Mecânica Quântica – Série 3

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2015/2016

(Versão de 28/09/2015)

3.1 *Gasiorowicz 3.1*

De entre os operadores seguintes,

$$a)O_1\psi(x) = x^3\psi(x); \quad b)O_2\psi(x) = x\frac{d}{dx}\psi(x); \quad c)O_3\psi(x) = \lambda\psi^*(x);$$
$$d)O_4\psi(x) = e^{\psi(x)}; \quad e)O_5\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} + a; \quad f)O_6\psi(x) = \int_{-\infty}^{x} dx'\left(\psi(x')x'\right);$$

quais são lineares?

****3.2** *Gasiorowicz 3.2*

Resolva o seguinte problema aos valores próprios

$$O_6\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

Que valores de λ conduzem a função de quadrado somável?

`Sugestão:` Diferencie ambos os lados da equação com respeito a x.

***3.3** *Gasiorowicz 3.5*

Considere um eletrão com massa $m_e = 0.9 \times 10^{-30}$ Kg, num poço de potencial infinito com largura $a = 10^{-9}$ m.

a) Qual é a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Exprime a resposta em eV.

b) Suponha que a transição do estado $n = 2$ para o estado $n = 1$ é acompanhada pela emissão dum fotão. Qual o comprimento de onda do fotão emitido?

***3.4** *Gasiorowicz 3.6*

Considere um eletrão numa caixa macroscópica de lado $a = 2$cm.

a) Qual o valor de n que corresponde à energia de 1.5 eV?

b) Qual é a diferença em energia entre os estados n e $n + 1$ naquela região de energia? Comente o resultado.

3.5 *Gasiorowicz 3.7*

Considere uma caixa infinita de largura desconhecida. Em transições entre níveis vizinhos de n fotões de várias energias são emitidos. O maior comprimento de onda medido foi 450×10^{-9} m. Use esta informação para determinar a largura a da caixa.

***3.6** *Gasiorowicz 3.9*

Uma partícula está localizada na metade esquerda duma caixa que tem os lados em $x = \pm a/2$, com uma função de onda

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} & -\frac{a}{2} < x < 0 \\ 0 & -0 < x < \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

a) A partícula vai permanecer localizada para $t > 0$?

b) Calcule a probabilidade que uma medida da energia dê a energia do estado fundamental. Mesma questão para o primeiro estado excitado.

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 $2m$, respetivamente 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

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

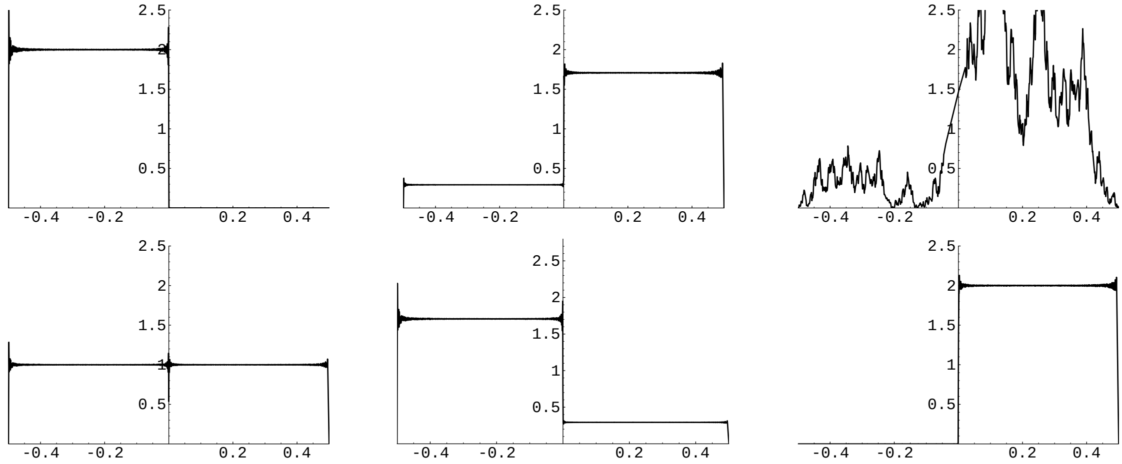

Figure 1: Densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ no intervalo $[-0.5, 0.5]$ num poço de potencial com $a = 1$ para $\theta = 0, \pi/4, 1, \pi/2, 3\pi/4, \pi$. $\psi(x,t)$ foi obtida somando 500 termos na expansão.

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

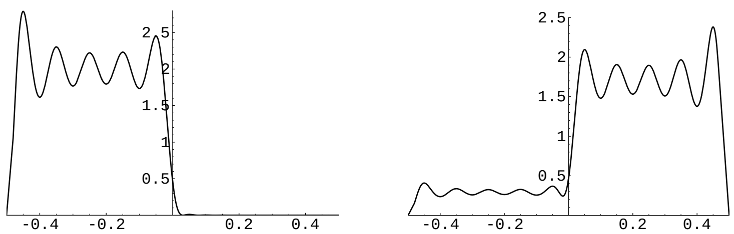

Figure 2: Densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ no intervalo $[-0.5, 0.5]$ num poço de potencial com $a = 1$ para $\theta = 0, \pi/4$. $\psi(x,t)$ foi obtida somando 10 termos na expansão. Comparar com a Figura 1.

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

$\ast$ **3.10** *Gasiorowicz 3.11*

As funções de onda para um potencial da forma

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -0 < x < a \\ \infty & x < 0 \text{ ou } x > a \end{cases}$$

são da forma

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

Suponha que no instante $t = 0$ a partícula tem uma função de onda dada por

$$\psi(x,0) = A \left(\sin \frac{\pi x}{a} \right)^5$$

a) Qual é a forma de $\psi(x,t)$?

b) Calcule A sem fazer o integral $\int dz \sin^{10} z$.

c) Qual é a probabilidade que uma medida da energia dê o valor E_3 onde $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$?

`Sugestão:` Expanda $\left((e^{iz} - e^{-iz})/(2i)\right)^5$.

3.11 *Gasiorowicz 3.14*

Uma partícula movendo-se no espaço livre tem inicialmente a função de onda

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

a) Qual a probabilidade que o seu momento esteja no intervalo $(p, p + dp)$?

b) Qual o valor médio da energia? Use o princípio de incerteza para explicar o resultado.

∗3.12 *Gasiorowicz 3.16*

Qual é o fluxo associado a uma função de onda

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}$$

onde $u(x)$ é uma função real?

∗∗3.13 *Gasiorowicz 3.17*

Considere as funções e onda para um poço infinito com lados em $x = \pm a$. Sem fazer contas mostre que o valor médio da seguinte quantidade

$$x^2p^3 + 3xp^3x + p^3x^2$$

é nulo.

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 $t = 0$,

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

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 $\langle H\rangle$.