada por $\psi(x) = A\,\text{sen}(kx)$.

(a) Encontre o valor de A que normaliza a função de onda em uma caixa de comprimento L.

(b) Calcule o valor esperado do momento da partícula.

(c) Calcule a energia total da partícula.

RESPOSTA COMENTADA

(a) Para achar o valor de A, impõe-se a condição de normalização:

$$\int_{-L/2}^{L/2} |A|^2\, sen^2(kx)\,dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}\,.$$

(b) O valor esperado do momento é dado por:

$$\langle p \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi(x)\,dx = -i\hbar\int_{-L/2}^{L/2} A^*\,sen(kx)\,kA\cos(kx)\,dx$$

$$= -ki\hbar|A|^2\int_{-L}^{L/2} \text{sen}(kx)\cos(kx)\,dx = 0$$

Podemos entender esse resultado da seguinte forma. A função de onda pode ser escrita como $\psi(x) = A\text{sen}(kx) = \frac{A}{2i}\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)$. *Veja que a função de onda é uma combinação linear de ondas planas propagando-se para a direita e para a esquerda, com a mesma amplitude. Desta forma, o momento linear efetivo é nulo.*

(c) Como se trata de uma partícula livre, a energia total é igual a energia cinética. Seu valor esperado é:

$$\langle K\rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi^*(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x)dx = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-L/2}^{L/2} A^* sen(kx)k^2 A\text{sen}(kx)dx$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}|A|^2 \int_{-L/2}^{L/2} \text{sen}^2(kx)dx = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

3. PARTÍCULA LIVRE (AULA 7)

3.1 (a) Mostre que a função de onda $\Psi(x, t) = Ae^{ik(x-vt)}$ *satisfaz* a equação de Schrödinger dependente do tempo.

3.1 (b) Mostre que a função de onda $\Psi(x, t) = Ae^{k(x-vt)}$ *não satisfaz* a equação de Schrödinger dependente do tempo.

RESPOSTA COMENTADA

(a) Vamos substituir a função de onda na equação de Schrödinger e tomar as derivadas:

$$i\hbar\frac{\partial\left[Ae^{ik(x-vt)}\right]}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\left[Ae^{ik(x-vt)}\right]}{\partial x^2} + V(x,t)\left[Ae^{ik(x-vt)}\right]$$

$$\Rightarrow i\hbar(-ikv)\left[Ae^{ik(x-vt)}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\left[Ae^{ik(x-vt)}\right] + V(x,t)\left[Ae^{ik(x-vt)}\right].$$

Cancelando o fator comum $\left[Ae^{ik(x-vt)}\right]$, *chegamos à seguinte igualdade:*

$$\hbar kv = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x,t)$$

Essa igualdade só é possível, para todo x e t, se o potencial V(x, t) for uma constante real. Esse é o caso de uma partícula livre. Podemos, por simplicidade, supor que essa constante é nula. Assim, fica demonstrado que $\Psi(x, t) = Ae^{ik(x-vt)}$ satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo, desde que seja válida a relação:

$$\hbar k v = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow v = \frac{\hbar k}{2m},$$

que é precisamente a expressão obtida para a velocidade de fase na Atividade 2 da Aula 7.

(b) Substituindo novamente na equação de Schrödinger e executando os mesmos passos do item (a), chegamos desta vez à seguinte igualdade:

$$-i\hbar k v = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x,t)$$

Só haveria uma maneira de satisfazer a igualdade na equação anterior, se a energia potencial fosse uma constante complexa. Como a energia potencial tem de ser real, a igualdade não pode ser satisfeita e, portanto a função $\Psi(x, t) = Ae^{k(x-vt)}$ não satisfaz a equação de Schrödinger.

Vale a pena chamar a atenção sobre as diferenças entre a equação de Schrödinger e a equação de onda clássica:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

A função $\Psi(x, t) = Ae^{k(x-vt)}$ é uma solução da equação de onda, como você pode facilmente demonstrar, mas não da equação de Schrödinger!

3.2. (a) Mostre que a função de onda $\Psi(x, t) = A\,\mathrm{sen}(kx - \omega t)$ *não satisfaz* a equação de Schrödinger dependente do tempo.

(b) Mostre que a função de onda $\Psi(x, t) = A[\cos(kx - \omega t) + i\,\mathrm{sen}(kx - \omega t)]$ satisfaz a equação de Schrödinger dependente do tempo.

RESPOSTA COMENTADA

(a) Procedendo de forma idêntica à que fizemos no exercício anterior, chegamos à seguinte igualdade:

$$-i\hbar\omega\cos(kx-\omega t)=\left[\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V(x,t)\right]\operatorname{sen}(kx-\omega t)$$

Mais uma vez, é impossível satisfazer a igualdade dessa equação com um potencial real, de modo que a função proposta não satisfaz a equação de Schrödinger. E vale aqui também o comentário que fizemos no item (b) do exercício anterior: $\Psi(x, t) = A \operatorname{sen}(kx - \omega t)$ seria uma solução perfeitamente válida da equação de onda.

(b) Poderíamos resolver este item da mesma forma que o anterior, mas vamos proceder de forma diferente. A solução geral da equação de Schrödinger para a partícula livre foi escrita na Equação (7.8) da Aula 7:

$$\Psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}+Be^{-i(kx+\omega t)}.$$

Vamos mostrar que a solução proposta $\Psi(x,t)=A\left[\cos(kx-\omega t)+i\operatorname{sen}(kx-\omega t)\right]$ pode ser escrita na forma $\Psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}+Be^{-i(kx+\omega t)}$, se escolhermos de forma conveniente as constantes complexas A e B. Para tanto, basta notarmos que $\cos(kx-\omega t)+i\operatorname{sen}(kx-\omega t)=e^{i(kx-\omega t)}$, de modo que a solução proposta nada mais é do que $\Psi(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}$. Ou seja, é um caso particular (correspondendo a $B=0$), mas perfeitamente válido, da solução geral.

4. DEGRAU DE POTENCIAL (AULAS 8 E 9)

4.1. Uma partícula livre de massa m e número de onda k_1 está viajando para a direita. No ponto $x = 0$, o potencial muda bruscamente de 0 para V_0 e permanece com este valor para todos os valores positivos de x. Se a energia inicial da partícula é $E=\hbar^2k_1^2/2m=2V_0$:

(a) Calcule o número de onda k_2 na região $x > 0$ como função de k_1.

(b) Calcule o coeficiente de reflexão R do degrau de potencial.

(c) Qual é o valor do coeficiente de transmissão T? Para cada milhão de partículas com número de onda k_1 que incidem no degrau de potencial, quantas continuam a viajar no sentido positivo do eixo x? Como se compara este valor com a previsão clássica?

RESPOSTA COMENTADA

(a) Trata-se do caso $E > V_0$ estudado na Aula 9. O número de onda k_2 é dado por $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ *. Usando* $E = \hbar^2 k_1^2/2m = 2V_0$ *,*

temos $k_2 = \sqrt{2mV_0}/\hbar = k_1/\sqrt{2}$.

(b) Pela Equação (9.9) da Aula 9, temos:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{\left(1 - 1/\sqrt{2}\right)^2}{\left(1 + 1/\sqrt{2}\right)^2} \approx 2{,}9\%$$

(c) Como $T + R = 1$, então $T \approx 97{,}1\%$ *. Assim, de cada milhão de partículas que incidem sobre o degrau, 971.000 continuam a viajar no mesmo sentido, as demais são refletidas. De acordo com a mecânica clássica, todas as partículas passariam pelo degrau.*

4.2. Repita o exercício anterior, mas agora o degrau de potencial é definido por $V = 0$ para $x < 0$ e $V = -V_0$ para $x > 0$. Como no exercício anterior, a energia total da partícula vale $E = \hbar^2 k_1^2/2m = 2V_0$. Ou seja, ao passar pelo degrau, a velocidade da partícula aumenta em vez de diminuir. Responda às questões (a), (b) e (c) do exercício anterior, discutindo os resultados obtidos.

RESPOSTA COMENTADA

(a) O número de onda k_2 é dado agora por $k_2 = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$.

Usando $E = \hbar^2 k_1^2/2m = 2V_0$ *, temos* $k_2 = \sqrt{6mV_0}/\hbar = \sqrt{\frac{3}{2}}k_1$.

(b) Da mesma forma que no exercício anterior, temos:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{\left(\sqrt{2} - \sqrt{3}\right)^2}{\left(\sqrt{2} + \sqrt{3}\right)^2} \approx 1{,}0\%$$

(c) Novamente, como $T + R = 1$, então $T \approx 99{,}0\%$ *. Assim, de cada milhão de partículas que incidem sobre o degrau, 990.000 continuam a viajar no mesmo sentido, as demais são refletidas. Novamente, de acordo com a mecânica clássica, todas as partículas passariam pelo degrau.*

4.3. Um feixe de prótons com uma energia cinética de 40 MeV incide sobre um degrau de potencial de 30 MeV.

(a) Que fração do feixe é refletida?

(b) Que fração do feixe é transmitida?

(c) Como se modificam os resultados encontrados em (a) e (b), se a energia dos prótons for de 20MeV?

(d) Como se modificam os resultados encontrados em (a), (b), (c), se as partículas forem elétrons.

RESPOSTA COMENTADA

(a) Trata-se novamente do caso $E > V_0$, discutido na Aula 9. Pela Equação (9.9) daquela aula, temos:

$$R = \frac{\left[1-\sqrt{1-V_0/E}\right]^2}{\left[1+\sqrt{1-V_0/E}\right]^2} = \frac{\left[1-\sqrt{1/4}\right]^2}{\left[1+\sqrt{1/4}\right]^2} = \frac{1}{9}$$

(b) $T = 1 - R = 8/9$.

(c) Temos agora o caso $E < V_0$, tratado na Aula 8. Nesse caso, o coeficiente de reflexão é 1 e o de transmissão é 0 (veja a Equação (8.11)).

(d) Nada se modifica, pois os coeficientes de transmissão e reflexão do degrau de potencial não dependem da massa da partícula.

RESUMO

Exercitamos o que aprendemos nas Aulas 4 a 9 do Módulo 2 desta disciplina.

INFORMAÇÕES SOBRE A PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, iniciaremos nosso estudo sobre a barreira de potencial e conheceremos um dos efeitos mais interessantes da Física: o efeito túnel.