

# Mecânica Quântica – Série 3

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2014/2015

(Versão de 22/09/2014)

## 3.1 *Gasiorowicz 3.1*

De entre os operadores seguintes,

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

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  $\lambda$  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.

- Qual é a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Exprime a resposta em eV.
- Suponha que a transição do estado  $n = 2$  para o estado  $n = 1$  é acompanhada pela emissão dum fóton. Qual o comprimento de onda do fóton emitido?

## \*3.4 *Gasiorowicz 3.6*

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

- Qual o valor de  $n$  que corresponde à energia de 1.5 eV?
- 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  $n$  fótons de várias energias são emitidos. O maior comprimento de onda medido foi  $450 \times 10^{-9}$  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 conceitualmente 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  $m = 1, 2, \dots$ . A largura do poço também deve ser incluída. Assim as funções deverão ser

$$\text{uplus}[x, m, a], \quad \text{uminus}[x, m, a]$$

b) Verifique que as funções são ortonormadas, isto é,

$$\begin{aligned} \int_{-a/2}^{a/2} \text{uplus}[x, m, a] \text{uplus}[x, n, a] dx &= \delta_{nm}, \\ \int_{-a/2}^{a/2} \text{uminus}[x, m, a] \text{uminus}[x, n, a] dx &= \delta_{nm}, \\ \int_{-a/2}^{a/2} \text{uplus}[x, m, a] \text{uminus}[x, n, a] dx &= 0 \end{aligned}$$

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

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

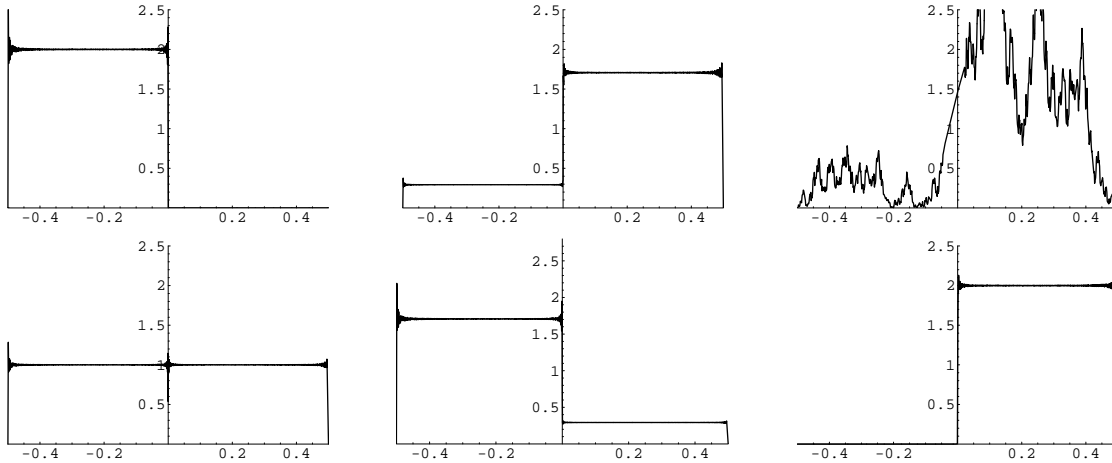


Figure 1: Densidade de probabilidade  $|\psi(x,t)|^2$  no intervalo  $[-0.5, 0.5]$  num poço de potencial com  $a = 1$  para  $\theta = 0, \pi/4, 1, \pi/2, 3\pi/4, \pi$ .  $\psi(x,t)$  foi obtida somando 500 termos na expansão.

onde

$$\theta = \frac{\pi^2 \hbar^2 t}{2ma^2 \hbar}$$

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

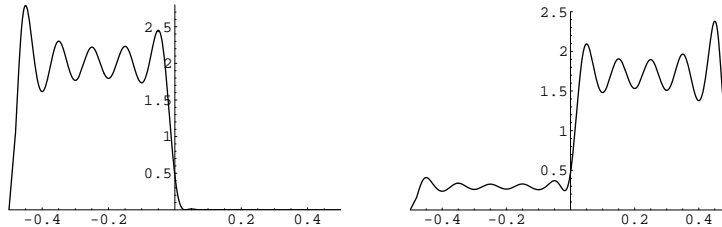


Figure 2: Densidade de probabilidade  $|\psi(x,t)|^2$  no intervalo  $[-0.5, 0.5]$  num poço de potencial com  $a = 1$  para  $\theta = 0, \pi/4$ .  $\psi(x,t)$  foi obtida somando 10 termos na expansão. Comparar com a Figura 1.

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:

$$\Psi(x, 0) = A [u_1(x) + u_2(x)].$$

- 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 respectivas? 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  $\omega t$ .
- 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.

**\*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  $((e^{iz} - e^{-iz}) / (2i))^5$ .

**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

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

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  $t = 0$ ,

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

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  $\langle H \rangle$ .