Prof. Jorge C. Romão (Responsável)

1° Teste: 9 de Novembro de 2013 – 9h30

Duraçao do teste: 1h30

I (4 valores)

Para cada uma das afirmações seguintes diga se são verdadeiras ou falsas. Justifique numa linha a sua resposta, isto é, indique a *razão* sem fazer contas.

1. Se A e B forem operadores hermíticos, então o operador $C = (A+B)^2$ também é hermítico.
2. Considere uma partícula numa caixa de largura $2a$ centrada em $x = 0$ ($V = 0, |x| < a$, $V = \infty, |x| > a$). Sejam $\psi_n(x), n = 1, 2, 3, \ldots$ as funções próprias do operador Hamiltoniano. Então
$$x_{n+2,n} = \int_{-a}^{a} dx\, x\, \psi^*_{n+2}(x)\psi_n(x) = 0$$
3. Considere um poço de potencial a uma dimensão, isto é, $V = -V_0$, $-a < x < a$ e $V = 0$, $x > |a|$. Se tivermos
$$0 < \lambda < \frac{\pi^2}{4}$$
onde $\lambda = 2mV_0\, a^2/\hbar^2$, então existe um só estado ligado para este potencial.
4. Para qualquer estado $|n\rangle$ do oscilador harmónico, a uma dimensão, temos sempre
$$\langle n|x^2|n\rangle = 0.$$

II (8 valores)

Seja um eletrão no poço de potencial infinito, isto é, $V = 0$ para $0 < x < a$ e $V = \infty$ para $x < 0$ e $x > a$.

1. Suponha que o eletrão no instante $t = 0$ se encontra no estado
$$\psi(x, 0) = Au_1(x) - \frac{1}{\sqrt{2}}u_2(x).$$
onde $u_n(x)$ são as funções próprias do operador Hamiltoniano corretamente normalizadas e A é uma constante real. Determine $|A|$.
2. Calcule o valor médio da energia $\langle E\rangle$ no estado $\psi(x, 0)$. Que acontece a $\langle E\rangle$ quando $t > 0$? Justifique a resposta.
3. Sabendo que para $t = 0$, a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $[0, a/2]$ é maior que $1/2$ determine o sinal de A.
4. Sabe-se que a equação de Schrödinger não tem solução para estados estacionários em que $E < V_{\rm min}$, onde $V_{\rm min}$ é o valor mínimo do potencial. Mostre explicitamente que isso se passa para este potencial (poço de potencial infinito). Para isso considere a equação de Schrödinger independente do tempo no intervalo $0 < x < a$ com $E < V_{\rm min} = 0$ e mostre que não tem solução.

III (8 valores)

Considere o seguinte potencial a uma dimensão ($\lambda' > 0$):

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda'}{a}\delta(x) + \begin{cases} \infty & x < -a \\ 0 & x > -a \end{cases}$$

Nas respostas utilize a seguinte convenção para as diferentes regiões do problema:

Região I	$x < -a$
Região II	$-a < x < 0$
Região III	$x > 0$

1. Mostre que a equação para os estados ligados ($E < 0$) neste potencial se escreve

$$\tanh y = \frac{y}{\lambda' - y}$$

   onde $y = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}\, a$.

2. Há sempre estado(s) ligado(s) para este potencial? Justifique a resposta graficamente.

3. Esboce um gráfico da função de onda para o estado fundamental (admitindo que existe).

4. Considere agora o problema da difusão nesse potencial, isto é, admita que $E > 0$ e que para $x > 0$ a função de onda é dada por

$$u_{III}(x) = e^{-ikx} + Re^{ikx}$$

   Calcule R. Mostre que $|R|^2 = 1$.

5. Justifique o resultado da alínea anterior em termos físicos. Para isso calcule o fluxo nas diferentes regiões, I, II e III, e mostre que o fluxo é conservado.

Formulário

- **Poço de potencial infinito**
  $V = 0$ para $0 < x < a$ e $V = \infty$ para $x < 0$ e $x > a$. As funções próprias do operador Hamiltoniano H (i.e. da energia) são:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \qquad , \qquad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\,n^2\,.$$

- **Poço de potencial infinito simétrico**
  $V = 0$ para $-a/2 < x < a/2$ e $V = \infty$ para $x < -a/2$ e $x > a/2$. As funções próprias do operador Hamiltoniano H (i.e. da energia) são ($n = 1, 2, 3, \ldots$):

$$\begin{aligned} u_n^-(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) & E_n^- &= E_0\,(2n)^2 \\ u_n^+(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}}\,\cos\left[(2n-1)\,\frac{\pi}{a}x\right] & E_n^+ &= E_0\,(2n-1)^2 \end{aligned} \qquad E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\,.$$

- **Primitivas para os problemas do poço infinito**

$$\begin{aligned}
&\int dy\ \sin^2(y) = \frac{1}{2}y - \frac{1}{4}\sin(2y) \\
&\int dy\ \sin(ny)\sin(my) = \frac{1}{2(m-n)}\ \sin[y(m-n)] - \frac{1}{2(m+n)}\ \sin[y(m+n)] \quad ; \quad m \neq n \\
&\int dy\, y\sin^2(ny) = \frac{y^2}{4} - \frac{\sin(2ny)y}{4n} - \frac{\cos(2ny)}{8n^2} \\
&\int dy\, y\sin(ny)\sin(my) = \frac{1}{2}\left(\frac{\cos((m-n)y)}{(m-n)^2} - \frac{\cos((m+n)y)}{(m+n)^2} + \frac{y\sin((m-n)y)}{m-n}\right. \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \left. - \frac{y\sin((m+n)y)}{m+n}\right) \quad ; \quad m \neq n
\end{aligned}$$

- **Oscilador harmónico: Polinómios de Hermite**

As funções próprias são

$$u_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, H_n(y)\, e^{-y^2/2}$$

onde $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ e os primeiros polinómios de Hermite são:

$$\begin{aligned}
H_0(y) &= 1 \\
H_1(y) &= 2y \\
H_2(y) &= 4y^2 - 2 \\
H_3(y) &= 8y^3 - 12y \\
H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12
\end{aligned}$$

As energias são dadas por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

- **Oscilador harmónico: Operadores A e A^+**

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(A^+A + \frac{1}{2}\right)$$

onde

$$A = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}, \quad A^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\frac{p}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

com

$$\left[A, A^+\right] = 1$$

As relações inversas são

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(A + A^+\right), \quad p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(A - A^+\right)$$

Os estados corretamente normalizados são

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(A^+\right)^n |0\rangle$$

com $A\,|0\rangle = 0$ e

$$A\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle\,, \quad A^+\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$