Mecânica Quântica – Série 3 – Soluções

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2009/2010

(Versão de 30/09/2009)

3.1 Resposta: O_1, O_2 e O_6

∗**3.2** Resposta: $\psi = Ne^{\frac{x^2}{2\lambda}}$; $\lambda < 0$.

∗**3.3** Resposta: $\Delta E = 1.13\ \text{eV}$; $\lambda = 1097\ \text{nm}$

∗**3.4** Resposta: $n = 3.97 \times 10^7$; $\Delta E = 7.5 \times 10^{-8}\ \text{eV}$

3.5 Resposta: $a = 0.64\ \text{nm}$

∗**3.6** a) Não, ver problema seguinte. b) $P_0 = |A_1^+|^2 = 4/\pi^2$; $P_1 = |A_1^-|^2 = 4/\pi^2$.

3.7 Resposta no enunciado.

∗**3.8** Resposta: a) $A = 1/\sqrt{2}$; b) $|\Psi(x,t)|^2 = 1/2 \left[(u_1(x) + u_2(x)\cos 3\omega t)^2 + u_2^2(x)\sin^2 3\omega t\right]$; c) $\langle x \rangle = a/2 - 16a/(9\pi^2)\cos 3\omega t$; d) $\langle p \rangle = \dfrac{8}{3}\dfrac{\hbar}{a}\sin 3\omega t$; e) $\langle H \rangle = \dfrac{5}{2}\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

3.9 Resposta no enunciado. Usar o Mathematica.

∗**3.10** Resposta: $A = \sqrt{\dfrac{256}{63a}}$; $P(E = E_3) = \dfrac{25}{126}$

3.11 Resposta:

$$\phi(p) = \frac{1}{(\alpha\pi\hbar^2)^{1/4}}\, e^{-p^2/(2\alpha\hbar^2)};\ \langle E \rangle = \frac{\hbar^2\alpha}{4m}.$$

∗**3.12** Resposta: $j(x) = \dfrac{\hbar k}{m}\, u^2(x)$

3.13 Resposta: $\langle x^2p^3 + 3xp^3x + p^3x^2 \rangle = 0$.

3.14 Para resolver este problema pode usar o seguinte código para o Mathematica:

```
(*  Gasiorowicz Exemplo 3.5

Este ficheiro destina-se a fazer o Exemplo 3.5 do Gasiorowicz utilizando
o mathematica. Os comentarios devem ser auto-explicativos.

*)

(* Definicoes das Funcoes da caixa *)

u=Function[{x,n,a},Sqrt[2/a] Sin[n Pi x/a] ]

(* Definicao da Funcao de Onda *)

psi=Function[{x,a},If[x<0||x>a,0,If[x<a/2,Sqrt[12/a] x/a,Sqrt[12/a] (1-x/a)]]]
```

```
(* Calculo dos Coeficientes Am*)

An = Function[n, Integrate[ u[x, n, a] psi[x,a], {x, 0, a},
    Assumptions -> {n \[Element] Integers,a>0}]]


Anexplicita=Function[n,Sqrt[96] Sin[n Pi/2]/n^2/Pi^2]


(* Funcao de Onda Aproximada. nmax e o maximo numero de termos *)

psiapprox=Function[{x,a,nmax}, Sum[Anexplicita[n] u[x,n,a],{n,1,nmax}]]



(* Testes *)
(* Expressao para os coeficientes *)

Teste1:= An[n] -Anexplicita[n]

(* Normalizacao *)

Teste2:=Integrate[psi[x,a]^2,{x,0,a},Assumptions -> a>0]


(* Plots a=1 *)
(* So um termo *)

plot1=Plot[psiapprox[x,1,1],{x,0,1},PlotRange->{{0,1},{0,1.8}},
AxesLabel -> {"x/a","\[Psi]"}];

(* 10 termos *)
     plot10=Plot[psiapprox[x,1,10],{x,0,1},PlotRange->{{0,1},{0,1.8}},
AxesLabel -> {"x/a","\[Psi]"}] ;

(* 100 termos *)
     plot100=Plot[psiapprox[x,1,100],{x,0,1},PlotRange->{{0,1},{0,1.8}},
AxesLabel -> {"x/a","\[Psi]"}];

Fig1=Show[{plot1,plot10,plot100}]

(* Valor Medio <x> *)

xmed=Integrate[psi[x,a] x psi[x,a],{x,0,a},Assumptions-> a>0]
```

```
(* Valor Medio <x^2> *)

x2med=Integrate[psi[x,a] x^2 psi[x,a],{x,0,a},Assumptions-> a>0]

(* Delta x *)

Deltax=Simplify[Sqrt[x2med -xmed^2],Assumptions-> a>0]


(* Funcao de Onda no espaco dos momentos *)

Cst=1/Sqrt[2 Pi hbar]

phi=Function[{p,a},Cst Integrate[ psi[x,a] E^(-I/hbar p x),{x,0,a},
Assumptions-> a>0]]


(* Plot Distribuicao no espaco dos momentos *)

phipa = phi[p, a];

Fig2=Plot[Simplify[Abs[phipa /. {p -> hbar/a k}]^2  hbar/a,
  Assumptions -> {a > 0, hbar > 0}] , {k, -10, 10},
AxesLabel -> {"p a/\[HBar]", "|\[Phi]|^2"}]

(* Valor Medio <p> *)

pmed=Integrate[Abs[phipa]^2 p, {p, -Infinity, Infinity},
 Assumptions -> {a > 0, hbar > 0}]

(* Valor Medio <p^2> *)

p2med=Integrate[Abs[phipa]^2 p^2, {p, -Infinity, Infinity},
 Assumptions -> {a > 0, hbar > 0}]

(* Delta p *)

Deltap=Simplify[Sqrt[p2med-pmed^2],Assumptions->{a>0,hbar>0}]

(* Relacao de Incerteza de Heisenberg  (RIH)*)
(* Verifique que RIH > hbar/2 *)

RIH=Deltax Deltap
```

Com este código deve poder obter os seguintes gráficos.

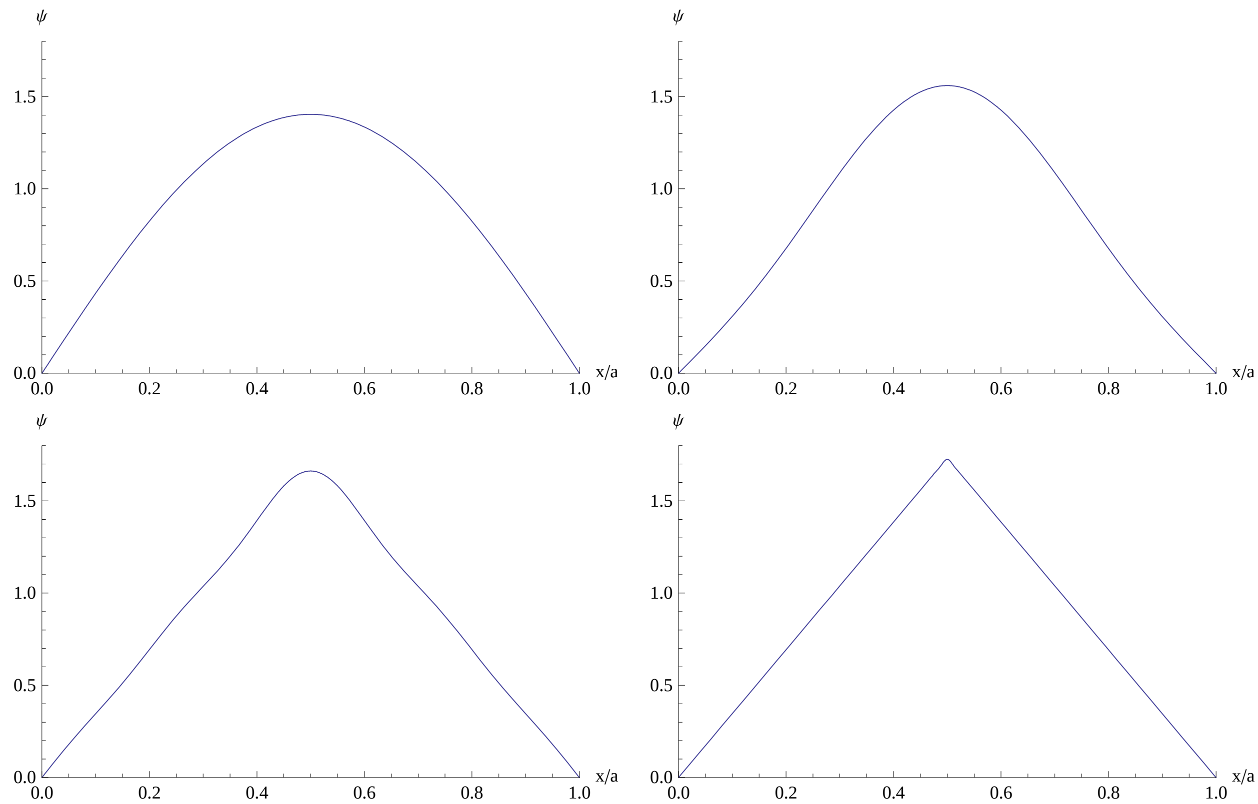

Figure 1: Aproximação da função de onda truncando a série com $n_{\text{max}} = 1, 3, 10$ e 100 termos, respectivamente.

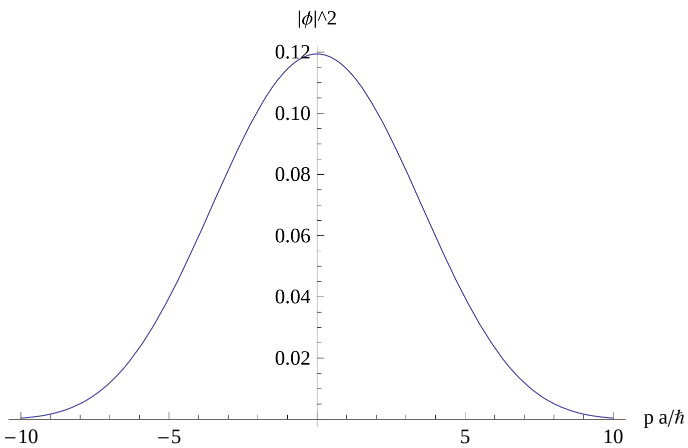

Figure 2: Gráfico da distribuição de probabilidade no espaço dos momenta, $|\phi(p)|^2$

g) Este problema pode ser resolvido de duas maneiras diferentes e ambas ilustram algumas propriedades interessantes e muito úteis.

Método 1

Aqui vamos aplicar o resultado

$$
\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \sum_{1}^{\infty} |A_n|^2 E_n \\
&= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \sum_{n \text{ impar}}^{\infty} \frac{96}{\pi^4} \frac{1}{n^2} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{48}{\pi^2} \sum_{n \text{ impar}}^{\infty} \frac{1}{n^2}
\end{aligned}
$$

Agora usamos

$$
\sum_{n \text{ impar}}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} - \sum_{n \text{ par}}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m)^2} = \frac{3}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{8}
$$

onde usámos o resultado conhecido

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

Pondo tudo junto obtemos

$$
\langle H \rangle = \frac{6\hbar^2}{ma^2}
$$

Método 2

Aqui vamos usar a relação $H = p^2/2m$ para obter

$$
\langle H \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a dx \ \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x)
$$

A dificuldade está na segunda derivada que é nula em todo o lado excepto em $x = a/2$. De facto

$$
\frac{d\psi}{dx} = \frac{A}{a} \ \theta(\frac{a}{2} - x) - \frac{A}{a} \ \theta(x - \frac{a}{2})
$$

onde $\theta(x)$ é a função (*step*) de Heaviside definida por

$$
\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}
$$

Usando uma propriedade da função de Heaviside

$$
\frac{d}{dx} \ \theta(x) = \delta(x)
$$

obtemos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2A}{a}\ \delta(x - \frac{a}{2})$$

e portanto

$$\langle H \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{2A}{a}\right)\int_0^a dx\ \psi(x)\delta(x - \frac{a}{2}) = \frac{\hbar^2}{ma}\,A\,\psi(a/2) = \frac{\hbar^2}{ma}\frac{A^2}{2} = \frac{6\hbar^2}{ma^2}$$

em acordo com o primeiro método.