Lista de problemas 2: Física Quântica 2019.3

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 $1,0 \times 10^{-9}$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 $x = 0,5\,L$ e $x = 0,75\,L$. **Resposta**: 0,25

06. para ver se funciona 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 seer 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

$$\Psi(x,t) = A\mathrm{e}^{-a\left[\left(m\,x^2/\hbar\right)+it\right]},$$

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 $\psi(x) = A\,e^{-\frac{x^2}{2L^2}}$ 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 $V(x) = m\,w^2x^2/2$ 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, $\rho_E = \mid\psi_E\mid^2$, e a corrente de de densidade de probabilidade $j_E = -i\frac{\hbar}{2m}\left(\psi_E^\star\frac{d}{dx}\psi_E - \psi_E\frac{d}{dx}\psi_E^\star\right)$. Verifique que $\frac{\partial\rho_E}{\partial t} + \frac{\partial j_E}{\partial x} = 0$.

12. A energia de um oscilador harmônico linear é $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, 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

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

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 $\langle p^2 \rangle = \langle 2m\left[E - V(x)\right] \rangle$ 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:** $\langle p^2 \rangle_{n=1} = \frac{h^2}{4L^2}$; $\langle p^2 \rangle_{n=2} = \frac{h^2}{L^2}$;

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

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

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 esta sujeita a potencial degrau de altura menor do que a energia cinética da partícula. Faça o esboço do modulo quadrado da função de onda da partícula. (b) Repita o item anterior com o potencial de altura maior (c) Considere agora que a partícula esta sujeita a um potencial na forma de barreira retangular, com altura maior do que a energia cinética da partícula. Faça o esboço do modulo 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

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

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, $\psi_{\text{II}}(x) \propto e^{-\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}x}$; 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 $\overset{o}{A}$ 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 semicondutor, 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) $\psi_{n1,n2}(x,y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{n_1\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_2\pi}{L}y\right)$; (b) $E_{n1,n2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_1^2+n_2^2\right)$; (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

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

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. 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.