Lista de exercícios 4.

1. Uma partícula de massa m está confinada a um poço de potencial no qual a parede localizada em $x \geq L$ tem altura infinita (energia potencial $V \rightarrow \infty$) e aquela em $x \leq 0$ tem altura V_0 , conforme a figura:

- Escreva a equação de Schrödinger independente do tempo para essa partícula, considerando que $\psi(x)$ é a sua função de onda e E a sua energia.
 - Considere agora que a partícula possui energia total $0 < E < V_0$. Escreva as soluções $\psi(x)$ nas três regiões I, II, e III representadas na figura.
 - Escreva as equações das condições de contorno para $\psi(x)$ em $x=0$ e $x=L$ que permitem a obtenção das constantes presentes nas soluções $\psi(x)$ em cada uma das regiões da figura.
2. Considere uma partícula passando sobre uma barreira de potencial retangular. Escreva as soluções gerais, que dão a forma de ψ nas diferentes regiões do potencial.
- Encontre então quatro relações entre as cinco constantes arbitrárias ajustando ψ e $d\psi/dx$ nos limites entre essas regiões.
 - Use estas relações para calcular o coeficiente de transmissão T , verificando assim
$$T = \left[1 + \frac{\sin^2\left(\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\left(\frac{E}{V_0}-1\right)}\right)}{4\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0}-1\right)} \right]^{-1} .$$
3. Use a autofunção do poço de potencial quadrado infinito com $n=3$, para calcular os seguintes valores esperados, e faça um comentário sobre cada resultado:
- $\bar{x}$.
 - $\bar{p}$
 - $\overline{x^2}$
 - $\overline{p^2}$
4. Uma partícula de massa m executa oscilações harmônicas, em uma dimensão, num potencial $U(x) = m\omega^2 x^2/2$.

- a. A partir de a equação de Schrödinger. Determine os autovalores comparando com a equação diferencial dos polinômios de Hermite. (Dica: defina as novas variáveis: $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $\xi = \alpha x$, $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$).

$$\text{Polinômios de Hermite } (H_n): \frac{d^2 H_n}{dx^2} - 2x \frac{dH_n}{dx} + 2nH_n = 0$$

- b. Se a constante da força restauradora C para as vibrações interatômicas de uma molécula diatômica típica é de aproximadamente 10^3 J/m^2 . Use esse valor para fazer uma estimativa da energia de ponto zero das vibrações moleculares. A massa da molécula é $4.1 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$.

5. Conhecendo que a autofunção correspondente ao estado fundamental do elétron no átomo de Hidrogênio de acordo com a equação Schrödinger:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1/a_0\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

Onde a_0 é o raio da órbita do elétron no nível básico segundo o modelo de Bohr, mostre:

- a. Que o raio mais provável para o elétron segundo a equação de Schrödinger coincide com a_0 .
- b. Mostre que o valor médio da energia do elétron coincide com o valor obtido pela teoria de Bohr.