

Lista de problemas 2: Física Quântica 2017.3

Função de onda, poço de potencial.

01. O que significa normalizar a função de onda? Explique em palavras.

02. Se uma exponencial real é uma função não oscilatória, porque a exponencial complexa é uma função oscilatória?

03. Um elétron está confinado em um poço de potencial finito com largura de $1,0 \times 10^{-9}\text{m}$ e altura (do potencial) de 2,0 eV. Existe um estado ligado correspondente a $n = 3$ para este caso? Justifique a sua resposta.

04. Um elétron está confinado na região entre $x = 0$ e $x = L$, onde pode se mover livremente. Fora dessa região o potencial é infinito. a) Determine a função de onda normalizada do estado fundamental para este elétron em todo espaço. b) Qual a probabilidade de encontrar o elétron na região entre 0 e $L/3$, quando este está no primeiro estado excitado? **Resposta:** 0,402

05. Considere um elétron aprisionado em um poço de potencial unidimensional infinito com largura de $L = 300$ pm. Qual é a probabilidade para que se possa detectar o elétron no primeiro estado excitado na região entre $x = 0,5L$ e $x = 0,75L$. **Resposta:** 0,25

06. Considere uma partícula de massa m confinada no intervalo $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ onde o potencial é nulo. Para $x \leq -\frac{a}{2}$ e $x \geq \frac{a}{2}$ o potencial é infinito. a) Resolva a equação de Schrödinger para esse sistema e mostre que as funções de onda resultantes são de dois tipos: as funções de onda pares, $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$, e as funções de onda ímpares $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$. b) Mostre que essas funções de onda são equivalentes às obtidas para o caso em que a partícula está confinada no intervalo $0 < x' < a$ (dica: observe que as as funções de onda do item anterior podem ser obtidas deste último deslocando a origem, $x' = x + \frac{a}{2}$). **Resposta:** a) $\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ para n par, e $\sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ para n ímpar.

Função de onda, equação de Schrödinger, valores médios.

07. Se $\psi_1(x, t)$, $\psi_2(x, t)$ e $\psi_3(x, t)$ são soluções da equação de Schrödinger para um potencial $V(x, t)$, mostre que uma combinação linear arbitrária de $\psi_1(x, t)$, $\psi_2(x, t)$ e $\psi_3(x, t)$ também é solução.

08. Uma partícula de massa m encontra-se no estado

$$\Psi(x, t) = Ae^{-a[(mx^2/\hbar)+it]},$$

em que A e a são constantes positivas e reais. a) Normalize $\Psi(x, t)$.

b) Encontre a função energia potencial $V(x)$ para a qual $\Psi(x, t)$ é solução da equação de Schrödinger.

c) Calcule os valores médios de x , x^2 , p e p^2 .

d) Calcule o desvio-padrão σ_x e o σ_p . O produto destas quantidades é compatível com o princípio de incerteza?

Resposta: a) $A = \left(\frac{2am}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$; b) $V(x) = 2ma^2x^2$; c) $\langle x \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{4am}$, $\langle p \rangle = 0$, $\langle p^2 \rangle = am\hbar$; d) $\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}$, $\sigma_p = \sqrt{am\hbar}$, $\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2}$ (compatível com o princípio de incerteza).

9. Em uma região do espaço, uma partícula possui uma função de onda dada por $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2L^2}}$ e energia $E = \hbar^2/2mL^2$, onde L é um comprimento.

a) Determine a energia potencial em função de x .

b) Qual tipo de potencial clássico tem essa forma?

c) Mostre que $x = L$ é o ponto de retorno clássico.

d) Seja $V(x) = mw^2x^2/2$ a energia potencial de um oscilador harmônico unidimensional, onde w é a frequência angular. Compare $V(x)$ com o resultado obtido no item a e mostre que a energia total do estado com a função de onda $\psi(x)$ acima pode ser escrita na forma $E = \hbar w/2$.

e) Obtenha o valor médio, $\langle x \rangle$, da posição da partícula.

Respostas: a) $V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{x^2}{L^4}$; c) $K = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right)$

10. Considerando que $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ representam o valor médio de x e o valor médio de x^2 num dado estado ψ , calcule $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ e $\sigma_x\sigma_p$ para o estado fundamental do poço quadrado infinito. O resultado

do produto $\sigma_x \sigma_p$ é consistente com o princípio de incerteza? Explique. **Respostas:** $\sigma_x = \sqrt{-\frac{L^2}{2\pi^2} + \frac{L^2}{12}}$; $\sigma_p = \frac{h}{2L}$;
 $\sigma_x \sigma_p = \sqrt{-\frac{1}{2\pi^2} + \frac{1}{12}} \frac{h}{2}$

11. A partir da equação de Schrödinger mostre que o valor médio da energia cinética de uma partícula é dado por

$$\langle E_{cin.} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \right] dx$$

a) Para o seguinte estado estacionário de uma partícula com energia E

$$\psi_E(x, t) = \left[C_+ e^{i\frac{px}{\hbar}} + C_- e^{-i\frac{px}{\hbar}} \right] e^{-i\frac{Et}{\hbar}},$$

sendo C_{\pm} constantes, determine a densidade de probabilidade, $\rho_E = |\psi_E|^2$, e a corrente de densidade de probabilidade $j_E = -i\frac{\hbar}{2m} (\psi_E^* \frac{d}{dx} \psi_E - \psi_E \frac{d}{dx} \psi_E^*)$. Verifique que $\frac{\partial \rho_E}{\partial t} + \frac{\partial j_E}{\partial x} = 0$.

12. A energia de um oscilador harmônico linear é $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, em que m é a massa da partícula em movimento harmônico simples e ω é a frequência de oscilação.

a) Mostre, usando a relação de incerteza $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ (valor mínimo do produto $\Delta x \Delta p$), que a energia média pode ser escrita como

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{32\pi^2 m \langle x^2 \rangle} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle;$$

b) mostre então que a energia mínima do oscilador é $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Esta é a chamada energia de ponto zero do oscilador harmônico linear. (Dica: minimize E em relação ao comprimento $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle$. Observe que a energia mínima no caso clássico seria zero.)

13. Mostre que, no caso estacionário, i.e., quando $\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$, 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.

14. Mostre, diretamente a partir da equação de Schrödinger independente do tempo, que $\langle p^2 \rangle = \langle 2m[E - V(x)] \rangle$ para qualquer potencial $V(x)$, e que $\langle p^2 \rangle = \langle 2mE \rangle$ para o poço quadrado infinito. Use este resultado para calcular $\langle p^2 \rangle$ para o estado fundamental, $n = 1$, e para o primeiro estado excitado, $n = 2$, do poço quadrado infinito.

Respostas: $\langle p^2 \rangle_{n=1} = \frac{\hbar^2}{4L^2}$; $\langle p^2 \rangle_{n=2} = \frac{\hbar^2}{L^2}$;

15. Considerando que $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ representam o valor médio de x e o valor médio de x^2 num dado estado ψ , calcule $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ e $\sigma_x \sigma_p$ para o estado fundamental do poço quadrado infinito. O resultado do produto $\sigma_x \sigma_p$ é consistente com o princípio de incerteza? Explique. **Respostas:** $\sigma_x = \sqrt{-\frac{L^2}{2\pi^2} + \frac{L^2}{12}}$; $\sigma_p = \frac{h}{2L}$;

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{-\frac{1}{2\pi^2} + \frac{1}{12}} \frac{h}{2}$$

16. No tempo $t = 0$ uma partícula é representada pela função de onda

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A \frac{x}{a} & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ A \frac{b-x}{b-a} & \text{se } a < x \leq b \\ 0 & \text{se } x < 0 \text{ ou } x > b, \end{cases}$$

a) Normalize $\Psi(x, 0)$, isto é, calcule o fator de normalização A como função de a e b .

b) Faça um esboço do gráfico de $\Psi(x, 0)$.

c) Qual a probabilidade de encontrar a partícula do lado esquerdo de a ?

d) Calcule o valor médio de x . **Respostas:** a) $A = \sqrt{\frac{3}{b}}$; c) $\frac{a}{b}$; d) $\frac{2a+b}{4}$.

17. Mostre que há soluções da equação de Schrodinger com um potencial que não depende do tempo que podem ser escritas como: $\psi(x, t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar}$, onde $\phi(x)$ é solução da equação de Schrodinger independente do tempo.

(Dica: Use separação de variáveis)

Barreiras de potencial.

18. Discuta qualitativamente os fenômenos de reflexão e transmissão de ondas na barreira de potencial e no potencial de poço quadrado.

19. (a) Uma partícula está sujeita a potencial degrau de altura menor do que a energia cinética da partícula. Faça o esboço do módulo quadrado da função de onda da partícula. (b) Repita o item anterior com o potencial de altura maior (c) Considere agora que a partícula está sujeita a um potencial na forma de barreira retangular, com altura maior do que a energia cinética da partícula. Faça o esboço do módulo quadrado da função de onda da partícula nessa situação. (dica: Tente chegar na fórmula geral de solução primeiro. O esboço deve qualitativamente mostrar todas as interferências de ondas!)

20. Considere o potencial degrau

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \leq 0 \text{ (região I)} \\ V_0 & \text{se } x > 0 \text{ (região II)}, \end{cases}$$

em que V_0 é uma constante positiva.

a) Sendo $E = V_0/2$ a energia de cada partícula num feixe lançado inicialmente de $x < 0$ e que se move em direção a $x >$, calcule o coeficiente de reflexão R . Nesse caso qual é o comportamento da função de onda de uma partícula na região onde $x > 0$? É possível observar partículas nesta região em algum momento?

b) Para $E = 2V_0$, calcule o coeficiente de reflexão R e o coeficiente de transmissão T . Mostre que $R + T = 1$.

c) No caso do item b) e considerando que o feixe contém aproximadamente um milhão de partículas, qual seria o número estimado de partículas refletidas? **Resposta:** a) $R = 1$. Na região onde $x > 0$ (região II), a função de onda cai exponencialmente, $\psi_{II}(x) \propto e^{-\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}x}$; b) $R = \frac{(2-\sqrt{2})^2}{(2+\sqrt{2})^2}$ e $T = \frac{8\sqrt{2}}{(2+\sqrt{2})^2}$; c) 30000

Considere agora que o degrau de potencial é definido por $V = 0$ para $x \leq 0$ e $V = -V_0$ para $x > 0$. Explique o que acontece com a velocidade da partícula nesse caso. Resolva as questões anteriores para esse caso. Compare com os resultados anteriores e explique.

21. Um feixe de elétrons de 1 eV incide sobre uma barreira retangular de 4 eV de altura e 10 \AA de espessura.

a) determine as probabilidades de transmissão e de reflexão para os elétrons no feixe.

b) se os elétrons tivessem energia de 3,5 eV quais seriam os valores dessas probabilidades? **Respostas:** (a) $T = 5,88 \times 10^{-8}$; (b) $T = 1,25 \times 10^{-3}$

22. Mostre que o coeficiente de transmissão é nulo para o caso de partículas incidentes em um degrau potencial de altura $V_0 > E$, onde E é a energia cinética inicial das partículas.

23. Em um dispositivo semiconductor, uma camada de óxido forma uma barreira com 0.5 nm de largura e 10 V de altura entre os dois fios condutores. Elétrons chegam a barreira depois de serem acelerados por uma tensão de 5 V, partindo aproximadamente do repouso.

a) Qual fração dos elétrons incidentes consegue atravessar a barreira por tunelamento?

b) Qual deve ser a tensão de aceleração para que a fração dos elétrons incidentes que consegue atravessar a barreira por tunelamento seja o dobro do valor encontrado no item a)? **Respostas:** (a) $T = 4,2 \times 10^{-5}$; (b) 3,6 Volts

24. Um feixe de prótons com energia cinética média de 50 MeV incide sobre um degrau de potencial de 30 MeV. (a) Qual a fração do feixe que é refletida? (b) Qual a fração do feixe que é transmitida? (c) Como se modificam os resultados encontrados em (a) e (b), se a energia dos prótons for de 20 MeV? **Respostas:** (a) $\left(\frac{1-\sqrt{\frac{2}{5}}}{1+\sqrt{\frac{2}{5}}}\right)^2$; (b) $1 - \left(\frac{1-\sqrt{\frac{2}{5}}}{1+\sqrt{\frac{2}{5}}}\right)^2$

25.(Desafio) Considere um potencial degrau "negativo", isto é, $V(x) = 0$ para $x \leq 0$ e $V(x) = -V_0$ para $x > 0$, sendo $V_0 > 0$. Encontre o valor limite dos coeficientes de reflexão e transmissão, quando a energia cinética se aproxima do valor nulo ($E_k \approx 0$). Discuta o resultado obtido e compare com o que é esperado para o comportamento clássico da partícula.

Sistema bidimensional, átomo de hidrogênio.

26. O que é degenerescência? Dê um exemplo.

27. Qual é a relação entre o tamanho de um átomo de Bohr e um átomo de Schrodinger?

28. Considere uma partícula movendo-se em um espaço bidimensional definido por $V = 0$ para $0 < x < L$, $0 < y < L$ e $V = \infty$ para quaisquer outros valores de x e y .

a) Determine os autoestados da partícula neste poço de potencial.

b) Determine o espectro de energia da partícula.

c) Quais são os conjuntos de números quânticos do estado degenerado de menor energia? **Respostas:** (a) $\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{L} y\right)$; (b) $E_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2)$; (c) $(n_1, n_2) \equiv \{(1, 2), (2, 1)\}$

29. Para o átomo de hidrogênio no estado fundamental determine:

a) a probabilidade de encontrar o elétron em um intervalo $\Delta r = 0.02a_0$ com centro em $r = a_0$; b) a probabilidade de encontrar o elétron em um intervalo $\Delta r = 0.02a_0$ com centro em $r = 2a_0$; c) o valor médio da distância elétron-núcleo em termos de a_0 . **Respostas:** (a) 0,0107; (b) 0,0059; (c) $\langle r \rangle = \frac{3}{2}a_0$.

30. Considere as autofunções da equação de Schrödinger para o elétron no átomo tipo hidrogênio $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ e os autovalores, E_n , de energia levando em conta apenas o potencial de Coulomb.

a) Quantos orbitais existem para a energia E_2 ($n = 2$)? Justifique.

b) Explique com base nos números quânticos a que estados físicos do elétron correspondem essas diferentes orbitais?

c) Para o orbital em que a função radial é

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^3} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}},$$

determine o raio mais provável do átomo, isto é, a distância mais provável entre o elétron e o núcleo. Dado: $p_{nl} = R_{nl}^2 r^2$.

d) Considerando agora o spin do elétron, quantos estados diferentes devem existir para o elétron quando $n = 2$? Justifique sua resposta. **Respostas:** a) quatro orbitais; c) $4a_0$; d) oito estados

31. (Desafio) Usando o método de separação de variáveis, mostre que existem soluções para a equação de Schrödinger tri-dimensional, sujeita a um potencial independente do tempo, que podem ser escritas da seguinte maneira

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-iEt/\hbar},$$

onde $\psi(x, y, z)$ é solução para a equação de Schrödinger independente do tempo.