

# Mecânica Quântica – Série 3 – Soluções

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2014/2015

(Versão de 22/09/2014)

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)  $|\Psi(x, t)|^2 = 1/2 [(u_1(x) + u_2(x) \cos 3\omega t)^2 + u_2^2(x) \sin^2 3\omega t]$ ;  
c)  $\langle x \rangle = a/2 - 16a/(9\pi^2) \cos 3\omega t$ ; d)  $\langle p \rangle = \frac{8\hbar}{3a} \sin 3\omega t$ ; e)  $\langle H \rangle = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ .

3.9 Resposta no enunciado. Usar o Mathematica.

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

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:  $j(x) = \frac{\hbar k}{m} u^2(x)$

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

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

```
(* Gasirowicz Exemplo 3.5

Este ficheiro destina-se a fazer o Exemplo 3.5 do Gasirowicz 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.

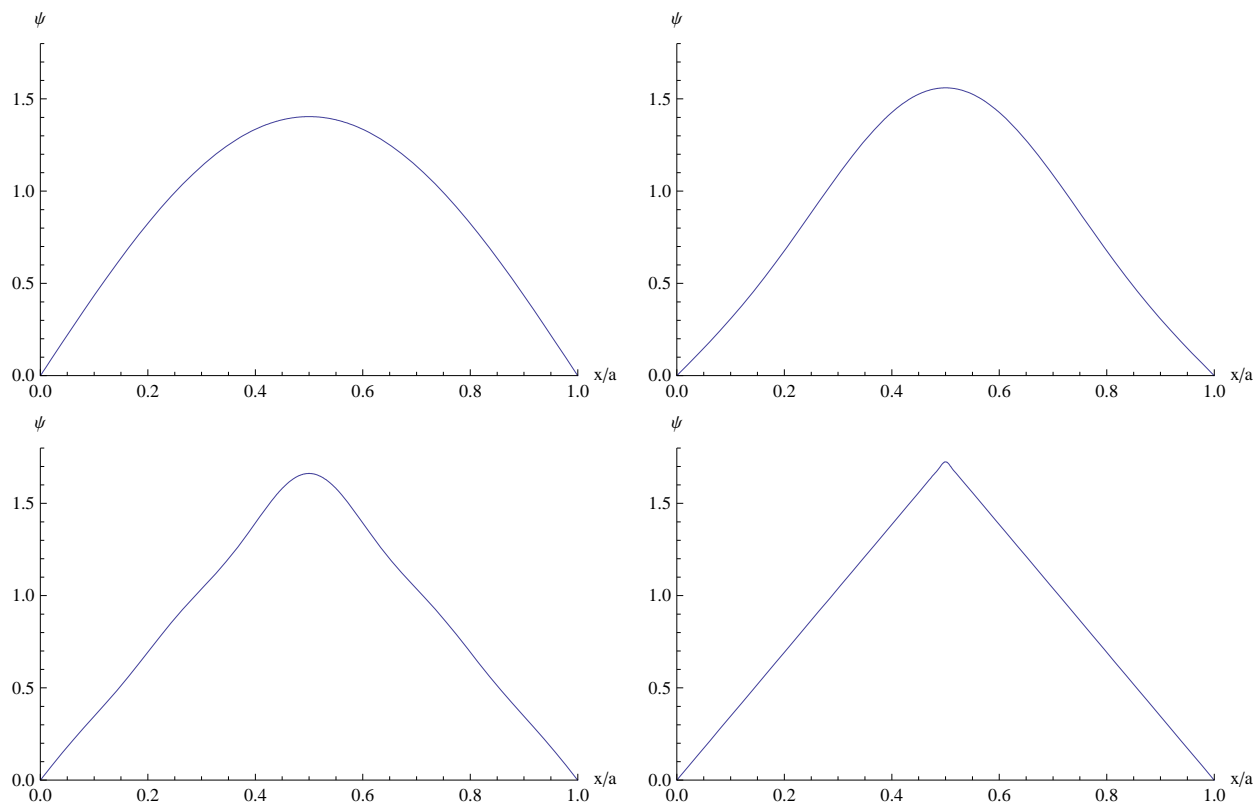


Figure 1: Aproximação da função de onda truncando a série com  $n_{\max} = 1, 3, 10$  e  $100$  termos, respectivamente.

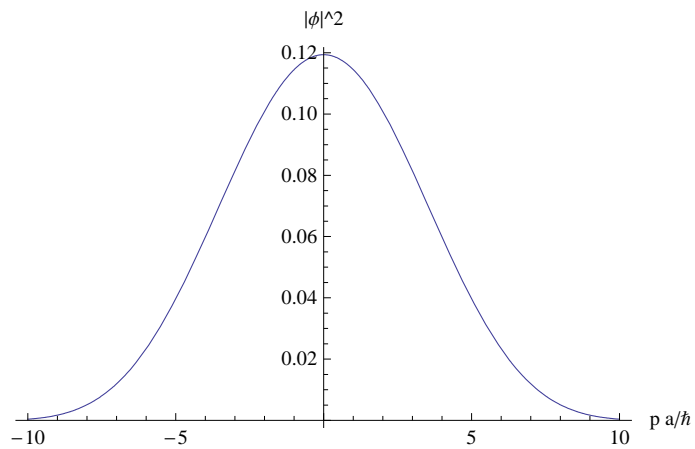


Figure 2: Gráfico da distribuição de probabilidade no espaço dos momenta,  $|\phi(p)|^2$

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

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \sum_1^{\infty} |A_n|^2 E_n \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \sum_{n \text{ ímpar}}^{\infty} \frac{96}{\pi^4} \frac{1}{n^2} = \frac{\hbar^2}{ma^2} \frac{48}{\pi^2} \sum_{n \text{ ímpar}}^{\infty} \frac{1}{n^2}\end{aligned}$$

Agora usamos

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

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

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

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

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

e portanto

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

em acordo com o primeiro método.