F 689 - Turma A
Aula de exercícios nº1

UNICAMP, 7 de agosto de 2017

Questão 1 - Considere uma partícula de massa m e energia E sujeita aos potenciais abaixo. Resolva a equação de Schrödinger independente do tempo e determine a função de onda associada.

a) $V = 0$ e $E > 0$ (partícula livre);

b) $V = V_0$ e $E > V$;

c) $V = 0$ e $E < 0$;

d) $V = V_0$ e $E < V$;

e) $V = E$,

onde V_0 é uma constante.

Resolução: A equação de Schrödinger independente do tempo é uma equação de autovalor dada por

$$H\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{1}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\varphi(x) = E\varphi(x)\,. \tag{2}$$

a) Começamos considerando o caso da partícula livre. Fazendo em (2) $V = 0$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{3}$$

$$\varphi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x)\,. \tag{4}$$

Perceba que trata-se de uma equação diferencial ordinária (E.D.O.) de segunda ordem. Para resolver definimos

$$k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \text{obtendo} \tag{5}$$

$$\varphi''(x) = -k^2\varphi(x)\,, \tag{6}$$

cuja solução é conhecida e pode ser expressa simplesmente como

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi\left(x\right) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{ou} \\ \varphi\left(x\right) = A' \cos kx + B' \sin kx \end{array} \right. . \tag{7}$$

Podemos verificar que as equações em (7) satisfazem a equação (6) tomando a derivada segunda de (7). Usando a solução em exponenciais imaginárias, obtemos

$$\varphi'\left(x\right) = Aike^{ikx} - Bike^{-ikx}$$

$$\varphi''\left(x\right) = -Ak^2e^{ikx} - Bk^2e^{-ikx} = -k^2\varphi\left(x\right) \quad \blacksquare$$

Pronto! Sabemos agora que a equação de onda da partícula livre pode ser dada por qualquer das expressões em (7).

Perceba que a relação (5) satisfaz a relação clássica entre energia e momento se considerarmos a relação de de Broglie $p = \hbar k$:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}.$$

As constantes A e B são dadas pelas condições de contorno e pela condição de normalização,

$$\int |\psi\left(x,\, t\right)|^2 dx = \int |\varphi\left(x\right)|^2 e^{-iEt/\hbar} e^{iEt/\hbar} dx = \int |\varphi\left(x\right)|^2 dx = 1. \tag{8}$$

b) Novamente partimos de (2) fazendo $V\left(x\right) = V_0$,

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

$$\varphi''\left(x\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_0\right)\varphi\left(x\right) \quad \text{e definindo}$$

$$\kappa \equiv \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_0\right), \quad \text{temos que}$$

$$\varphi''\left(x\right) = -\kappa^2\varphi\left(x\right),$$

que é idêntica à equação (6) do item (a). Logo as equações (7) também são soluções para esse caso, substituindo k por κ.

c) Nesse item, a equação de Schrödinger é idêntica à obtida em (4). Porém, como $E < 0$, a substituição a ser feita é

$$\rho^2 \equiv -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{de forma que}$$

$$\varphi''\left(x\right) = \rho^2\varphi\left(x\right). \tag{9}$$

Note que como $E < 0$, $\rho^2 > 0$. A solução de (9) também é uma solução canônica conhecida:

$$\left\{ \begin{array}{c} \varphi(x) = Ce^{kx} + De^{-kx}, \quad \text{ou} \\ \varphi(x) = C' \cosh kx + D' \sinh kx \end{array} \right. , \tag{10}$$

onde novamente as constantes C e D são dadas pelas condições de contorno e pela condição de normalização.

d) Semelhante ao item (c). Nesse caso definimos

$$\varepsilon^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E).$$

e) Partindo de (2), obtemos

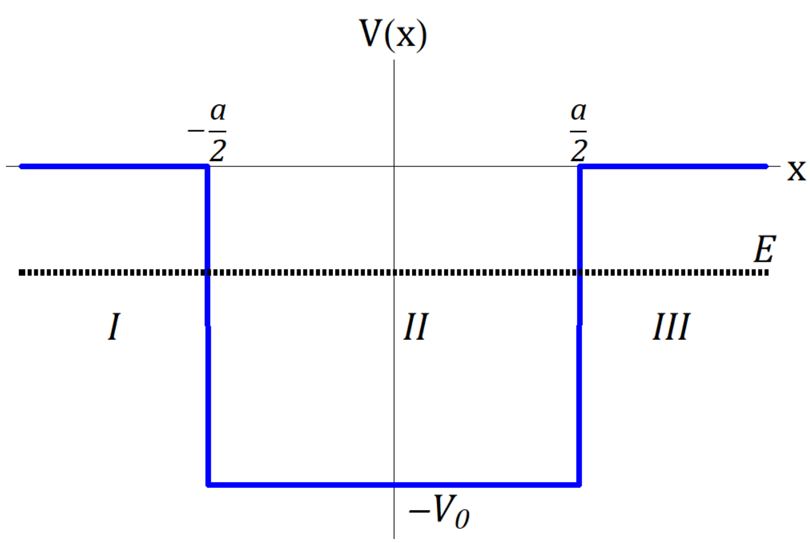
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad \Rightarrow \varphi''(x) = 0,$$

cuja solução é uma simples equação de reta, $\varphi(x) = ax + b$, com a e b constantes.

Questão 2 - Considere uma partícula de massa m e energia E. Determine os estados ligados do poço de potencial finito descrito por

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{cc} -V_0, & \text{se } -a/2 < x < a/2 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{array} \right. .$$

Resolução: Dividimos o potencial, como sugerido na figura abaixo, em regiões I, II e III.



Para as regiões I e III, a solução é tal qual em (10). Para a região I, devemos ter $D = 0$, portanto $\varphi_I(x) = Ce^{\rho x}$. Para a região III, devemos ter $C = 0$, portanto $\varphi_{III}(x) = De^{-\rho x}$. Para a região II, usamos a solução encontrada em (7), portanto $\varphi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$.

No ponto $x = -a/2$, temos duas condições de continuidade: a continuidade da autofunção e da sua derivada. Em outras palavras

$$\varphi_I(-a/2) = \varphi_{II}(-a/2) \quad \text{e} \quad \frac{d\varphi_I}{dx}(-a/2) = \frac{d\varphi_{II}}{dx}(-a/2).$$

Da primeira e segunda condição resultam, respectivamente,

$$Ce^{-\rho a/2} = Ae^{-ika/2} + Be^{ika/2},$$

$$C\rho e^{-\rho a/2} = Aike^{-ika/2} - Bike^{ika/2}.$$

De onde podemos isolar A e B em termos de C:

$$\begin{cases} A = e^{(-\rho+ik)a/2}\left(\frac{\rho+ik}{2ik}\right)C \\ B = -e^{-(\rho+ik)a/2}\left(\frac{\rho-ik}{2ik}\right)C \end{cases}. \tag{11}$$

No ponto $x = a/2$, temos as mesmas condições que em $x = -a/2$. A continuidade da autofunção resulta em

$$Ae^{ika/2} + Be^{-ika/2} = De^{-\rho a/2} \tag{12}$$

e a continuidade da derivada resulta em

$$Aike^{ika/2} - Bike^{-ika/2} = -D\rho e^{-\rho a/2}. \tag{13}$$

Substituindo os valores de (11) em (12) e (13), obtemos a seguinte relação que limita os valores de energia possíveis:

$$e^{2ik} = \left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik}\right)^2.$$