

Mecânica Quântica – Série 4

Curso de Engenharia Biomédica – 2008/2009

Versão de 07/10/2008

4.1 Gasirowicz 4.1

4.2 Gasirowicz 4.2

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

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

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 pólos (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 electrão com energia $E = 2$ eV, encontra uma barreira de potencial rectangular da altura $V_0 = 10$ eV e da largura $a = 0.1$ nm. Calcule a probabilidade da transmissão:

a) Usando a fórmula exacta

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

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

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

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

4.7 *Gasiorowicz 4.6*

*** 4.8** *Gasiorowicz 4.8*

Sugestões:

- Veja no site do livro na net www.wiley.com/college/gasiorowicz o problema do efeito de túnel dum 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*

Nota: No enunciado os argumentos da \tanh e \coth estão errados. Devem ser $\tanh ab$ e $\coth ab$.

4.10 Gasirowicz 4.13

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 $\Delta = b - a$ 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 $\Delta = b - a$ e a variável λ (ver poço simples)

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

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

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

para as soluções pares e ímpares, respectivamente.

2. Defina, no Mathematica, as funções

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

e

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

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.

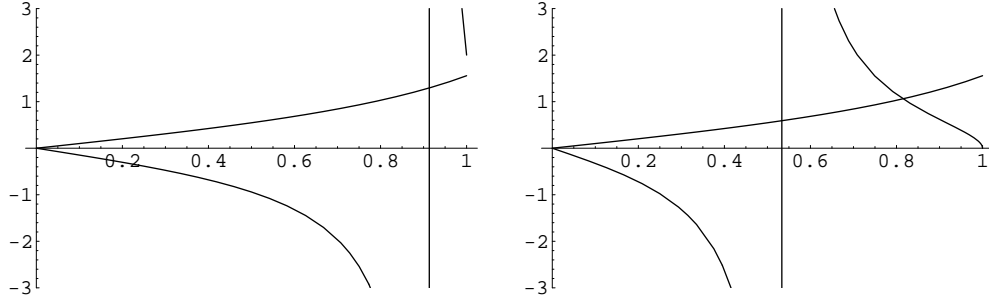


Figure 1: a) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{impar}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 0.5$; b) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{par}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 0.5$.

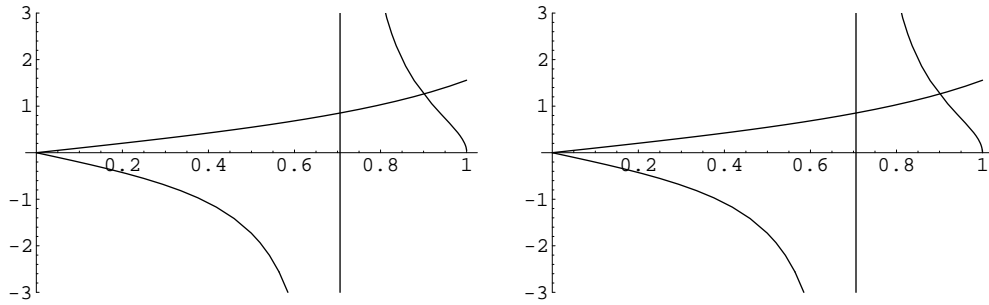


Figure 2: a) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{impar}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 20$; b) Gráfico de $\tan y$ e $f_{\text{par}}[y, \lambda, \eta]$ para $\lambda = 1$ e $\eta = 20$.

- Para valores elevados de 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.
- 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_-	$\Delta y(\text{Exacto})$	$\Delta y(\text{Aprox})$
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}

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

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

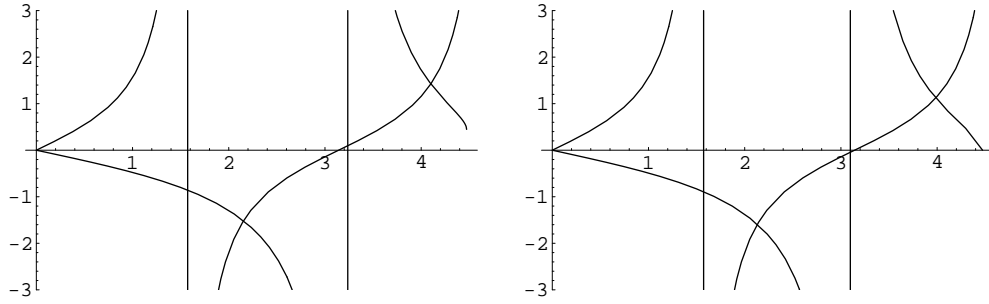


Figure 3: Como na Figura 2 mas para $\lambda = 20$ e $\eta = 0.5$.

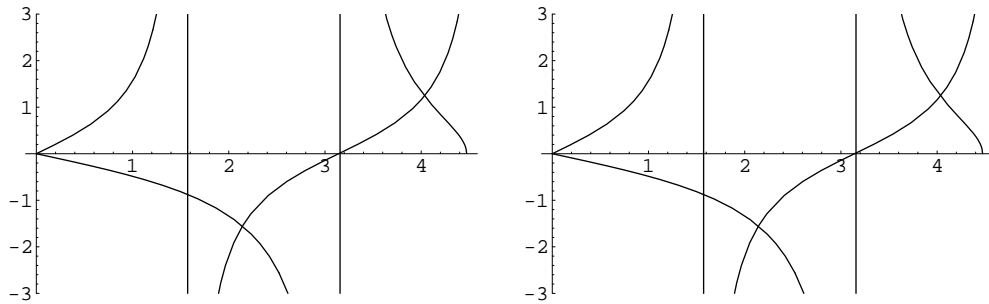


Figure 4: Como na Figura 2 mas para $\lambda = 20$ e $\eta = 20$.

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.

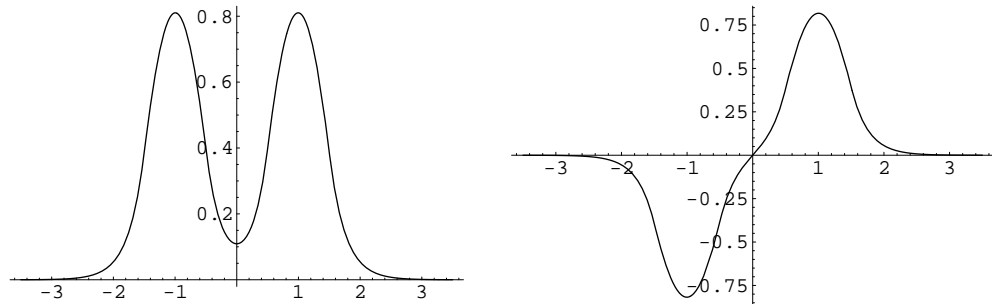
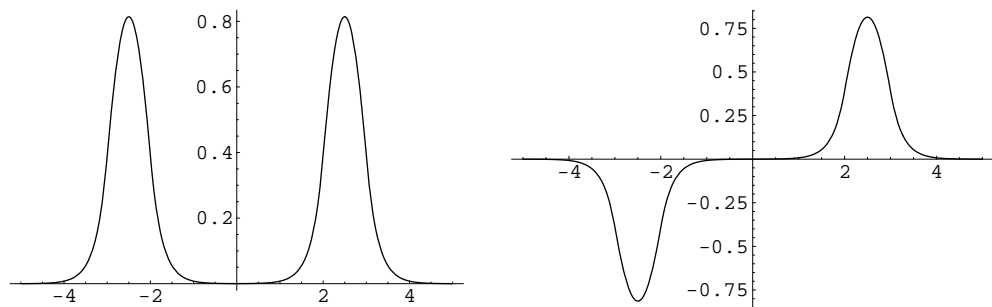


Figure 6: a) Função de onda par para $\lambda = 20$ e $\eta = 0.5$. b) Função de onda ímpar para os mesmos valores de λ e η .



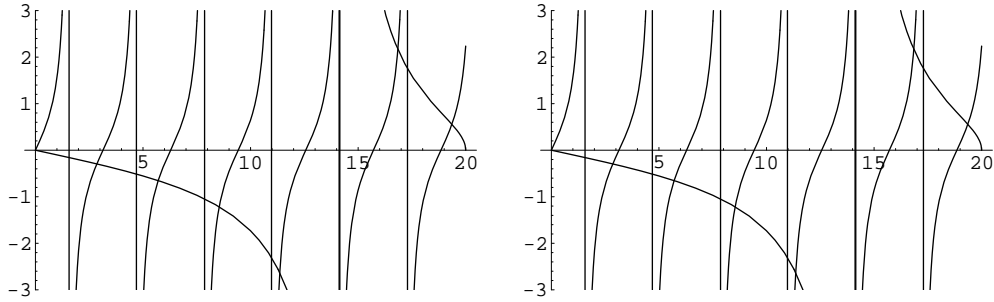


Figure 5: Como na Figura 2 mas para $\lambda = 400$ e $\eta = 20$.

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

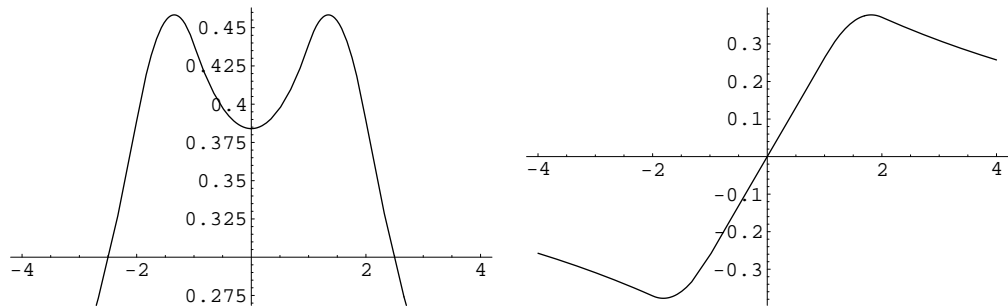


Figure 8: Como na Figura 6 para $\lambda = 1$ e $\eta = 1$.

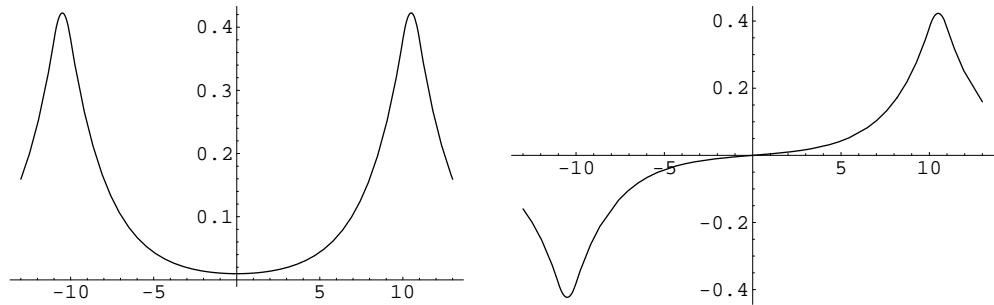


Figure 9: Como na Figura 6 para $\lambda = 1$ e $\eta = 10$.

***4.11** *Gasiorowicz 4.14*

Nota: Há duas gralhas no enunciado. As expressões correctas são:

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

e

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

4.12 *Adaptado de Griffiths 2.42*

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

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

Basta pensar, não é preciso fazer contas.

*** 4.13** Uma partícula encontra-se no potencial dum oscilador harmónico unidimensional 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 duma 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,

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

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 polinômios 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 polinômios 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 polinômios de Hermite temos

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

Verifique esta relação diferenciando H_5 e H_6 .

d) Os polinômios 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

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

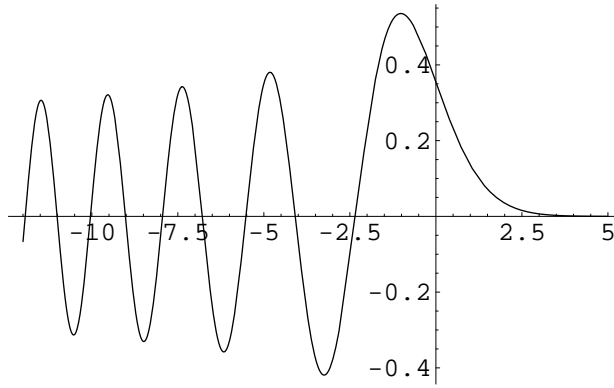


Figure 6: Função de Airy, $\text{Ai}(y)$.

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.

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.