Terceira Lista de Mecânica Quântica - 11/9/2023

Potenciais poço, degrau, barreira e delta

Você pode recorrer às notas de aula de Física Moderna

1. Uma partícula (massa m) está confinada no potencial ("caixa", ou "poço infinito") $V(x) = V_0$ para $-L/2 \leq x \leq L/2$ e $V(x) = \infty$ fora desse intervalo, sendo V_0 constante. Ache as energias permitidas e respectivas autofunções normalizadas.

   Como você já sabe, sendo o potencial par, já comece estabelecendo que as autofunções serão pares ou ímpares; isso economiza esforços matemáticos. Note como foram as condições de contorno que levaram à quantização da energia. Observe que a primeria derivada da função de onda não é contínua, caso específico de quando o potencial tem "pulo" infinito.

   Verifique, por cálculo direto, que as autofunções $\phi_n(x)$ são ortogonais. Tente mostrar, novamente por cálculo direto, que $\sum_n \phi_n(x)^* \phi_n(x') = \delta(x - x')$, chamada relação de completeza. Ela sempre é satisfeita para as autofunções de um operador Hamiltoniano. Sabe por que ela é importante (na verdade excencial)?

2. O potencial degrau é defindo por $V(x) = 0$ para $x < 0$ e $V_0 > 0$ para $x > 0$. Determine as autoenergias e autofunções, as correntes de probabilidades incidente, refletida e transmitida, bem como os coeficientes de reflexão e transmissão. Suponha um onda plana inicialmente vindo de $x = -\infty$ com amplitaude A e energia E. Temos três condições:

   - $E > V_0$: a solução geral terá ondas caminhando nas duas direções. Identifique isso após multiplicar a parte espacial das soluções por $e^{-i\omega t}$, sendo $\omega = E/\hbar$.
   - $0 \leq E < V_0$: para $x \geq 0$ a função de onda deve decair espacialmente (não há onda nessa região). Mostre que para $x \leq 0$ temos um padrão de onda estacionária, isto é, a parte espacial deixa de ser do tipo e^{ikx} e portanto não temos mais termos do tipo $e^{i(kx-\omega t)}$. Assim, não temos ondas caminhantes. Só essa informação já define os valores das correntes. Como? Cuidado com a nomenclatura: não confunda autofunção estacionária (solução da Eq. de Schr. independente do tempo) com o padrão de ondas estacionárias mencionado; se isso está confuso, peça ajuda!
   - $E = V_0$. Este caso (pouco relevante até onde sei) requer atenção ao propor a solução geral do problema.

   Nos três casos, como o "pulo" do potencial é finito, as derivadas da função de onda são contínuas.

   Este é um bom exemplo onde Mecânica Quântica é excencial, pois, o comprimento de onda de De Broglie (da ordem de $2\pi/k$) é muito maior que a variação espacial do potencial (que se dá numa largura zero, exatamente onde há o "pulo").

3. O "poço" de potencial finito é definido por $V(x) = -V_0 < 0$ para $|x| < L$ e zero fora desse intervalo. O caso interessante é quando $-V_0 < E < 0$, que resulta em estado ligado. Explore que o potencial é par e determine as autofunções dos setores pares e ímpares. Faça um diagrama ilustrando essas autofunções. A determinação das energias envolve equações trancedentais. O importante aqui é aprender que sempre existe pelo menos uma solução par mesmo que $V_0 a^2 \to 0$, ou seja, mesmo que o "poço" seja muito raso ou muito largo. Nesse limite pode não existir solução ímpar. Para $V_0 a^2 \to \infty$ verifique que recuperamos as energias do "poço" infinito.

4. Sem nenhuma conta adicional, e em não mais que 15 segundos, escreva qual é a expressão que as possíveis energias devem obedecer para o seguinte potencial: $V(x) = \infty$ para $x < 0$, $V(x) = -Vo < 0$ para $0 < x < L$ e $V(x) = 0$ para $x > L$. Sugestão: faça um diagrama do potencial e compare com o potencial do item anterior e pense um pouco sobre condições de contorno!

5. Uma barreira de potencial é modelada pela função $V(x) = V_0 > 0$ para $0 < x < L$ e zero fora desse intervalo. Uma partícula com energia E vem de $x \to -\infty$. Determine os coeficientes de reflexão e transmissão nos seguintes casos:

   - $0 < E < V_0$: mesmo não tendo energia para vencer a barreira (raciocínio clássico) a partícula pode ser detectada após a barreira. Isso se chama efeito túnel, importantíssimo em diodos, transistores, física nuclear, ... Não há análogo clássico para isso; é um efeito advindo exclusivamente da natureza ondulatório das partículas.
   - $E > V_0$: dá para aproveitar a solução do item anterior. Para qual combinação de parâmetros o coeficiente de transmissão vai à unidade? Ilustre graficamente as autofunções dentro da barreira para esse caso específico.

6. No caso acima em que $E < V_0$, tome o limite simultâneo $V_0 \to \infty$ e $a \to 0$, mas com $V_0 a \equiv \alpha$, sendo α constante positiva. Com isso, a "área" abaixo da barreira de potencial é preservada no processo de limite, e a barreira no limite se torna a função $\alpha\delta(x)$. Mostre, então, que nesse limite recuperamos o coeficiente de transmissão do potencial $V(x) = \alpha\delta(x)$.

7. Consulte as notas do Bruno, presentes no eDisciplinas, para o potencial duplo deltas negativas. O interessante aqui é o surgimento dos estados pares, em que há valores apreciáveis da função de onda entre as deltas, ou seja, grande chance de se achar a partícula nessa região. Isso lembra os orbitais ligantes de moléculas. Já os estados ímpares, onde há menor chance de se achar a partícula entre as deltas, lembra os estados antiligantes em moléculas.

8. Opcional (por enquanto): repita o primeiro exercício, mas no potencial bidimensional $V(x, y) = 0$ se $0 < x < L$ e $0 < y < L$, $V(x, y) = \infty$ fora. Use o conceito de separação de variáveis e assim a solução do primeiro exercício pode ser utilizada integralmente. Baseado na solução deste item, como você infere que sejam os autovalores para o correspondente tridimensional deste potencial?