Mecânica Quântica — 7600022

Primeira Lista — teste no dia 22/8/2017

1. Um elétron se move no potencial
$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 & (x > 0), \end{cases},$$
onde V_0 é uma energia positiva. Encontre a autofunção do elétron para uma energia E no intervalo $0 < E < V_0$.

2. Um poço de potencial é definido pela igualdade
$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < \frac{a}{2}) \\ V_0 & (|x| > \frac{a}{2}) \end{cases},$$
onde V_0 é uma energia positiva. Encontre a equação que determina a energia do estado fundamental.

3. Para o problema anterior, desenhe qualitativamente a função de onda do autoestado fundamental. Justifique seu desenho.

4. Considere agora o potencial
$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ 0 & (0 < x < \frac{a}{2}) \\ V_0 & (x > \frac{a}{2}) \end{cases},$$
Mostre que a energia do estado fundamental é idêntica à energia do primeiro autoestado com função de onda ímpar no potencial do problema 1. *Dica: mostre que os dois estados obedecem à mesma equação de Schrödinger independente do tempo e às mesmas condições de contorno.*

5. A função de onda de um elétron preso em um poço infinito que se estende de $x = -a/2$ a $x = a/2$ é dada pela expressão
$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} - \phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}\right),$$
onde
$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2} \\ E_2 &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2}{a^2} \\ \phi_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\cos(\frac{\pi x}{a}) \\ \phi_2(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\operatorname{sen}(\frac{2\pi x}{a}). \end{aligned}$$
Calcule a probabilidade de encontrar o elétron num pequeno segmento de largura $\Delta x \ll a$ em torno do ponto $x = a/4$, em função do tempo.

6. Para a função de onda do problema anterior, calcule a probabilidade de encontrar o elétron entre $x = 0$ e $x = a/2$ em função do tempo.

7. Calcule a corrente de probabilidade $J(x,t) = (\hbar/m)\Im[\psi^*(x,t)\partial\psi(x,t)/\partial x]$ no ponto $x = 0$, em função de tempo, para a função de onda do problema 5.

8. Seja $P_{ab}(t)$ a probabilidade de se encontrar uma partícula no intervalo $(a < x < b)$ no instante t. Mostre que

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = J(a,t) - J(b,t).$$

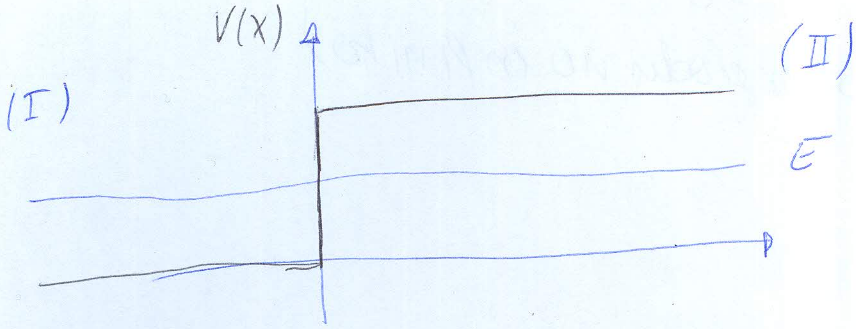
9. Dadas duas autofunções distintas $\phi_n(x)$ e $\phi_{n'}(x)$ do poço infinito com largura a centrado em $x = 0$, mostre que a integral

$$\int_{-a/2}^{a/2} \phi_n^*(x)\phi_{n'}(x)\,\mathrm{d}x$$

é nula.

10. Um poço infinito tem largura $a = 1\text{Å}$. Encontre a diferença entre as energias de um elétron no primeiro estado excitado e no estado fundamental, em eV. Qual a frequência da luz emitida se o elétron decair do primeiro estado excitado para o fundamental?

1)



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

para $x<0$ (região I):

$V(x)=0$

$$\Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I(x)+\frac{d^2}{dx^2}\psi_I(x)=0$$

$$\psi_I(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \qquad (I)$$

onde $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ (II) (e $k>0$ por conveniência)

para $x>0$ (região II):

$V(x)=V_0$

$$\Rightarrow -\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}+\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=0$$

$$\rightarrow \psi_{II}(x)=Ce^{qx}+De^{-qx} \qquad (III)$$

onde $q^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)$ (IV)

Condições de contorno:

i) ψ deve ser finito

$\Rightarrow C = 0$ (para ψ não explodir no infinito)

ii) ψ é contínuo:

$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$

$\rightarrow A + B = D$

iii) $d\psi/dx$ é contínuo:

$\psi_I'(x) = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$

$\psi_{II}'(x) = -qDe^{-qx} = -q(A+B)e^{-qx}$

e $\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)$

$\rightarrow ikA - ikB = -qA - qB$

$A(ik+q) = B(ik-q)$

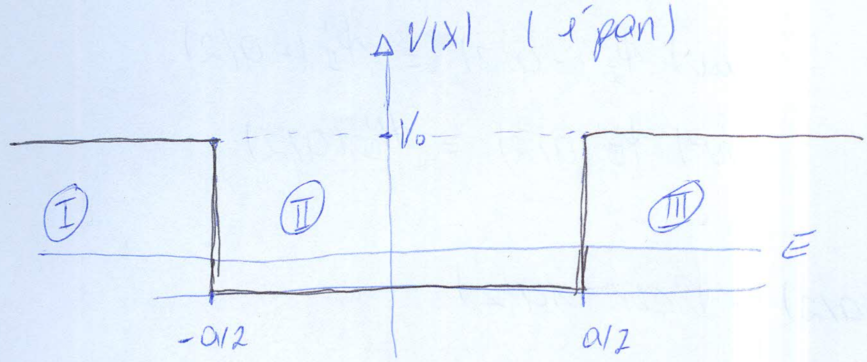
$B = \left(\dfrac{ik+q}{ik-q}\right)A$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{ikx} + A\left(\frac{ik+q}{ik-q}\right)e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= A\left(1 + \frac{ik+q}{ik-q}\right)e^{-qx} = A\left(\frac{2ik}{ik-q}\right)e^{-qx} \end{aligned}}$$

com k e q dado pelas equações II e IV

para determinar A precisaríamos usar a condição de normalização, mas note que ψ não é normalizável!

2)



$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

região II $\quad (|x| < a/2)$

$V(x) = 0$

$\rightarrow \psi_{II}(x) = C\cos(kx) + D\,\text{sen}(kx)$

onde $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

região I $\quad (x < -a/2)$:

$V(x) = V_0$

$$\psi_I''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\,\psi_I(x) = 0$$

$\rightarrow \psi_I(x) = A e^{qx} + \cancel{B}^{\,0} e^{-qx}$ $\quad$ ($B = 0$ para ψ_I não explodir quando $x \rightarrow -\infty$)

analogamente,

região III $\quad (x > a/2)$:

$\psi_{III}(x) = \cancel{E}^{\,0} e^{qx} + F e^{-qx}$

onde $q^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$

Como $V(x)$ é par, então $\psi(x)$ tem soluções ímpares e soluções pares. Assim, podemos determinar tais soluções separadamente.

Condições de Contorno para ψ ímpar (continuidade de ψ e ψ').

i) $-\psi_I(-x) = \psi_{III}(+x)$
ii) $\psi_{II}(a/2) = \psi_{III}(a/2)$
iii) $\psi'_{II}(a/2) = \psi'_{III}(a/2)$
iv) $\psi_{II}(x) = D\,sen(kx)$

as condições (i) e (iv) são impostas devido ψ ser ímpar

de (ii) (e iv): $D\,sen(ka/2) = Fe^{-qa/2}$

$$\psi'_{II}(x) = kD\cos(kx)$$
$$\psi'_{III}(x) = -qFe^{-qx}$$

de (iv): $kD\cos(ka/2) = -qFe^{-qa/2} = -qD\,sen(ka/2)$

$$\Rightarrow \boxed{tg(ka/2) = -\frac{k}{q}} \quad (I)$$

onde $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ e $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$ (II)

Substituindo (II) em (I), teremos uma equação transcendental cujas soluções são as autoenergias associadas à ψ ímpar.

Condições de Contorno para ψ par (continuidade de ψ e ψ'):

i*) $+\psi_I(-x) = \psi_{III}(+x)$
ii*) $\psi_{II}(a/2) = \psi_{III}(a/2)$
iii*) $\psi'_{II}(a/2) = \psi'_{III}(a/2)$
iv*) $\psi_{II}(x) = C\cos(kx)$

as condições (i*) e (iv*) são impostas devido ψ ser par

(compare com (i) e (iv) no caso ψ ímpar).

de (ii*): $C\cos(ka/2) = F e^{-qa/2}$
(e iv*)

$\psi_{II}'(x) = -k C \sin(kx)$

$\psi_{III}'(x) = -qFe^{-qx}$

de (iii*): $-kC\sin(ka/2) = -qFe^{-qa/2} = -q\,C\cos(ka/2)$

$$\Rightarrow \boxed{tg(ka/2) = \frac{q}{k}} \qquad (III)$$

Substituindo (II) em (III), teremos uma equação transcendental cujas soluções são as autoenergias associadas à ψ par.

3) $V(x)$ par $\rightarrow$ ψ ímpar e ψ par

Solução para ψ ímpar

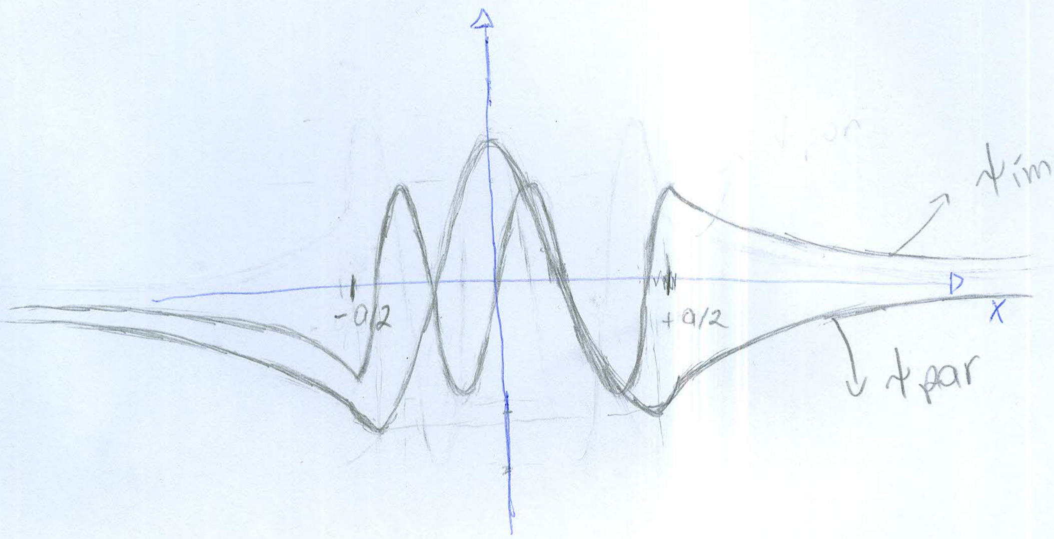
$-\psi_{I}(-x) = \psi_{III}(x) = Fe^{-qx}$

$\psi_{II}(x) = D\,sen(kx)$

Solução para ψ par

$+\psi_{I}(-x) = \psi_{III}(x) = F'e^{-qx}$

$\psi_{II}(x) = C\,cos(kx)$

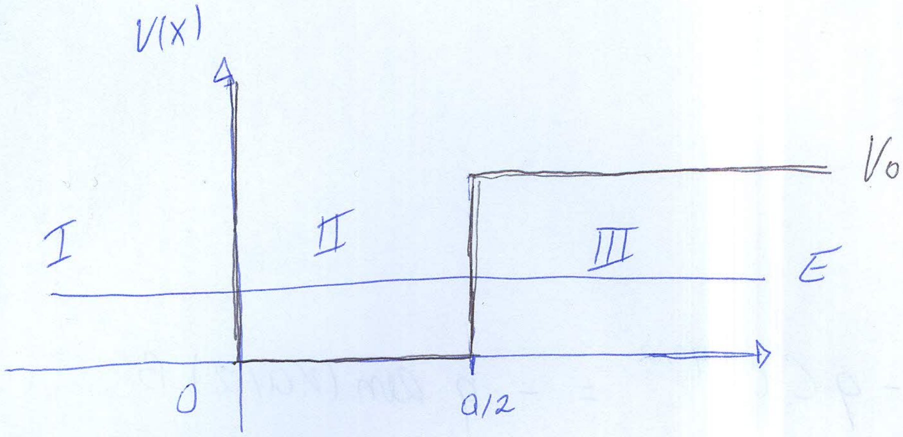


Se a solução da energia no estado fundamental estiver associada a solução de ψ par ou ψ ímpar, então o gráfico qualitativo de ψ no estado fundamental será da forma de ψ par ou ψ ímpar esboçado acima.

Se usarmos a analogia para o poço infinito ($V_0 \rightarrow \infty$), então a energia do estado fundamental será descrita por uma função par (veja por exemplo o exercício 5, $\phi_1(x) \sim cos(\pi x/a)$), assim se espera que pelo menos para V_0 suficientemente grande, $\psi_0 \sim cos(\pi x/a)$, portanto, o estado fundamental será descrito pela autofunção par esboçada no gráfico acima. E além disso, como E_0 estará associado a ψ par e E_1 (energia do primeiro estado excitado) estará associado a ψ ímpar, então se espera que seja mais provável encontrar a partícula no estado fundamental, por isso usei uma amplitude maior para o termo $\sim cos(kx)$, isto é, $|C| > |D|$.

E também usei $k^{(par)} < k^{(ímpar)}$ (analogia do caso $V_0 \rightarrow \infty$).

4)



região 1 ($x<0$):

$\psi_I(x) = 0$

região 2 ($0<x<a/2$):

solução de partícula livre

$\psi_{II}(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$

região 3 ($x>a/2$) : (mesma solução que o problema 2)

$\psi_{III}(x) = C e^{-qx}$

e $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) = q^2$

Condições de contorno:

i) $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$

ii) $\psi_{II}(a/2) = \psi_{III}(a/2)$

iii) $\psi'_{II}(a/2) = \psi'_{III}(a/2)$

de i) $A = 0$

de ii) $B\sin(ka/2) = C e^{-qa/2}$

$C = e^{qa/2}\sin(ka/2)B$

de iii)

$\psi'_{II}(x) = KB\cos(Kx)$

$\psi'_{III}(x) = -qCe^{-qx}$

$\rightarrow KB\cos(Ka/2) = -qCe^{-qa/2} = -q\,\mathrm{sen}(Ka/2)B$

$\rightarrow tg(Ka/2) = -\frac{K}{q}$

no problema 2 (solução impar)

$-\psi_I(-x) = \psi_{III}(x) = Ce^{-qx}$

$\psi_{II}(x) = B\,\mathrm{sen}(Kx)$

Condições de contorno:

i) $\psi_{II}(a/2) = \psi_{III}(a/2)$

$\psi'_{II}(a/2) = \psi'_{III}(a/2)$

note que quando usamos a condição de contorno (i) no problema 4, obtemos ψ_{II} e ψ_{III} que possuem a mesma forma que a do problema 2. E são usadas as mesmas condições de contorno para ψ_{II} e ψ_{III} em ambos os problemas 2 e 4, logo devemos concluir que a solução para as energias para ψ impar do problema 2 e para as energias no problema 4 são as mesmas:

$tg(Ka/2) = -\frac{K}{q}$

o espectro de energia são os mesmos, logo, a energia do estado fundamental também.

5) A probabilidade é

$$\int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} |\Psi(x',t)|^2 dx' \qquad (1)$$

de encontrarmos o elétron entre $x - \Delta x/2$ e $x + \Delta x/2$ no tempo t. Então considerei a equação (1) com $x = a/4$ a probabilidade que precisamos encontrar.

Além disso,

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\left[\phi_1^2(x) - \phi_1(x)\phi_2(x)\left[\overbrace{e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}}^{2\cos([E_2-E_1]t/\hbar)}\right] + \phi_2^2(x)\right] \qquad (2)$$

Como $\Delta x << a$, então $\phi_1(x)$ e $\phi_2(x)$ praticamente não varia no intervalo de integração, assim

$$\int_{\cancel{x}-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} dx' \phi_1^2(x') \cong \phi_1^2(x)\Delta x \qquad (3)$$

$$\int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} dx' \phi_1(x')\phi_2(x') \cong \phi_1(x)\phi_2(x)\Delta x \qquad (4)$$

e $$\int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} dx' \phi_2^2(x') \cong \phi_2^2(x)\Delta x \qquad (5)$$

de (1, 2, 3, 4 e 5), segue que

$$\int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} |\Psi(x',t)|^2 dx' \cong \frac{\Delta x}{2}\left[\phi_1^2(x) - 2\phi_1(x)\phi_2(x)\cos\left(\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\right) + \phi_2^2(x)\right]$$

$$= \frac{\Delta x}{a}\left\{\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) - 2\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{3\hbar\pi^2 t}{2ma^2}\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right\} \qquad (6)$$

substituindo $x = a/4$ em (6), obtemos

$$P(x=a/4, \Delta x; t) = \frac{\Delta x}{a}\left\{\frac{1}{2} - 2\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}\cos\left(\frac{3\hbar\pi^2 t}{2ma^2}\right) + 1\right\}$$

$$= \boxed{\frac{\Delta x}{a}\left\{\frac{3}{2} - \sqrt{2}\cos\left(\frac{3\hbar\pi^2 t}{2ma^2}\right)\right\}}$$

b) Agora $\Delta x = a/2$ que não é mais muito menor que a, portanto, não podemos mais usar a aproximação na integral,

$$P([0,a/2];t) = \int_0^{a/2} |\psi(x,t)|^2 dx$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^{a/2} dx\, \phi_1^2(x) - \cos\left(\frac{3\hbar\pi^2 t}{2ma^2}\right)\int_0^{a/2} dx\, \phi_1(x)\,\phi_2(x) +$$

$$+ \frac{1}{2}\int_0^{a/2} dx\, \phi_2^2(x)$$

$$= \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}\right) - \cos\left(\frac{3\hbar\pi^2 t}{2ma^2}\right)\left(\frac{4}{3\pi}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$= \boxed{\frac{1}{2} - \frac{4}{3\pi}\cos\left(\frac{3\hbar\pi^2 t}{2ma^2}\right)}$$

(usei a força bruta para calcular as integrais ;))

7) $J(x,t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left\{ \psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \right\}$ (1)

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} - \phi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \right) \quad ; \quad \phi_i \in \mathbb{R}$$

$$\psi^*(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x) e^{+iE_1 t/\hbar} - \phi_2(x) e^{+iE_2 t/\hbar} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1'(x) e^{-iE_1 t/\hbar} - \phi_2'(x) e^{-iE_2 t/\hbar} \right) \quad (3)$$

onde $\phi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ e $\phi_1'(x) = -\frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$

$\phi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ e $\phi_2'(x) = \frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ (4)

de (1, 2, 3 e 4):

$$J(x,t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left\{ \frac{1}{2} \left(\phi_1(x) e^{iE_1 t/\hbar} - \phi_2 e^{iE_2 t/\hbar} \right)\left(\phi_1' e^{-iE_1 t/\hbar} - \phi_2' e^{-iE_2 t/\hbar} \right) \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2m} \operatorname{Im}\left\{ \phi_1(x)\phi_1'(x) - \phi_1(x)\phi_2'(x) e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} + \right.$$

$$\left. - \phi_1'(x)\phi_2(x) e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + \phi_2 \phi_2' \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2m} \left\{ \phi_1(x)\phi_2'(x) - \phi_1'(x)\phi_2(x) \right\} \sin\left(\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{2m}\left\{ \frac{4\pi}{a^2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{2\pi}{a^2}\, \mathrm{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) \mathrm{sen}\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right\} *$$

$$* \ \mathrm{sen}\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)$$

$$\boxed{J(x,t) = \frac{\pi \hbar}{m a^2}\left\{ 2\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \mathrm{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) \mathrm{sen}\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right\} \mathrm{sen}\left(\frac{3}{2}\frac{\hbar \pi^2}{m a^2} t\right)}$$

8) Equação da continuidade em 1D:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{d}{dx}J(x,t) = 0$$

$$\Rightarrow \int_a^b dx\left(\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{d}{dx}J(x,t)\right) = 0$$

$$= \frac{d}{dt}\int_a^b dx\,\rho(x,t) + [J(b,t) - J(a,t)]$$

$$= \frac{d}{dt}P_{ab}(t) + [J(b,t) - J(a,t)] = 0$$

$$\therefore \frac{d}{dt}P_{ab}(t) = J(a,t) - J(b,t)$$

a) $\phi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x)$

onde ϕ_n são os autoestados do problema. Naturalmente, os autoestados de qualquer problema formam uma base ortonormal, logo, seus produto interno devem satisfazer a relação:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n^*(x)\, \phi_{n'}(x)\, dx = \delta_{nn'} = \begin{cases} 1, & \text{se } n = n' \\ 0, & \text{se } n \neq n' \end{cases}$$

No nosso problema, $V(x)$ é par, portanto, $\phi(x)$ tem soluções pares e soluções ímpares:

$$\phi_n^{(par)} = A_n^{(par)} \cos(K_n^{(par)} x) \quad ; \quad \cos(K_n^{(par)}(\pm a/2)) = 0$$

$$\Rightarrow \pm K_n^{(par)} a/2 = \pm \frac{1}{2}\pi, \pm \frac{3}{2}\pi, \ldots$$

$$K_n^{(par)} = \frac{(2n+1)\pi}{a} \quad , \quad n = 0, 1, \ldots$$

e $\phi_n^{(impar)} = A_n^{(impar)} \, \text{sen}(K_n^{(impar)} x)$; $\text{sen}(K_n^{(impar)}(\pm a/2)) = 0$

$$\Rightarrow \pm K_n^{(impar)} a/2 = \underbrace{\cancel{0}}_{\phi_n = 0}, \pm \pi, \pm 2\pi, \ldots$$

$$\Rightarrow K_n^{(impar)} = \frac{2n\pi}{a} \quad , \quad n = 1, 2, \ldots$$

e os A_n podem ser obtidos pela condição de normalização.

Temos que $\displaystyle\int_{-a/2}^{+a/2} \text{sen}(K_n^{(impar)} x) \cos(K_{n'}^{(par)} x)\, dx = 0 \quad \forall n, n'$

$$\int_{-a/2}^{+a/2} \operatorname{sen}(K_n^{(IMPAR)} x)\operatorname{sen}(K_{n'}^{(IMPAR)} x)\,dx = 0 \quad \text{se} \quad n \neq n'$$

$$\text{e} \int_{-a/2}^{+a/2} \cos(K_n^{(PAR)} x)\cos(K_{n'}^{(PAR)} x)\,dx = 0 \quad \text{se} \quad n \neq n'$$

$$\therefore \int dx\, \phi_n(x)\, \phi_{n'}^{*}(x) = \int dx\, \phi_n(x)\, \phi_{n'}(x) = 0 \quad \text{se} \quad n \neq n'$$

com os autoestados como escrevemos.

10) Por comodidade, irei preferir centrar o poço em $X = a/2$.

$$\begin{cases} \psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) & ; \quad 0 \leq x < a \\ \psi(x) = 0 & ; \quad \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$\psi(0) = A = 0$$

$$\psi(a) = B\sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi$$

$$\Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a} \quad , \quad n = 1, 2, \ldots$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$ (lembre-se, para partícula livre $p = \hbar k$; $E = p^2/2m$).

$E_1 \equiv$ energia do estado fundamental

$E_2 \equiv$ energia do primeiro estado excitado

$$\Rightarrow \Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}(2^2 - 1^2) = \boxed{\frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}}$$

partícula sendo um elétron e $a = 1\text{Å} = 1.10^{-10}$ m

$$\Delta E = 7{,}135 . 10^{-16} \text{ J} \cong \boxed{4{,}5 \text{ keV}}$$

e $\Delta E = \hbar \Delta \omega = 2\pi\hbar\Delta f \Rightarrow \Delta f = \frac{\Delta E}{2\pi\hbar} = \boxed{1{,}71 . 10^{17} \text{ Hz}}$

Participem da monitoria :)