FMA0403 - MECÂNICA QUÂNTICA I
Segundo Semestre de 2008 - Diurno
Resolução Comentada da Segunda Lista de Problemas

Eduardo T. D. Matsushita

Dados:

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

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial j}{\partial x}=0$$

$$j=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^\star}{\partial x}-\psi^\star\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

Exercício 1. Neste exercício vamos considerar uma partícula quântica de massa m sujeita a um potencial degrau da forma

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{se } x<0\\ V_0 & \text{se } x>0\end{cases}.$$

Caso $E>V_0$:
a) Para $x<0$, onde o potencial é nulo, temos a equação de Schrödinger para uma partícula livre já estudada em aula. Dessa maneira a solução tem a forma:

$$\psi(x<0)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, \tag{1}$$

em que $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. O termo Ae^{ikx} pode ser associado a uma onda se movimentando para a direita na região $x<0$, correspondendo, portanto, à **onda incidente**. Já o termo Be^{-ikx} é uma onda que se propaga para a esquerda nessa mesma região ($x<0$), ou seja, é a **onda refletida** pelo degrau. A densidade de corrente $j_<$ associada é dada por

$$j_<=\frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2-|B|^2\right) \tag{2}$$

onde a quantidade $\frac{\hbar k}{m}$ está fisicamente associada a velocidade de grupo da onda (1).

Para $x>0$, a equação de Schrödinger adquire a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V_0\psi(x)=E\psi(x), \tag{3}$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k'^2\psi(x) = 0, \tag{4}$$

em que $k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$. A solução dessa equação será análoga à equação (1), ou seja,

$$\psi(x > 0) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}. \tag{5}$$

O termo $Ce^{ik'x}$, que corresponde a uma onda se propagando para a direita em $x > 0$, pode ser considerado como uma **onda transmitida**. O termo restante $De^{-ik'x}$ poderia ser associado a uma onda incidente adicional, vinda do lado direito. No entanto, a situação física mais comum é aquela em que as partículas incidem apenas a partir de um dos lados da barreira. Portanto, vamos descartar este termo, fazendo $D = 0$ na equação (5):

$$\psi(x > 0) = Ce^{ik'x}. \tag{6}$$

A densidade de corrente $j_>$ associada é dada por

$$j_> = \frac{\hbar k'}{m}|C|^2. \tag{7}$$

onde a quantidade $\frac{\hbar k'}{m}$ está fisicamente associada a velocidade de grupo da onda (6).

Levando em conta que a densidade de probabilidade no caso estacionário é uma constante do movimento decorre da equação da continuidade que

$$j_< = j_>$$

de modo que

$$\frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right) = \frac{\hbar k'}{m}|C|^2 \Rightarrow \underbrace{\frac{|B|^2}{|A|^2}}_{R} + \underbrace{\frac{k'}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2}}_{T} = 1. \tag{8}$$

Da equação acima identificamos $R \equiv \frac{|B|^2}{|A|^2}$ com o coeficiente de reflexão e $T \equiv \frac{k'|C|^2}{k|A|^2}$ com o coeficiente de transmissão.

b) Temos:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ik'x} & x > 0. \end{cases} \tag{9}$$

Impondo a continuidade da função de onda e da derivada primeira, obtemos, respectivamente

$$\begin{aligned}
\psi\left(0^{-}\right)=\psi\left(0^{+}\right) &\quad\rightarrow\quad A+B=C \\
\frac{d\psi\left(0^{-}\right)}{dx}=\frac{d\psi\left(0^{+}\right)}{dx} &\quad\rightarrow\quad ik\left(A-B\right)=ik'C
\end{aligned}$$

Essas duas relações nos permitem determinar B e C em termos de A. Combinando as duas equações obtemos

$$\frac{B}{A}=\frac{k-k'}{k+k'} \tag{10}$$

e

$$\frac{C}{A}=\frac{2k}{k+k'}. \tag{11}$$

Finalmente é possível obter explicitamente os coeficientes R e T dados por:

$$R=\left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^{2}=\frac{\left[1-\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}\right]^{2}}{\left[1+\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}\right]^{2}} \tag{12}$$

$$T=\frac{4kk'}{\left(k+k'\right)^{2}}=\frac{4\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}}{\left[1+\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}\right]^{2}}. \tag{13}$$

Caso $0<E<V_0$:

c) Para $x<0$, onde o potencial é nulo, temos a solução:

$$\psi\left(x<0\right)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, \tag{14}$$

em que $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Já para $x>0$ a equação de Schrödinger pode ser colocada da forma

$$\frac{d^{2}\psi\left(x\right)}{dx^{2}}-K^{2}\psi\left(x\right)=0, \tag{15}$$

em que $K=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$. A solução dessa equação diferencial tem a forma geral

$$\psi\left(x>0\right)=Ce^{Kx}+De^{-Kx}. \tag{16}$$

Porém, lembramos que, para que a função de onda seja aceitável, ela não pode ir para infinito quando $x\rightarrow\pm\infty$. Como K é positivo, isso implica que o coeficiente C deve ser nulo e, portanto, a solução geral simplifica-se:

$$\psi\left(x>0\right)=De^{-Kx}. \tag{17}$$

Temos:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ De^{-Kx} & x > 0. \end{cases} \tag{18}$$

Impondo a continuidade da função de onda e da derivada primeira em $x = 0$ obtemos:

$$\begin{aligned} \psi\left(0^-\right) = \psi\left(0^+\right) &\quad\rightarrow\quad A + B = D \\ \frac{d\psi\left(0^-\right)}{dx} = \frac{d\psi\left(0^+\right)}{dx} &\quad\rightarrow\quad ik\left(A - B\right) = -KD. \end{aligned}$$

Decorre das equações acima

$$\frac{A}{D} = \frac{k + iK}{2k} \tag{19}$$

e

$$\frac{B}{D} = \frac{k - iK}{2k}. \tag{20}$$

Note que como A e B tem o mesmo módulo, a densidade de corrente de probabilidade j associada à onda plana se propagando para a direita, $j = \frac{\hbar k}{m}\left|A\right|^2$ é igual à da onda plana se propagando para a esquerda, $j = \frac{\hbar k}{m}\left|B\right|^2$. Dessa forma a densidade de corrente total será nula. Calculando o coeficiente de reflexão R verificamos que

$$R = \frac{\left|B\right|^2}{\left|A\right|^2} = 1. \tag{21}$$

Portanto, teremos reflexão total da onda de probabilidade incidente sobre o degrau de potencial.

d) É fácil mostrar, a partir de (17), que a densidade de corrente j para $x > 0$ (região classicamente proibida) é identicamente nula, ou seja,

$$j\left(x > 0\right) = 0. \tag{22}$$

Esse resultado era de se esperar. De fato, em qualquer situação estacionária, a densidade de corrente de probabilidade é constante para todo x. Como vimos anteriormente que a densidade de corrente de probabilidade é nula do lado esquerdo da barreira, ela deverá ser também nula do lado direito.

Podemos obter, a partir de (17), a expressão da densidade de probabilidade de encontrar a partícula na região classicamente proibida

$$\rho\left(x\right) = \left|D\right|^2 e^{-2Kx} = \frac{4k^2}{k^2 + K^2} e^{-2Kx}, \tag{23}$$

que é não-nula. Note que a probabilidade de encontrarmos a partícula em $x > 0$ decai exponencialmente à medida que nos afastamos da origem. Este fenômeno não-clássico é chamado *penetração de barreira.* Esse efeito não é inconsistente com o resultado $R = 1$ obtido anteriormente, de que a partícula é refletida, com 100% de probabilidade, pela barreira. Poderíamos formular a seguinte analogia clássica para descrever o movimento da partícula: ela vem da esquerda, penetra um pouco na região proibida e, depois, com certeza, retorna para o lugar de onde veio.

♠ ♠ ♠

Exercício 2. Vamos agora estudar o caso de uma partícula quântica de massa m submetida a um potencial delta atrativo

$$V(x) = -\lambda\delta(x)$$

com $\lambda > 0$.

a) A equação de Schrödinger independente do tempo assume a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \lambda\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{24}$$

Como estamos interessados em estados ligados devemos ter $E < 0$. Assim, para $x \neq 0$, $V(x) = 0$,de modo que as soluções são da forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} & x < 0 \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} & x > 0 \end{cases} \tag{25}$$

com $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$. Entretanto devemos ter soluções que se anulem no limite $x \to \pm\infty$. Dessa maneira, levando em conta que κ é positivo, resulta $B = C = 0$ de modo que a solução geral assume a forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & x < 0 \\ De^{-\kappa x} & x > 0. \end{cases} \tag{26}$$

Agora estabeleceremos as condições de contorno associadas com a continuidade da função de onda e descontinuidade da sua derivada em $x = 0$. A continuidade implica

$$\psi\left(0^-\right) = \psi\left(0^+\right). \tag{27}$$

Por outro lado, note que a presença do delta de Dirac manifesta-se no fato de $\frac{d\psi}{dx}$ não ser contínua na origem. De fato, integrando (24) entre $-\epsilon$ e ϵ temos que

$$\left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{\epsilon} - \left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{-\epsilon} + \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0) = \kappa^2\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\, \psi(x). \tag{28}$$

No limite $\epsilon \to 0$ temos que a última integral é nula, já que ψ é contínua. Logo o salto da derivada em $x = 0$ é dado por

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0^+} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{0^-} = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0) \tag{29}$$

onde arbitrariamente podemos tomar $\psi(0) = A$.

Aplicando (27) e (29) na solução geral (26) obtemos o sistema de equações lineares homogêneas

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \frac{2m\lambda}{\hbar^2} - \kappa & -\kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Para admitir solução não-trivial devemos ter

$$\det \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \frac{2m\lambda}{\hbar^2} - \kappa & -\kappa \end{pmatrix} = 0 \to \kappa = \frac{m\lambda}{\hbar^2}. \tag{30}$$

Assim a energia do estado ligado é

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}. \tag{31}$$

Normalizando ψ:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|A|^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{|A|^2}{\kappa} = 1,$$

e escolhendo convenientemente a raiz real positiva

$$A = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\lambda}}{\hbar} \tag{32}$$

finalmente obtemos a função de onda do estado ligado

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\lambda}}{\hbar} e^{-\frac{m\lambda}{\hbar^2}|x|}. \tag{33}$$

b) Vamos agora trabalhar com os estados de espalhamento ($E > 0$) do potencial delta de Dirac atrativo com o objetivo de determinar a matriz S. Para $|x| > 0$, onde $V(x) = 0$, sabemos que a solução da equação de Schrödinger é da forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & x > 0 \end{cases}$$

com $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

A matriz de espalhamento S relaciona as amplitudes das ondas emergentes (B e F) com as amplitudes das ondas incidentes (A e G) pela equação matricial

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \tag{34}$$

onde $B = S_{11}A + S_{12}G$ e $F = S_{21}A + S_{22}G$. Utilizando a condição de continuidade da função de onda e do salto da sua derivada primeira podemos determinar os elementos da matriz S.

- continuidade de $\psi(x)$ em $x = 0$ implica que

$$A + B = F + G. \tag{35}$$

- descontinuidade (29) da derivada primeira

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \begin{cases} ik\left(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}\right) & x < 0 \\ ik\left(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx}\right) & x > 0 \end{cases}$$

em $x = 0$ implica que

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0). \tag{36}$$

Tomando as equações (35) e (36) com $\psi(0) = A + B$ obtemos um sistema de equações de onde extraímos

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta}A + \frac{1}{1 - i\beta}G, \tag{37}$$

e

$$F = \frac{1}{1 - i\beta}A + \frac{i\beta}{1 - i\beta}G \tag{38}$$

com $\beta = \beta(k) \equiv \frac{m\lambda}{\hbar^2 k}$. Das expressões acima facilmente identificamos os elementos $S_{11} = \frac{i\beta}{1-i\beta}$, $S_{12} = \frac{1}{1-i\beta}$, $S_{21} = \frac{1}{1-i\beta}$ e $S_{22} = \frac{i\beta}{1-i\beta}$ da matriz de espalhamento S que assume a forma

$$S = \begin{pmatrix} \frac{i\beta}{1-i\beta} & \frac{1}{1-i\beta} \\ \frac{1}{1-i\beta} & \frac{i\beta}{1-i\beta} \end{pmatrix}. \tag{39}$$

É fácil verificar que S é unitária, ou seja, $S^\dagger = S^{-1}$ onde $S^\dagger$ e S^{-1} são, respectivamente, a hermiteana conjugada e a inversa de S. Assim, por inspeção, verificamos que

$$S^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{-i\beta}{1+i\beta} & \frac{1}{1+i\beta} \\ \frac{1}{1+i\beta} & \frac{-i\beta}{1+i\beta} \end{pmatrix}$$

de modo que $S^\dagger S = SS^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow S^\dagger = S^{-1}$.

c) Para uma onda incidente à esquerda temos $G = 0$, decorre de (37) e (38), que

$$R = |S_{11}|^2 = \frac{\beta^2}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+\frac{2\hbar^2 E}{m\lambda^2}} \tag{40}$$

e

$$T = |S_{12}|^2 = 1 - R = \frac{1}{1+\beta^2} = \frac{1}{1+\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2 E}}. \tag{41}$$

d) As energias dos estados ligados ($E < 0$) de uma partícula submetida a um potencial genérico estão associadas com os pólos da sua matriz de espalhamento S no eixo imaginário positivo. Introduzindo a mudança de variável $k \to i\kappa$ (que nos conduz ao plano complexo) verificamos que a energia assume a forma $E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$, estritamente negativa, e $\beta(k) \to \beta(i\kappa) = -i\beta(\kappa)$. É fácil verificar, a partir de (39), que a singularidade de S é o valor que anula o denominador, ou seja,

$$1 - i\beta(i\kappa) = 0$$

de onde obtemos

$$\beta(\kappa) = 1 \Rightarrow \frac{m\lambda}{\hbar^2\kappa} = 1 \Rightarrow \kappa = \frac{m\lambda}{\hbar^2}. \tag{42}$$

Finalmente obtemos a energia do estado ligado

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2} \tag{43}$$

que coincide com o valor obtido em (31).