MQ – 2º EXAME 2014/2015 – 31/01/2015

I

1) Falsa : $B^+ = e^{-iA^+} = e^{-iA} \neq B$

2) Falsa : Como a função delta está na origem, os estados ímpares não são afectados por ela pois $u(0)=0$

Então $E_1 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

3) Verdadeira: o estado representado é o segundo estado ímpar (três nodos) e há mais dois estados pares.

4) Falsa : $(A+A^+)|\psi\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + |2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle$

logo $\langle\psi|(A+A^+)|\psi\rangle = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1 \Rightarrow \langle\psi|x|\psi\rangle \neq 0$

5) Falsa: A função é ímpar. A paridade de z é (-1), a de $|\psi_{n\ell m}\rangle = (-1)^{\ell}$. Logo $P = (-1)^2(-1)(-1)^0 = -1$

6) Verdadeira: Está de acordo com a Tabela do formulário

7) Verdadeira: $P(L_z = \hbar) = \frac{1}{1+1+4} + \frac{1}{1+1+4} = \frac{1}{6} + \frac{1}{6} = \frac{1}{3}$

8) Verdadeira: o estado inicial está segundo o eixo negativo dos y e roda em torno de z de 90° terminando na direcção do eixo positivo dos x.

II

1) $\sum_{n=1}^{\infty} |A_n|^2 = 1$; $A_1 = A$; $A_2 = -A$ $A_n = 0$ $n \geq 3$

$1 = |A|^2 + |-A|^2 = 2A^2$ (real) $\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}}$ (positiva)

Como $A_3=0$, $P(E=E_3)=0$.

2) $$\langle H\rangle = \sum_n |A_n|^2 E_n = \frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{2}E_2 = \left(\frac{1}{2}+\frac{4}{2}\right)E_1$$

$$= \frac{5}{2}E_1 = \frac{5}{2}\,\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

3) $$\langle x\rangle = \int_0^a dx\ \psi^*(x,0)\, x\, \psi(x,0)$$

$$= \frac{1}{2}\left[\int_0^a dx\, u_1^2(x)\, x + \int_0^a dx\, u_2^2(x)\, x - 2\int_0^a dx\, u_1(x)\, u_2(x)\, x\right]$$

Temos sucessivamente

$$\int_0^a dx\, u_1^2(x)\, x = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) x = \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \int_0^\pi dy\, y \sin y$$

$$= \frac{2a}{\pi^2}\left[\frac{y^2}{4} - \frac{\sin(2y)\,y}{4} - \frac{\cos(2y)}{8}\right]_0^\pi = \frac{2a}{\pi^2}\,\frac{\pi^2}{4} = \frac{a}{2}$$

$$\int_0^a dx\, u_2^2(x)\, x = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) x = \frac{2}{a}\left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int_0^{2\pi} dy\, y \sin y$$

$$= \frac{a}{2\pi^2}\left[\frac{y^2}{4} - \frac{\sin(2y)\,y}{4} - \frac{\cos(2y)}{8}\right]_0^{2\pi} = \frac{a}{2\pi^2}\,\frac{4\pi^2}{4} = \frac{a}{2}$$

$$\int_0^a dx\, u_1(x)\, u_2(x)\, x = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) x$$

$$= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \int_0^\pi dy\, y \sin y \sin 2y$$

$$= \frac{2a}{\pi^2}\,\frac{1}{2}\left[\cos y - \frac{\cos 3y}{9} + y\sin y - \frac{y\sin 3y}{3}\right]_0^{\pi}$$

$$= \frac{a}{\pi^2}\left[-2 + \frac{2}{9}\right] = -\frac{16a}{9\pi^2}$$

logo

$$\langle x\rangle = \frac{1}{2}\left[\frac{a}{2} + \frac{a}{2} - 2\left(-\frac{16a}{9\pi^2}\right)\right] = \frac{a}{2} + \frac{16a}{9\pi^2}$$

4) $$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}u_1(x)\,e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} - \frac{1}{\sqrt{2}}u_2(x)\,e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$$

Para $t = T$

$$\frac{E_1 T}{\hbar} = \frac{4ma^2}{\pi\hbar}\,\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\,\frac{1}{\hbar} = 2\pi$$

$$\frac{E_2 T}{\hbar} = \frac{4E_1 T}{\hbar} = 8\pi$$

logo

$$\psi(x,T) = \psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}u_1(x) - \frac{1}{\sqrt{2}}u_2(x)$$

$$P\left(0<x<\tfrac{a}{2}\right) = \int_0^{a/2} dx\,|\psi(x,T)|^2 = \int_0^{a/2} dx\,|\psi(x,0)|^2$$

$$= \frac{1}{2}\left[\int_0^{a/2} dx\,u_1^2(x) + \int_0^{a/2} dx\,u_2^2(x) - 2\int_0^{a/2} dx\,u_1(x)u_2(x)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\,\frac{2}{a}\left[\int_0^{a/2} dx\,\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \int_0^{a/2} dx\,\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - 2\int_0^{a/2} dx\,\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\right]$$

Temos sucessivamente:

$$\int_0^{a/2} dx \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \frac{a}{\pi}\int_0^{\pi/2} dy \sin^2 y = \frac{a}{\pi}\left[\frac{y}{2} - \frac{\sin 2y}{4}\right]_0^{\pi/2} = \frac{a}{4}$$

$$\int_0^{a/2} dx \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) = \frac{a}{2\pi}\int_0^{\pi} dy \sin^2 y = \frac{a}{2\pi}\left[\frac{y}{2} - \frac{\sin 2y}{4}\right]_0^{\pi} = \frac{a}{4}$$

$$\int_0^{a/2} dx \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) = \frac{a}{\pi}\int_0^{\pi/2} dy \sin y \sin 2y$$

$$= \frac{a}{\pi}\left[\frac{1}{2}\sin y - \frac{1}{6}\sin 3y\right]_0^{\pi/2} = \frac{a}{\pi}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{6}\right) = \frac{2a}{3\pi}$$

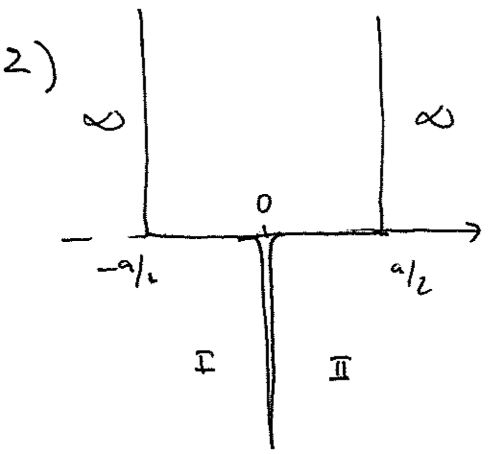
Pondo tudo junto:

$$P(0<x<a/2) = \frac{1}{a}\left(\frac{a}{4}+\frac{a}{4} - 2\,\frac{2a}{3\pi}\right) = \frac{1}{2} - \frac{4}{3\pi}$$

III

1) Como $V(x) = V(-x)$ o operador Paridade comuta com o Hamiltoniano e é conservada.

2)



Para $|x| > a/2$ $\psi(x) = 0$. Para $E = -|E|$ nas regiões I e II a Eq. Schrödinger independente do tempo escreve-se

$$\boxed{\frac{d^2u}{dx^2} - \alpha^2 u = 0} \quad \text{com } \alpha^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

As soluções são exponenciais reais ou senos e cosenos hiperbólicos. Como $u_I(-a/2) = u_{II}(a/2) = 0$ podemos escrever

$$\begin{cases} u_I(x) = A \sinh\alpha(x + a/2) & -a/2 \leq x \leq 0 \\ u_{II}(x) = B \sinh\alpha(-x + a/2) & 0 \leq x \leq a/2 \end{cases}$$

A continuidade em $x=0$ dá

$$u_I(0) = u_{II}(0) = A = B \Rightarrow \boxed{B=A}$$

Devido à função delta devemos ter

$$u'_{II}(0) - u'_I(0) = -\frac{\beta}{a} u(0)$$

donde obtemos

$$-B\alpha\cosh(\alpha a/2) - A\alpha\cosh(\alpha a/2) = -\frac{\beta}{a} A \sinh(\alpha \tfrac{a}{2})$$

ou $(B=A)$

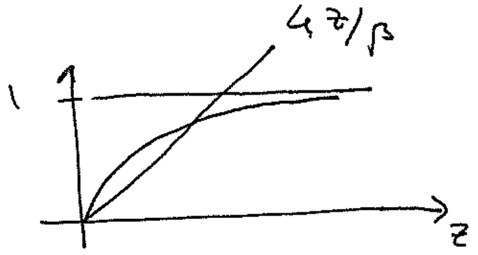
$$2\alpha a \cosh(\alpha \tfrac{a}{2}) = \beta \sinh \tfrac{\alpha a}{2}$$

ou ainda

$$\tanh\left(\frac{\alpha a}{2}\right) = \frac{2\alpha a}{\beta}$$

ou

$$\boxed{\tanh z = \frac{4z}{\beta}}$$



Condição: $\left(\frac{4z}{\beta}\right)'_{z=0} < (\tanh z)'_{z=0} \Rightarrow \frac{4}{\beta} < 1 \Rightarrow \boxed{\beta > 4}$

3) Para $E > 0$ A equação de Schrödinger na região I e II é

$$\frac{d^2u}{dx^2} + k^2 u = 0 \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

A solução par $(u_I(x) = u_{II}(-x)$ com a condição $u_I(-a/2) = u_{II}(a/2) = 0$ é

$$\begin{cases} u_I(x) = A \sin k(x + a/2) \\ u_{II}(x) = A \sin k(-x + a/2) \end{cases}$$

e é contínua em $x=0$ $\quad u_I(0) = u_{II}(0) = A \sin(a/2)$

Devido à função delta temos a discontinuidade

$$u'_{II}(0) - u'_I(0) = -\frac{\beta}{a} u(0)$$

$$-Ak\cos\left(\frac{ka}{2}\right) - Ak\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = -\frac{\beta}{a} A \sin(a/2)$$

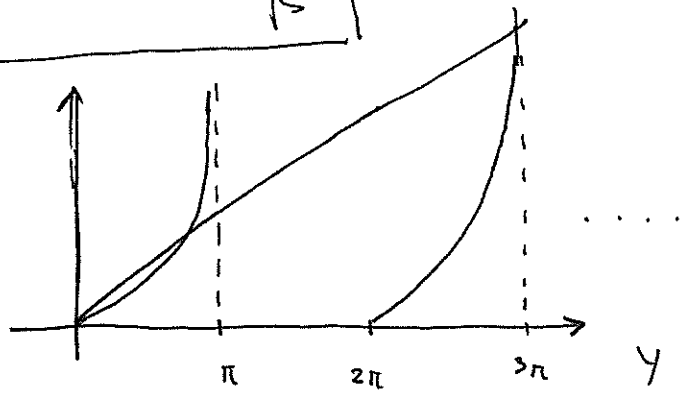
logo

$$\tan(a/2) = \frac{2ka}{\beta}$$

ou ainda

$$\boxed{\tan\left(\frac{y}{2}\right) = \frac{2y}{\beta}}$$

Graficamente



Para o estado fundamental a condição para haver solução é

$$\left(\frac{2y}{\beta}\right)'_{y=0} > \left(\tan\left(\frac{y}{2}\right)\right)'_{y=0} \Rightarrow \frac{2}{\beta} > \frac{1}{2} \Rightarrow \boxed{\beta < 4}$$

Para os outros estados pares haverá sempre soluções.

Assim o estado fundamental tem

$$E < 0 \qquad \beta > 4 \qquad \text{(alínea 2)}$$

$$E > 0 \qquad \beta < 4$$

$$E = 0 \qquad \beta = 4$$

4) Para as soluções ímpares $u(x) = -u(-x)$ temos

$$\begin{cases} u_I(x) = A\cos kx + B\sin kx \\ u_{II}(x) = -A\cos kx + B\sin kx \end{cases}$$

$$u_I(0) = u_{II}(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A = 0$$

Em $x = \pm a/2$ $\quad \sin\frac{ka}{2} = 0 \Rightarrow \frac{y}{2} = n\pi \Rightarrow \boxed{y = 2n\pi}$

$$\boxed{k = \frac{2n\pi}{a}}$$

A descontinuidade neste caso é nula

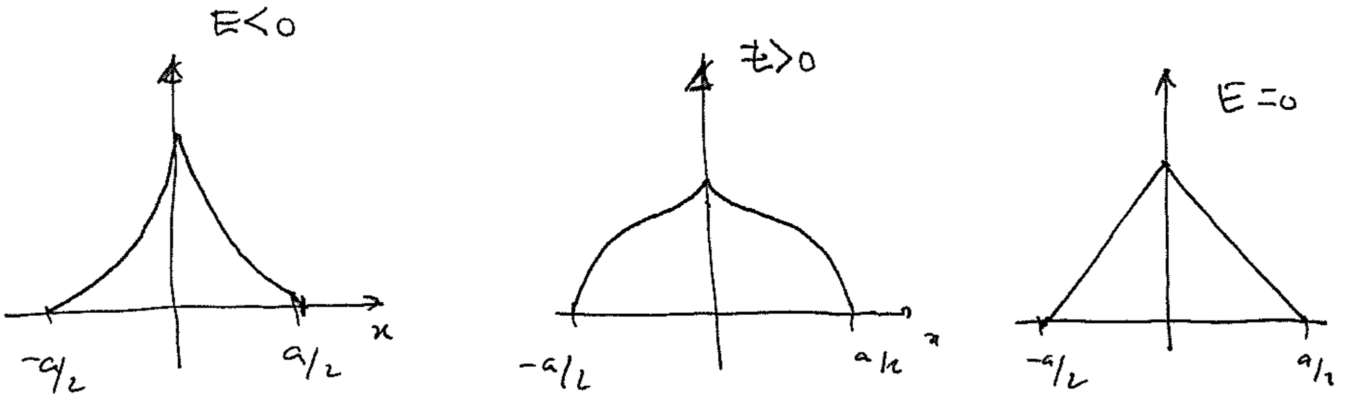
$$u'_{II}(0) - u'_{I}(0) = -\frac{\beta}{a}u(0) = 0$$

obtemos para as energias

$$E_n^- = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n)^2 \equiv \text{Expressão do fundamental sem função delta.}$$

Os estados ímpares não são afectados!

5)



Para $E=0$ a Eq. de Schrödinger é

$$\frac{d^2u}{dx^2}=0$$

e temos

$$\begin{cases} u_{I}(x) = A\left(x+a/2\right) & -a/2<x<0 \\ u_{II}(x) = A\left(-x+a/2\right) & 0<x<a/2 \end{cases}$$

6) Se $\beta<4$ $E<0$ e portanto $< E_1^- = 4\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

Se $\beta>4$ $E>0$, mas pode-se ver do gráfico que o valor máximo de y é π (Gráfico na pg 6). Logo

$$E_1^{+\,max} = \frac{\hbar^2}{2m}k_{max}^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} < E_1^-$$

1) usando:

$$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} \quad ; \quad \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{i\varphi}\sin\theta = -\sqrt{\frac{2}{3}}\, Y_{11}$$

obtemos

$$\psi(\vec{r}) = g(r)\left(\frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} - \sqrt{\frac{2}{3}}\, Y_{11}\right)$$

e está normalizada pois $g(r)$ está e as harmonics também e $\left(\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2 + \left(-\sqrt{\frac{2}{3}}\right)^2\right) = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} = 1$

Portanto os resultados possíveis duma medida de L_z são 0 e $\hbar$.

2) Como $l = 1 \Rightarrow L^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi = 2\hbar^2\psi$ a probabilidade de uma medida da $L^2 = 2\hbar^2$ é 1. As probabilidades de L_z são

$$P(L_z = \hbar) = \frac{2}{3} \quad ; \quad P(L_z = 0) = \frac{1}{3} \quad ; \quad P(L_z = -\hbar) = 0$$

3) $\langle L_z \rangle = \frac{2}{3}\hbar + \frac{1}{3}\times 0 + 0 = \frac{2}{3}\hbar$

V

1) Escolhemos a base $|1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$ (por esta ordem e omitindo o 1 em $|1, m\rangle$ pois é igual para todos)

Então a matriz que representa o Hamiltoniano H_0

é $\quad H_{ij} = \langle i | H_0 | j \rangle \qquad$ com $|i\rangle = |1\rangle, |0\rangle$ e $|-1\rangle$

Como

$$H_0|1\rangle = \frac{A}{\hbar^2}\hbar^2 = A$$

$$H_0|-1\rangle = A$$

$$H_0|0\rangle = 0$$

obtemos a matriz dada

$$H_0 = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A \end{bmatrix}$$

os valores próprios são os elementos da diagonal, isto é, $0, A, A$

———— A, A 1º estado Excitado (degenerado)

———— 0 estado fundamental

2) Temos de escrever S_x e S_y em termos dos operadores de subida e descida

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$$

$$S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$$

Logo $\quad S_x^2 = \frac{1}{4}\left(S_+^2 + S_-^2 + S_+S_- + S_-S_+\right)$

e
$$S_y^2 = -\frac{1}{4}\left(S_+^2 + S_-^2 - S_+S_- - S_-S_+\right)$$

Portanto

$$H_1 = \frac{B}{\hbar^2}\left(S_x^2 - S_y^2\right) = \frac{B}{\hbar^2}\,\frac{1}{2}\left(S_+^2 + S_-^2\right)$$

A correção de 1ª ordem ao estado fundamental é

$$\Delta E_0^{(1)} = \langle 0 | H_1 | 0 \rangle$$ (o estado fundamental é o $|0\rangle$ com energia 0)

$$= \langle 0 | \frac{B}{2\hbar^2}\left(S_+^2 + S_-^2\right) | 0 \rangle$$

Como $S_+^2 |0\rangle = 0$ e $S_-^2|0\rangle = 0$, temos

$$\boxed{\Delta E_0^{(1)} = 0}$$

3) O 1º estado excitado é degenerado. Os estados $|1\rangle$ e $|-1\rangle$ tem a mesma energia A. Portanto temos de encontrar a matriz de H_1 nesse sub-espaço e encontrar os valores próprios.

Temos

$$S_+^2|-1\rangle = S_+\left(S_+|-1\rangle\right) = \sqrt{2}\hbar S_+|0\rangle = (\sqrt{2}\hbar)^2|1\rangle$$

$$S_-^2|-1\rangle = 0$$

igualmente

$$S_-^2|1\rangle = S_-\left(\hbar\sqrt{2}|0\rangle\right) = 2\hbar^2|-1\rangle$$

$$S_-^2|-1\rangle = 0$$

Logo no sub-espaço $|1\rangle, |-1\rangle$ a matriz de H_1 é

$$H_1 = \begin{bmatrix} 0 & B \\ B & 0 \end{bmatrix}$$

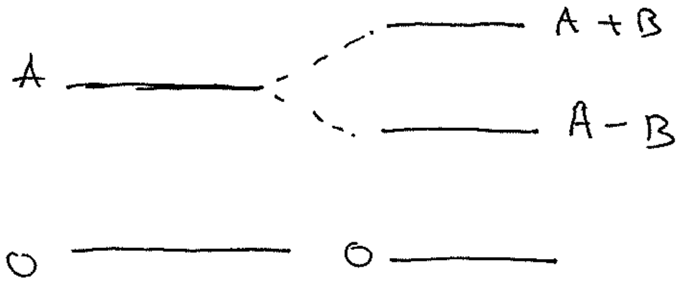
os valores próprios são as raízes de

$$(-\lambda)^2 - B^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm B$$

e portanto

$$\Delta E_1^{(1)} = \pm B$$

4)



1ª ordem

5) Definimos $H = H_0 + H_1$. Como $\langle 0|H_1|\pm1\rangle = 0$ e $\langle 0|H_1|0\rangle$, a matriz do Hamiltoniano exacto é

$$H = \begin{bmatrix} A & 0 & B \\ 0 & 0 & 0 \\ B & 0 & A \end{bmatrix}$$

os valores próprios resultam da equação

$$(-\lambda)\left[(A-\lambda)^2 - B^2\right] = 0$$

o que dá $\lambda = 0$ e $\lambda = A \pm B$.

Portanto a 1ª ordem é o resultado exacto

VI

1) $|\psi(0)\rangle = \alpha\,|\uparrow S_x\rangle + \beta\,|\downarrow S_x\rangle$

$$P\left(S_x = +\hbar/2\right) = |\alpha|^2$$

$$\alpha = \langle \uparrow S_x | \psi(0)\rangle$$

usando

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \quad ; \quad |\uparrow S_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} = \frac{1}{2}(1+i)$$

$$|\alpha|^2 = \frac{1}{4}(1+1) = \frac{1}{2} = P\left(S_x = +\hbar/2\right)$$

2) Como H não depende do tempo, podemos usar a base dos estados estacionários

$$|\uparrow S_z\rangle \quad \text{com energia } \hbar\omega_0$$

$$|\downarrow S_z\rangle \quad \text{com energia } -\hbar\omega_0$$

Para isso

$$|\psi(0)\rangle = |\uparrow S_y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{i}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow S_z\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|\downarrow S_z\rangle$$

e portanto

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow S_z\rangle e^{-i\omega_0 t} - \frac{i}{\sqrt{2}}|\downarrow S_z\rangle e^{i\omega_0 t}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t} \end{bmatrix}$$

3) $$|\psi(t)\rangle = \alpha(t)\,|\uparrow S_x\rangle + \beta(t)\,|\downarrow S_x\rangle$$

$$\alpha(t) = \langle \uparrow S_x|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} \end{bmatrix}$$

$$\alpha(t) = \frac{1}{2} e^{-i\omega_0 t}\left(1 + i e^{2i\omega_0 t}\right)$$

$$= \frac{1}{2} e^{-i\omega_0 t}\left(1 - \sin 2\omega_0 t + i \cos 2\omega_0 t\right)$$

$$|\alpha(t)|^2 = \frac{1}{4}\left[(1 - \sin 2\omega_0 t)^2 + \cos^2 2\omega_0 t\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[1 - \sin 2\omega_0 t\right] = P(S_x = +\hbar/2)$$

4)

$$P(S_x = +\hbar/2) = 1 \Rightarrow \sin 2\omega_0 T = -1$$

$$2\omega_0 T = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow \boxed{T = \frac{3\pi}{4\omega_0}}$$

O spin precessa com frequência $2\omega_0$. Rodando $3\pi/2$ em torno de z levamos $|\uparrow S_y\rangle$ para $|\uparrow S_x\rangle$.