Mecânica Quântica – Série 3

Curso de Engenharia Biomédica – 2008/2009

(Versão de 07/10/2008)

3.1 *Gasiorowicz 3.1*

∗**3.2** *Gasiorowicz 3.2*

∗**3.3** *Gasiorowicz 3.5*

∗**3.4** *Gasiorowicz 3.6*

3.5 *Gasiorowicz 3.7*

∗**3.6** *Gasiorowicz 3.9*

3.7 Os problemas em Mecânica Quântica, embora conceptualmente simples, são frequentemente difíceis devido às complicações dos cálculos. Isto faz com que na maioria dos exemplos sejam escolhidos casos muito simples. No entanto o programa `Mathematica` oferece uma ferramenta excelente para fazer contas em Mecânica Quântica. Para ilustrar isto vamos considerar novamente o problema anterior (*Gasiorowicz 3.9*).

a) Escreva um programa de `Mathematica` que tenha as funções de onda pares e ímpares. Notar que é preferível usar $(2m-1)$ e $2m$, respectivamente para as funções pares e ímpares, com $m = 1, 2, \ldots$. A largura do poço também deve ser incluída. Assim as funções deverão ser

$$\texttt{uplus}[x, m, a], \qquad \texttt{uminus}[x, m, a]$$

b) Verifique que as funções são ortonormadas, isto é,

$$\int_{-a/2}^{a/2} \texttt{uplus}[x, m, a]\texttt{uplus}[x, n, a]\; dx = \delta_{nm},$$
$$\int_{-a/2}^{a/2} \texttt{uminus}[x, m, a]\texttt{uminus}[x, n, a]\; dx = \delta_{nm},$$
$$\int_{-a/2}^{a/2} \texttt{uplus}[x, m, a]\texttt{uminus}[x, n, a]\; dx = 0$$

c) Use essas funções para mostrar que os coeficientes da expansão

$$\psi(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m^+ u_m^+(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m^+ t} + \sum_{m=1}^{\infty} A_m^- u_m^-(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_m^- t}$$

têm a seguinte expressão

$$A_m^+ = -\frac{2(-1)^m}{(2m-1)\pi}, \quad A_m^- = \frac{-1+(-1)^m}{m\pi}$$

d) Utilize estes resultados para mostrar que a probabilidade de encontrar a partícula vai oscilar com o tempo. Para isso é conveniente parametrizar o tempo nas exponenciais da seguinte forma

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_m^+ t} = e^{-i\theta(2m-1)^2}, \quad e^{-\frac{i}{\hbar}E_m^- t} = e^{-i\theta(2m)^2}$$

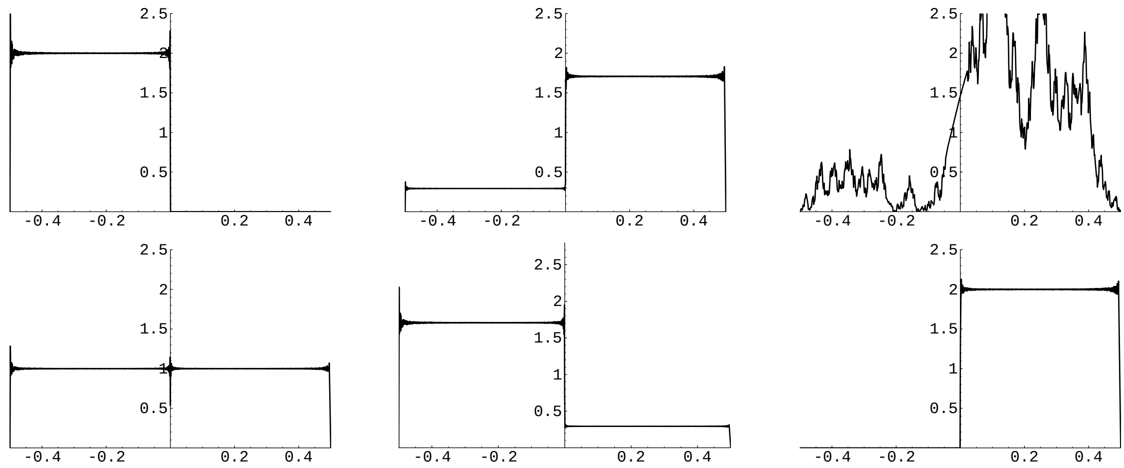

Figure 1: Densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ no intervalo $[-0.5, 0.5]$ num poço de potencial com $a = 1$ para $\theta = 0, \pi/4, 1, \pi/2, 3\pi/4, \pi$. $\psi(x,t)$ foi obtida somando 500 termos na expansão.

onde

$$\theta = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \frac{t}{\hbar}$$

é um ângulo sem dimensões.

Notar que se somar menos termos na expansão haverá um erro maior no resultado como se pode ver na figura seguinte

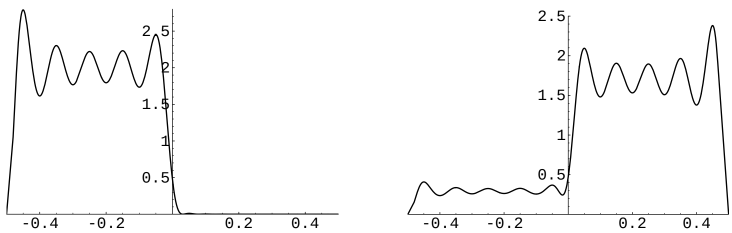

Figure 2: Densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ no intervalo $[-0.5, 0.5]$ num poço de potencial com $a = 1$ para $\theta = 0, \pi/4$. $\psi(x,t)$ foi obtida somando 10 termos na expansão. Comparar com a Figura 1.

e) Use os resultados anteriores para verificar o problema *Gasiorowicz 3.10*. Notar que há uma gralha no enunciado. A expressão correcta é

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

$*$ **3.8** Uma partícula num poço infinito de potencial encontra-se inicialmente numa "mistura" dos primeiros dois estados estacionários:

$$\Psi(x, 0) = A \left[u_1(x) + u_2(x) \right].$$

a) Normalize $\Psi(x,0)$ (i.e., determine a constante A real e positiva – isso é fácil quando se utilizar a ortogonalidade de u_1 e u_2.)

b) Determine $\Psi(x,t)$ e $|\Psi(x,t)|^2$; escreva a densidade da probabilidade como função sinusoidal do tempo, usando $\omega \equiv \pi^2\hbar/2ma^2$.

c) Calcule $\langle x\rangle$. Repare que oscila no tempo. Qual é a frequência angular e a amplitude da oscilação?

d) Calcule $\langle p\rangle$ (da maneira mais rápida).

e) Quando a energia é medida, quais são os valores *possíveis* que se podem obter, e quais são as probabilidades respectivas? Calcule também o valor expectável de H e compare com as energias E_1 e E_2.

3.9 Use o `Mathematica` para visualizar os resultados do problema anterior. Para isso

a) Faça o gráfico de $|\Psi(x,t)|^2$ para $\omega t = 0, \pi/12, \pi/6, \pi/4, \pi/3$.

b) Faça o gráfico de $\langle x\rangle$ para os mesmos valores de ωt.

c) Calcule $\langle p\rangle$ através da definição:

$$\langle p\rangle = \int_0^a dx\, \Psi^*(x,t)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)$$

utilizando o `Mathematica` para fazer os integrais.

∗**3.10** *Gasiorowicz 3.11*

3.11 *Gasiorowicz 3.14*

∗**3.12** *Gasiorowicz 3.16*

3.13 *Gasiorowicz 3.17*

3.14 *Este problema é o Exemplo 3.5 do Gasiorowicz aumentado.*
Considere uma partícula na caixa da qual se conhece a função de onda em $t = 0$,

$$\psi(x) = \begin{cases} A\,\dfrac{x}{a} & 0 < x < a/2 \\ A\left(1 - \dfrac{x}{a}\right) & a/2 < x < a \end{cases} \tag{1}$$

onde $A = \sqrt{12/a}$. Nas alíneas seguintes utilize o *Mathematica.*

a) Mostre que $\psi(x)$ está normalizada.

b) Determine coeficientes da expansão A_n.

c) Calcule $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ e $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$

d) Calcule a função de onda no espaço dos momentos e mostre que está normalizada. Faça um gráfico de $|\phi(p)|^2$.

e) Calcule $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$ e $\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$

f) Verifique que $\Delta x\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.

g) Calcule o valor médio da energia $\langle H\rangle$.