

Mecânica Quântica – Série 4

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2013/2014

Versão de 22/09/2013

4.1 *Gasiorowicz 4.1* Considere um potencial arbitrário localizado numa região finita do eixo dos x . As soluções da equação de Schrödinger à esquerda e à direita do potencial são indicadas na figura.



Mostre que se escrevermos

$$C = S_{11}A + S_{12}D$$

$$B = S_{21}A + S_{22}D$$

isto é relacionamos os coeficientes das ondas incidentes e transmitidas por

$$\begin{bmatrix} C \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ D \end{bmatrix}$$

então as relações seguintes são verificadas:

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1$$

$$|S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1$$

$$S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0$$

Use as relações anteriores para mostrar que a matriz S

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix}$$

é unitária.

Sugestão: Use conservação de fluxo.

4.2 *Gasiorowicz 4.2*

Determine os elementos da matriz S para o potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ V_0 & -a < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

e mostre que verificam as condições gerais expressas no problema anterior.

Sugestões/Comentários:

- Considere só o caso $E < V_0$.
- Comece por escrever:

$$\begin{cases} \psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < -a \\ \psi_{II} = Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x} & -a < x < a \\ \psi_{III} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} & x > a \end{cases}$$

- Utilize as condições nas fronteiras para escrever

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

e portanto

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad Q = M_2 M_1$$

- Mostre que

$$S = \frac{1}{Q_{22}} \begin{pmatrix} Q_{11}Q_{22} - Q_{12}Q_{21} & Q_{12} \\ -Q_{21} & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{Q_{22}} \begin{pmatrix} 1 & Q_{12} \\ -Q_{21} & 1 \end{pmatrix}$$

pois, $Q_{11}Q_{22} - Q_{12}Q_{21} = 1$.

- Verifique que os coeficientes de reflexão e transmissão são dados por

$$T_L = S_{11}, \quad R_L = S_{21}, \quad T_R = S_{22}, \quad R_R = S_{12}$$

onde R_L, T_L são os coeficientes de reflexão e transmissão para incidência da esquerda para a direita, e R_R, T_R para incidência da direita. Compare com os resultados obtidos na aula teórica.

- Mostre que no caso em que $V_0 < 0$ e $E \leq 0$ as condições para existirem estados ligados, $\tan(qa) = \alpha/q$ e $\cot(qa) = -q/\alpha$ com (ver aula teórica) $\alpha = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$ e $q = \sqrt{2m/\hbar^2}(|V_0| - |E|)$ correspondem aos elementos da matriz S terem pelos (serem infinitos). Porquê?

*** 4.3** Uma partícula com massa m movimenta-se ao longo do eixo dos x no potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x > 0 \\ \infty, & x \leq 0. \end{cases}$$

Determine as funções de onda dos estados estacionários (incluindo a dependência do tempo) e os valores próprios da energia.

*** 4.4** Um eletrão com energia $E = 2$ eV, encontra uma barreira de potencial retangular da altura $V_0 = 10$ eV e da largura $a = 0.1$ nm. Calcule a probabilidade da transmissão:

a) Usando a fórmula exata

b) Usando a fórmula aproximada derivada para o caso $\kappa a \gg 1$, onde $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$ é o número de onda na região da barreira.

*** 4.5** Considere o potencial

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

onde V_0 e a são constantes positivas. Mostre que, na região $x > a$, as soluções da equação de Schrödinger com energia positiva podem ser escritas na forma

$$\psi(x) = C [e^{i(kx+2\delta)} - e^{-ikx}],$$

onde C é uma constante, e δ é uma fase dependente da energia.

*** 4.6** Um neutrão (massa $940 \text{ MeV}/c^2$) encontra-se no estado fundamental do potencial de um poço finito retangular de largura 0.5 fm . A energia do estado fundamental é -2.2 MeV . Determine a profundidade V_0 do potencial.

4.7 Gasirowicz 4.6

Considere a matriz de difusão para o potencial

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(x) = \frac{\lambda}{a}\delta(x - b)$$

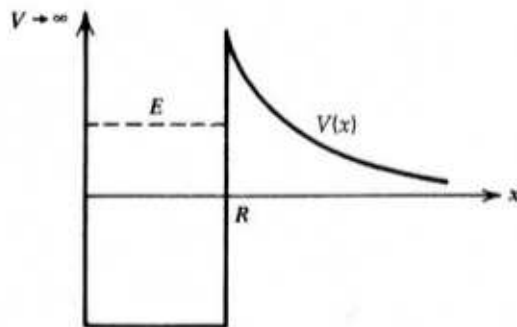
Mostre que tem a forma

$$\begin{bmatrix} \frac{2ika}{2ika - \lambda} & \frac{\lambda}{2ika - \lambda} e^{-2ikb} \\ \frac{\lambda}{2ika - \lambda} e^{2ikb} & \frac{2ika}{2ika - \lambda} \end{bmatrix}$$

Mostre que é unitária e que a condição de haver estados ligados corresponde ao polos da matriz. Mostre que isto os estados ligados só existem para $\lambda < 0$.

*** 4.8 Gasirowicz 4.8**

Considere o potencial representado na figura:



onde

$$V(x) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m x^2}, \quad x > R$$

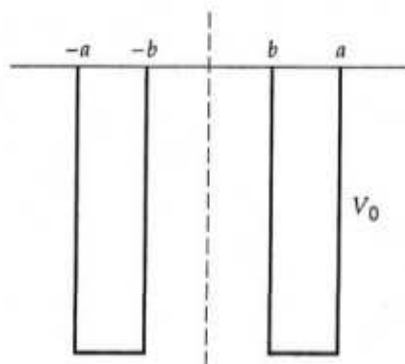
Estime o tempo de vida média da partícula neste potencial. Exprima o resultado em termos da quantidade adimensional $l/(kR)$ com $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ e $l \gg 1$.

Notas/Sugestões:

- O potencial $V(x)$ representa a barreira de potencial centrífuga no problema real a 3 dimensões (ver capítulo 8).
- Veja no site do livro na net www.wiley.com/college/gasiorowicz o problema do efeito de túnel duma partícula alfa no núcleo.
- Notar que o tempo de vida vai para infinito quando $\hbar \rightarrow 0$, isto é, trata-se dum efeito quântico.

***4.9** *Gasiorowicz 4.11*

Considere uma partícula num poço de potencial duplo representado na figura:



Mostre que as condições para os valores próprios podem ser escritas na forma,

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

e

$$\tan q(a-b) = \frac{q\alpha(1 + \coth \alpha b)}{q^2 - \alpha^2 \coth \alpha b}$$

para as soluções pares e ímpares, respetivamente. Fizemos as definições

$$-E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad E + V_0 = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

Nota: No enunciado os argumentos da \tanh e \coth estão errados no livro. Devem ser $\tanh \alpha b$ e $\coth \alpha b$. Aqui estão corretos.

4.10 Gasiorowicz 4.13

Considere o problema 4.9 do poço de potencial duplo.

a) Mostre que as condições para os valores próprios tendem para a condição no poço de potencial simples quando $b \rightarrow 0$.

b) Considere agora o caso em que a separação entre os dois poços é muito grande, com a largura de cada poço fixa ($b \gg a$). Mostre que as soluções pares e ímpares tendem uma para a outra. Determine a diferença de energia entre os níveis mais baixos pares e ímpares. (Nota: para $z \gg 1$ temos $\tanh z = 1 - 2e^{-2z}$).

Sugestões/Comentários

A resposta à alínea b) é:

$$\Delta E = E_- - E_+ = \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} 2y_0\Delta y$$

com

$$\Delta y = y_- - y_+ = \frac{4y_0(\lambda - y_0^2)}{\lambda(2 + \sqrt{\lambda - y_0^2})} e^{-2\eta\sqrt{\lambda - y_0^2}}$$

onde $\Delta = a - b$ é a largura do poço, $\eta = b/\Delta$ é uma medida da separação dos dois poços e y_0 é a solução quando $\eta \gg 1$, isto é a solução da equação

$$\tan y = \frac{2y\sqrt{\lambda - y^2}}{2y^2 - \lambda}$$

com $y = q\Delta$. No entanto, mais importante do que encontrar a resposta é analisar o problema numericamente. Para isso siga os passos seguintes:

1. Introduza as variáveis $y = q\Delta$, $b = \eta\Delta$, com $\Delta = a - b$ e a variável λ (ver poço simples)

$$\lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

para mostrar que as equações do problema 4.11 do Gasiorowicz se podem escrever

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

para as soluções pares e ímpares, respetivamente.

2. Defina, no Mathematica, as funções

$$\text{fpar} = \text{Function}[\{y, \lambda, \eta\}, \frac{y\sqrt{\lambda - y^2} \left(1 + \tanh(\eta\sqrt{\lambda - y^2})\right)}{y^2 - (\lambda - y^2) \tanh(\eta\sqrt{\lambda - y^2})}]$$

e

$$\text{fimpar} = \text{Function}[\{y, \lambda, \eta\}, \frac{y\sqrt{\lambda - y^2} \left(1 + \coth(\eta\sqrt{\lambda - y^2})\right)}{y^2 - (\lambda - y^2) \coth(\eta\sqrt{\lambda - y^2})}]$$

3. Utilize estas funções para experimentar para vários valores de λ e η . Reproduza os seguintes resultados:

- Para valores baixos de η e λ a equação ímpar pode não ter soluções enquanto que a par tem sempre pelo menos uma solução como indicado na Figura 1.

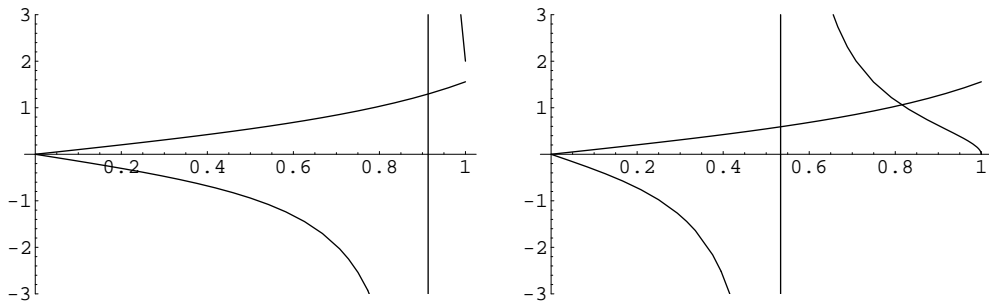


Figure 1: a) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{ímpar}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 0.5$; b) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{par}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 0.5$.

- Para valores elevados de η , isto é os dois poços muito separados, já há solução para os dois casos e as soluções convergem de facto uma para a outra como dito no enunciado, como se mostra na Figura 2.

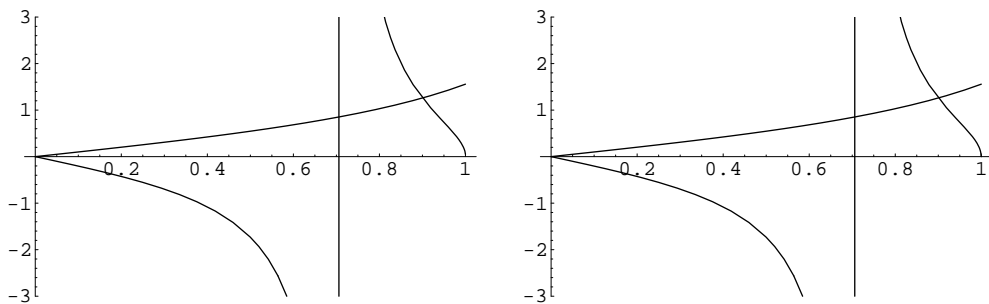


Figure 2: a) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{ímpar}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 20$; b) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{par}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 20$.

- Para valores elevados de λ há sempre solução, quer os poços estejam juntos ou muito separados como se indica nas Figuras 3 e 4.
- Para λ suficientemente grande, poderá haver várias soluções, conforme se pode ver nas Figuras 3, 4 e 5.
- Use o `Mathematica` para verificar a seguinte tabela

η	y_0	y_+	y_-	$\Delta y(\text{Exato})$	$\Delta y(\text{Aprox})$
0.1	2.14242	1.84913	2.36303	0.513902	0.508206
0.2	2.14242	2.02045	2.25234	0.231887	0.231777
0.5	2.14242	2.13142	2.1534	0.0219863	0.0219867
1.0	2.14242	2.14221	2.14264	0.0004338	0.0004338
2.0	2.14242	2.14242	2.14242	1.68894×10^{-7}	1.68894×10^{-7}

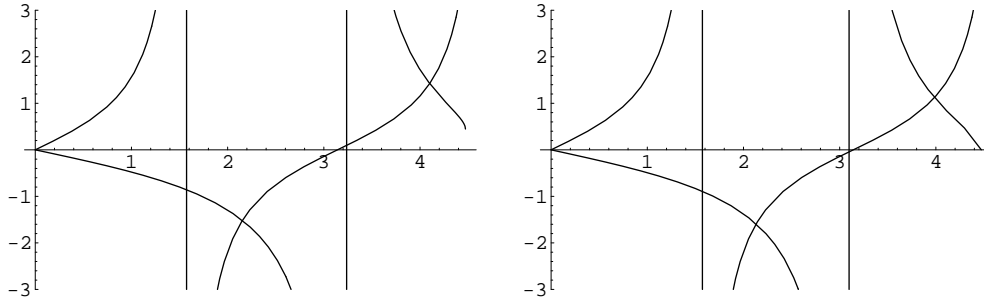


Figure 3: Como na Figura 2 mas para $\lambda = 20$ e $\eta = 0.5$.

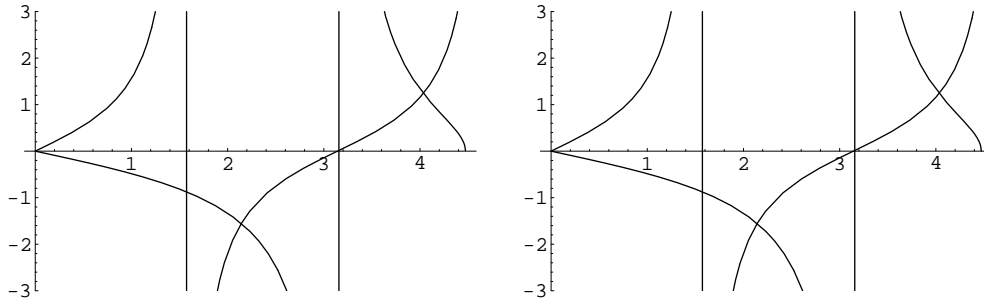


Figure 4: Como na Figura 2 mas para $\lambda = 20$ e $\eta = 20$.

Tabela 1: Soluções das equações do poço duplo para $\lambda = 20$ para vários valores de η , mostrando o bom acordo da expressão inicial para Δy para valores de $\eta > 0.5$.

Notar que a energia é dada por

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2}(\lambda - y^2)$$

pele que os estados pares têm energia mais baixa que os ímpares.

- Utilize o **Mathematica** para reproduzir os gráficos das funções de onda pares e ímpares (normalizadas) para vários valores de λ e η representados nas Figuras 6 a 9.

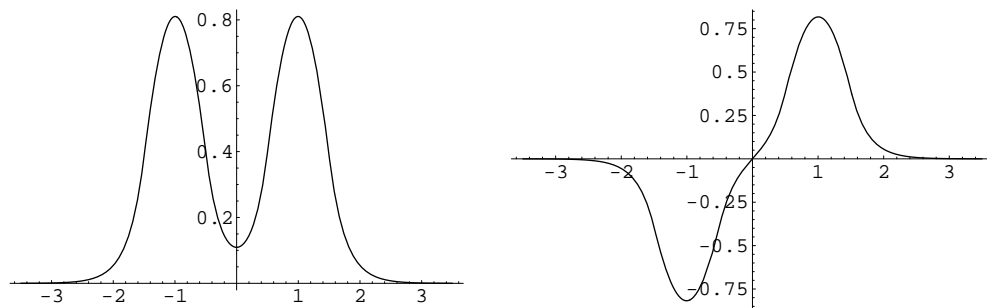


Figure 6: a) Função de onda par para $\lambda = 20$ e $\eta = 0.5$. b) Função de onda ímpar para os mesmos valores de λ e η .

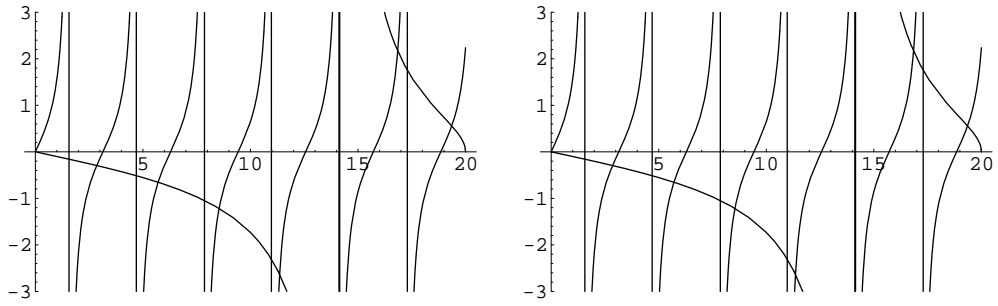


Figure 5: Como na Figura 2 mas para $\lambda = 400$ e $\eta = 20$.

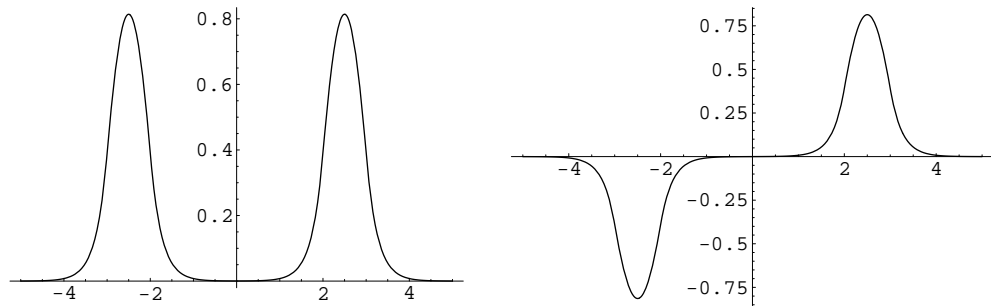


Figure 7: Como na Figura 6 para $\lambda = 20$ e $\eta = 2$.

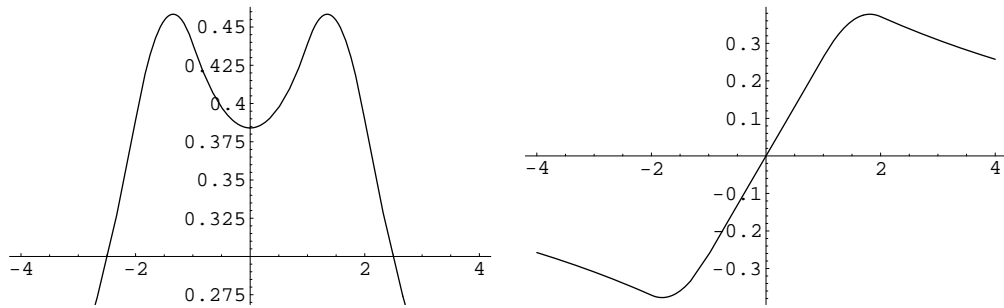


Figure 8: Como na Figura 6 para $\lambda = 1$ e $\eta = 1$.

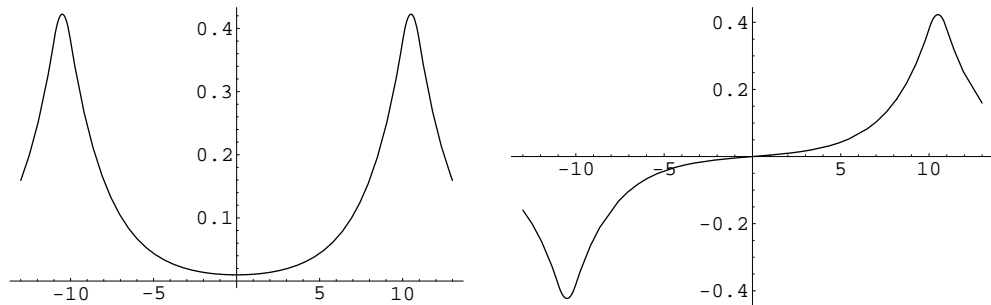


Figure 9: Como na Figura 6 para $\lambda = 1$ e $\eta = 10$.

***4.11** *Gasiorowicz 4.14*

Demonstre o Teorema do virial, que para uma dimensão toma a forma

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

Para isso

a) Mostre que para uma função de onda real $\psi(x)$ se tem

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) x \frac{dV(x)}{dx} \psi(x) = -\langle V \rangle - 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d\psi(x)}{dx} x V(x) \psi(x)$$

b) Use a equação para os valores próprios da energia para mostrar que

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

Nota: Há duas gralhas no enunciado no livro. As expressões corretas são as indicadas acima.

4.12 *Adaptado de Griffiths 2.42*

Encontre os valores próprios do seguinte potencial (*meio oscilador harmónico*),

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}$$

Basta pensar, não é preciso fazer contas.

***4.13** Uma partícula encontra-se no potencial dum oscilador harmónico uni-dimensional com frequência angular clássica ω . Em $t = 0$, a sua função de onda é

$$\Psi(x, 0) = A [2\psi_0(x) - 4\psi_1(x) + \psi_3(x)],$$

onde $\psi_n(x)$ é a solução normalizada da equação de Schrödinger independente do tempo ($n = 0, 1, 2, \dots$) com a energia $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ e A é uma constante real e positiva.

a) Calcule o valor médio da energia da partícula (em múltiplos de $\hbar\omega$).

b) Qual é a probabilidade de obter a energia E_1 numa medição?

***4.14** *Adaptado do Griffiths 2.14*

Uma partícula está no estado fundamental do oscilador harmónico com frequência ω ,

$$\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

Num dado momento a frequência passa subitamente para o dobro, $\omega' = 2\omega$, sem mudança na função de onda (nesse instante). Qual é a probabilidade dum medida da energia ainda dar o valor $\hbar\omega/2$? E $\hbar\omega$?

4.15 (*Adaptado do Griffiths 2.54*).

Considere a equação diferencial do oscilador harmónico,

$$\frac{d^2 u(y)}{dy^2} + (\epsilon - y^2) u(y) = 0$$

a) Utilize o seguinte programa de **Mathematica** para resolver numericamente a equação para o estado fundamental do oscilador harmónico:

```
Clear[eps, a, b, c, d]
eps=3
a=0
b=10
c=-10
d=10
```

```
Plot[Evaluate[u[y]/. NDSolve[{u''[y]+(eps-y^2)*u[y]==0, u[0]==1,
u'[0]==0}, u[y], {y, 10^(-8), 10}, MaxSteps->1000]], {y, a, b}, PlotRange->{c, d}]
```

A solução, para o estado fundamental ($u(0) = 1, u'(0) = 0$), é para $\epsilon = 1$. Comece com valores de $\epsilon = 1.1$ e depois $\epsilon = 0.9$ para ver que a cauda muda de direção. Dando valores cada vez mais perto de $\epsilon = 1$ verifique que a cauda tende para zero. Isto ilustra o porquê da condição de quantização, as funções de onda têm que ser de quadrado integrável.

b) Que modificações teria que fazer para encontrar a solução para o primeiro estado excitado?

4.16 *Adaptado de Griffiths 2.17*

a) Use a fórmula de **Rodrigues** para os polinómios de Hermite, $H_n(x)$,

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2}$$

para encontrar H_1, H_2, H_3 e H_4 .

b) Os polinómios de Hermite obedecem a

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

Use os resultados de a) para calcular H_5 e H_6 .

c) Para os polinómios de Hermite temos

$$\frac{dH_n}{dx} = 2nH_{n-1}(x)$$

Verifique esta relação diferenciando H_5 e H_6 .

d) Os polinómios de Hermite podem ser obtidos a partir da seguinte **função geradora**

$$e^{-z^2+2zx} = \sum_0^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(x)$$

Isto quer dizer que $H_n(x)$ é o coeficiente de $\frac{z^n}{n!}$ na expansão de Taylor de e^{-z^2+2zx} . Use esta expressão para encontrar H_0, H_1, H_2 .

4.17 Considere o seguinte potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{para } x < 0 \\ \lambda x & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

1. Mostre que a equação de Schrödinger se pode escrever na forma

$$u''(y) - (y - \epsilon)u(y) = 0$$

onde

$$y = \left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3} x, \quad \epsilon = \left(\frac{2m}{\hbar^2\lambda^2}\right)^{1/3} E$$

2. A solução da equação anterior com a condição apropriada para $x \rightarrow \infty$ é

$$u(y) = \text{Ai}(y - \epsilon)$$

onde $\text{Ai}(y)$ é a função de Airy. Veja as propriedades desta função. O *Mathematica* tem esta função com o comando `AiryAi[x]`. Em particular a função de Airy, $\text{Ai}(y)$, tem zeros para valores negativos do argumento, como se pode ver no gráfico da Fig. 6.

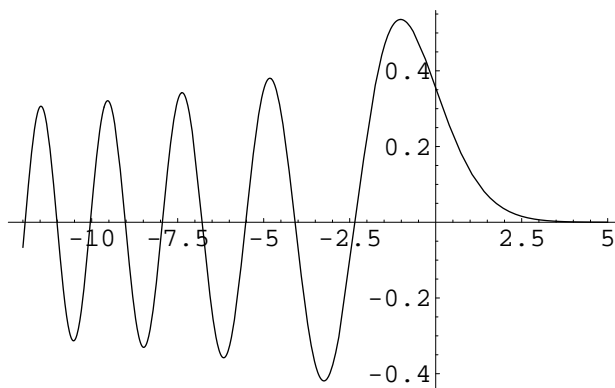


Figure 6: Função de Airy, $\text{Ai}(y)$.

3. Mostre que a condição $u(0) = 0$ conduz à quantização da energia. Encontre as energias dos três primeiros níveis e faça os gráficos das respectivas funções de onda. Verifique que o espaçamento entre os níveis de energia não é uniforme.

***4.18** O sistema internacional (MKS) de unidades não é apropriado para cálculos ao nível atômico. Assim, quando queremos fazer cálculos numéricos em Mecânica Quântica as unidades são um problema que pode afetar a precisão dos mesmos. Por isso foi concebido

um sistema de unidades designado por *sistema atômico de unidades* onde se fazem as seguintes definições,

$$\hbar = 1, \quad m_e = 1, \quad a_0 = 1$$

onde $a_0 = \hbar/(m_e c \alpha)$ é o raio de Bohr que se torna assim a unidade de comprimento neste sistema e $\alpha = 1/137.036$ é a constante de estrutura fina.

- Mostre que neste sistema uma unidade de tempo é 2.42×10^{-17} s, uma unidade de distância é 5.29×10^{-11} m e uma unidade de energia é 4.36×10^{-18} J = 27.21 eV.
- Verifique que a equação de Schrödinger se escreve neste sistema

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} + [V(x) - E] u = 0$$

onde V e E vem expressas na unidade de energia do sistema.

***4.19** Considere um potencial em degrau de altura V_0 para $x > 0$.

1. Mostre que para este potencial, quando $E < V_0$, a função de onda para $x < 0$, soma da onda incidente e onda reflectida é uma onda estacionária. Para isso mostre que os zeros não mudam com o tempo. Determine a posição desses zeros.
2. Faça um programa de **Mathematica** para desenhar as funções de onda no problema do potencial em degrau. Verifique o resultado da alínea anterior. Em particular verifique o resultado da Figura seguinte

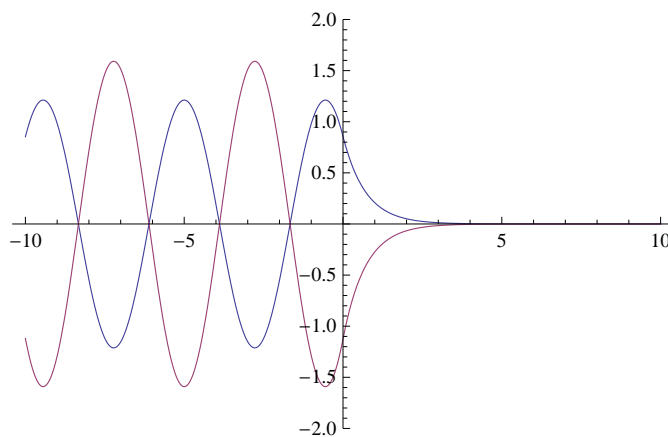


Figure 7: Gráfico da parte real (azul) e imaginária (vermelho) da função de onda para um elétron com $E = 1$ e uma altura do potencial $V_0 = 2$, expressas em unidades atômicas. O gráfico corresponde a um dado instante de tempo e vai variar com o tempo.

***4.20** Faça um programa de **Mathematica** para desenhar as funções de onda no problema da barreira de potencial. Verifique o resultado da Figura seguinte

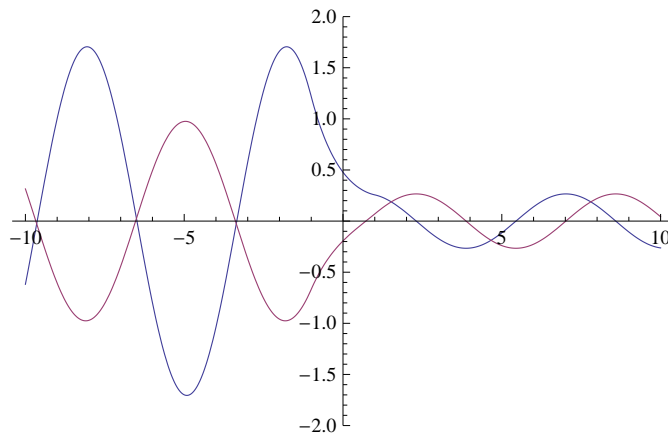


Figure 8: Gráfico da parte real (azul) e imaginária (vermelho) da função de onda para um elétron com $E = 1/2$ e uma altura do potencial $V_0 = 1$, expressas em unidades atômicas. A barreira de potencial está entre $x = -1$ e $x = 1$, também em unidades atômicas. O gráfico corresponde a um dado instante de tempo e vai variar com o tempo.

4.21 Matriz de Transferência, adaptado de Griffiths 2.51

Considere um potencial por troços em que há uma descontinuidade do potencial em x_0 .

1. Se escrevermos

$$\begin{cases} u_I(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx} & x < x_0 \\ u_{II}(x) = Fe^{Kx} + Ge^{-Kx} & x > x_0 \end{cases}$$

onde

$$\begin{cases} K = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))} & E > V(x) \\ K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)} & E < V(x) \end{cases}$$

mostre que se obtém

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \equiv M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

onde M é a matriz de transferência. Determine os elementos de matriz M_{ij} .

2. Mostre que a matriz de transferência é multiplicativa, isto é, se tiver uma descontinuidade com matriz M_1 em x_1 e outra M_2 imediatamente a seguir em $x_2 > x_1$ (o potencial supõe-se constante por troços) então a matriz total é

$$M = M_2 M_1$$

3. Mostre que o coeficiente de transmissão é dado por

$$|T|^2 = \left| M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} \right|^2$$

4. Use os resultados anteriores para fazer um programa do **Mathematica** que resolva numericamente os seguintes problemas:

- Barreira de potencial quadrada. Comparar com o resultado exato.
- Potencial triangular.
- Potenciais mais complicados como

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , |x| > a/2 \\ \frac{V_0}{a^2/4}(a^2/4 - x^2) & , |x| \leq a/2 \end{cases}$$